Universidade Federal de Goiás
Instituto de Física
Programa de Pós-Graduação em Física

Udson Cabral Mendes

Condutância em Nanofios Magnéticos Diluídos

Goiânia

2010

Udson Cabral Mendes

Condutância em Nanofios Magnéticos Diluídos

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal de Goiás como parte dos requisitos para a obtenção do título de Mestre em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Ardiley Torres Alvelar*

Co-orientador: *Prof. Dr. Salviano de Araújo Leão*

Goiânia

2010

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
(GPT/BC/UFG)

Mendes, Udson Cabral.
M537c Condutância em nanofios magnéticos diluídos [manuscrito]/
Udson Cabral Mendes – 2010.
97 f.

Orientador: Prof. Dr. Ardiley Torres Avelar, Co-orientador: Prof. Dr. Salviano de Araújo Leão.
Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Goiás, Instituto de Física, 2010

Bibliografia
Inclui lista figuras e de tabelas.

1. Nanofios Magnéticos 2. Condutância. I. Título.

CDU::621.318.1

A minha mãe Cleusa.

"Keep Walking..."
Johnnie Walker

Agradecimentos

- Ao Prof. Salviano de Araújo Leão pela orientação e principalmente pela amizidade e paciência.
- Ao Prof. Ardiley Torres Avelar pela oportunidade de fazer o mestrado em semicondutores.
- Ao Prof. Márcio Adriano Rodrigues de Souza pelas discussões sobre o trabalho.
- Ao Prof. José Carlos Egues pela oportunidade realizar este trabalho junto a seu grupo, e por todo o suporte.
- A minha mãe e aos meus irmãos, Udenys, Wendel e Weder, pelo apoio.
- Aos amigos de Anderson (Fire Ball), Lucas (Modesto), David, José Carlos, Lilian, Ronaldo, Sebastião que sempre nos acolheu muito bem em Itaberai, Larissa, Rafael (Thephunto), Emilio, Bruno e Michelle pela ótima convivência durante estes anos de mestrado. E principalmente pelos longos papos acompahados de uma boa e gelada cerveja.
- Aos amigos Alexandre (Rasgado), Tiago (Fozy) pela amizade, partidas de futebol e pelas pizzas na sexta-feira a noite.
- Aos amigos Juliano e Júnio pela amizade de tantos anos.
- Ao Gerson, aluno de doutorado do prof. José Carlos Egues, pela ajuda e discuções sobre o trabalho e a ótima recepeção nas minha idas a São Carlos.
- Ao Instituto de Física da UFG e Pós-Graduação, por toda a infraestrutura.
- A Sabrinna, secretária da pós-graduação, por toda sua eficiência.

Este trabalho foi financiado pela CAPES, FAPESP, e CNPq.

Resumo

Investigamos nanofios de semicondutores magnéticos diluídos (DMSs - *Diluted Magnetic Semiconductors*) do tipo caroço-casca com dopagem remota tipo-n. A incorporação dos íons de Mn^{+2}, que atuam como impurezas de *spin* 5/2 no caroço do fio, faz surgir um forte acoplamento de troca *s-d* entre os elétrons do fio e aqueles dos níveis d do íon Mn^{+2}. Com a aplicação de um campo magnético externo ao longo do eixo do fio, na aproximação de campo médio, a interação de troca *s-d* gera um potencial dependente do spin na região do caroço do fio. Um potencial de *gate* é aplicado radialmente ao nanofio, para obtermos um certo controle sobre a densidade eletrônica do fio. Calculamos a estrutura eletrônica do nanofio de DMSs usando o modelo da massa efetiva, tanto na aproximação de Hartree quanto na teoria do funcional da densidade dependente de spin (SDFT - *Spin Density Functional Theory*). Calculamos a condutância do nanofio usando a formulação de Landauer-Büttiker no regime de resposta linear, o que de modo geral, resultou numa condutância total com *platôs* bem definidos em $G_T = 2, 6, 10\, G_0$ ($G_0 = e^2/h$ é o quanta de condutância), o que ocorreu porque no sistema investigado a primeira subbanda é duplamente degenerada (degenerescência de spin) e as outras duas são quadruplamente degenerada (degenerescência de spin e de momento angular orbital). Na ausência de um campo magnético observamos que ao levarmos em conta os efeitos de troca e correlação, os estados que possuem autovalor de L_z diferente de zero se polarizam enquanto que os que possuem $l = 0$ não se polarizam. Essa não-polarização do nível com autovalor de L_z nulo sugere que, talvez, a anomalia 0,7 (o surgimento de dois *platôs* um em $G = 0,7G_0$ e outro em $G = G_0$) existente em fios quânticos com geometria de *split-gate* esteja relacionada com a geometria do fio. Os resultados obtidos para a energia total mostram que há uma competição entre os estados ferromagnético e paramagnéticos.

Abstract

We investigate core-shell nanowires of diluted magnetic semiconductors (DMS) with remote n-type modulation doping. The incorporation of Mn^2 ions acting as spin 5/2 impurities in the core region of the wire gives rise to a strong s-d exchange coupling between electrons in the wire and those of the d levels of the Mn^2 ions. Applying an external magnetic field along the axis of the wire, within the mean field approximation, the s-d exchange generates a spin-dependent core potential. A gate voltage is applied radially to wire, to obtain some control over the density of the wire. Electronic strucutre of the wire was calculated within the effective mass approximation, in both approximations Hartree and spin density functional theory. We calculated the conductance of wire using the Landauer-Büttiker formulation in the linear response regime, which generally results in a total conductance with well-defined plateaus in $G_T = 2, 6, 10\, G_0$ ($G_0 = e^2/h$ is the quanta of conductance), which occurred because in the system investigated the first level is twofold degenerated (spin degenerescence) and the others are fourfold degenerated (spin degenerescence and orbital angular momentum). In the absence of a magnetic field we observe that when we take into account the effects of exchange and correlation, the states with eigenvalues of L_z nonzero will be polarized while those with $l = 0$ isn't polarized. This unpolarized level with eigenvalue of L_z null suggests that, perhaps, the 0.7 anomaly (the emergence of two plateau at $G = 0.7G_0$ and the other in $G = G_0$) quantum wires on existing geometry of split-gate is related to the geometry of the wire. The results for total energy show that there are a competition between the ferromagnetic and paramagnetic states.

Conteúdo

Sumário **iii**

Lista de Figuras **v**

Lista de Tabelas **x**

1 Introdução **1**

1.1 Nanofios ou Fios Quânticos 4

2 Propriedades dos Materiais Semicondutores **10**

2.1 As Aproximações na Teoria de Banda 12

2.1.1 Aproximação de Born-Oppenheimer 13

2.2 Teoria do Campo Autoconsistente 14

2.2.1 Aproximação de Hartree 14

2.2.2 Teoria do Funcional da Densidade 16

2.3 Semicondutores Magnéticos Diluídos 19

2.3.1 Estrutura Cristalina 19

2.3.2 Propriedades Magnéticas 20

2.4 Condutância no Formalismo de Landauer-Büttiker 23

2.4.1 Corrente no Regime de Resposta Linear 25

3 Descrição Teórica do Problema **28**

3.1 Descrição do Sistema Físico e Cálculo Autoconsistente 28

3.2 Solução da Equação de Poisson 32
3.3 Potencial de Troca e Correlação 34
3.4 Solução da Equação de Schrödinger 36
3.4.1 Evolução da Função de Onda Em Tempo Real 36
3.4.2 Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário 39

4 Resultados **41**
4.1 Aproximação de Hartree 42
4.2 Efeitos de Troca 47
4.3 Efeitos de Troca e Correlação 51

5 Conclusões e Perspectivas **60**

Apêndices **61**

A Hamiltoniano do Sistema **62**
A.1 Campo magnético uniforme 62
A.2 Autovalores de H_z 65
A.3 Hamiltoniano H em Coordenadas Cilíndricas 66

B Densidade de Estados **67**

C Cálculo do Número de Portadores **70**

D Parâmetros para CdMnTe **72**

E Aproximação para o Operador $\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right)$ **73**

F Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário **76**

Referências Bibliográficas **77**

Lista de Figuras

1.1 (a) Dois semicondutores separados, A e B, caracterizados por suas respectivas energias de *gap* E_g^A e E_g^B e descontinuidades das bandas (ΔE_c e ΔE_v). (b) Perfil da banda de condução em uma junção tipo BAB, a qual forma um potencial de confinamento em uma direção espacial. Esta é a barreira de potencial. 2

1.2 Linha temporal da demonstração experimental de alguns efeitos dependente de spin em semicondutores. Imagem retirada da revista Nature Physics. Vol. **3**, Pag. 153 (2007). 3

1.3 A condutância, G, cresce em passos de $e^2/\pi\hbar$ com o aumento do potencial de *gate*, ou seja, $G = Ne^2/\pi\hbar$, sendo N o número de canais que podem conduzir. A heteroestrutura usada para obter estes resultados é conhecida como fio quântico de geometria de *split-gate*. Figura retirada do Phys. Rev. Lett, Vol. **60**, 848, (1988). 5

1.4 Fio quântico na geometria de *split-gate*. Um gás bidimensional é formando no plano x-y, aplicando uma diferença de potencial entre os *gates* uma constrição é formada na direção y fazendo que o gás torne-se unidimensional ao longo do eixo x. 6

1.5 Imagem de microscopia eletrônica de varredura dos nanofios de DMS crescidos por MBE. Neste artigo os autores mostram que os íons de Mn incorporaram com perfeição na rede cristalina do nanofio, e que os nanofios produzidos são de altíssima qualidade. Figura retirada da Nano Lett., Vol. **8**, 4061, (2008). 7

2.1 Representação da estrutura blenda de zinco para o $Cd_{(1-x)}Mn_xTe$. Esta representação é a mesma para os materiais do tipo $A^{II}_{(1-x)}Mn_xB^{VI}$. 20

2.2 Nanofio conectado a dois contatos, com voltagem de fonte-dreno V_{SD}. No condutor existem apenas alguns níveis eletrônicos disponíveis, enquanto que nos contatos existem infinitos níveis ocupados. O número de canais disponíveis para condução é controlado pela voltagem de *gate*. 24

3.1 Representação esquemática do nanofio. O fato de poço quântico ser magnético nos permite, com ação de campo magnético, mudar a profundidade dele, os elétrons com spin down sente um potencial de confinamento maior que aqueles com spin up. O potencial de *gate* nos dá um controle sobre o número de portadores confinados. 29

3.2 Representação do procedimento autoconsistente. 1° Escolhemos a densidade inicial nula. 2° calcula-se o potencial efetivo e 3° obtêm se os autovetores e autovalores da eq. de Schrödinger. Com estes autovetores obtemos uma nova densidade e repetimos o ciclo até que a convergência seja obtida. 32

3.3 Discretização não-uniforme da rede. 33

4.1 Gráfico em escala de cores da transcondutância em função de V_G e B, na aproximação de Hartree. Todos os níveis seguem a função de Brillouin até um campo de 2 T que é quando ela satura. Observa-se quatro cruzamentos dos níveis eletrônicos. 43

4.2 Os gráficos ilustram o comportamento da condutância do sistema em função do potencial de *gate*. (a) Aqui todos os níveis são degenerados em spin e momento angular orbital ($l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$). Veja que os níveis com $l = \pm1$, segundo *platô* são degenerados, esta degenerescência é quebrada com aplicação de um campo magnético. (b) Nesse caso a degenerescência de spin é quebrada fazendo que todos os níveis se abram em dois, enquanto que a degenerescência de momento angular é quebrada nos níveis com $l = \pm1, \pm2, \ldots$, já para $l = 0$ não há degenerescência de momento angular orbital a ser quebrada. 44

4.3 Os gráficos ilustram o comportamento das subbandas de energia em função do potencial de *gate* na ausência de campo magnético e na presença dele. (a) Para $B = 0$ T, todos as subbandas estão degeneradas tanto em spin quanto em momento angular orbital. (b) Todas as degenerescências foram quebradas e este gráfico apresenta o comportamento dos níveis eletrônicos do sistema um pouco antes do cruzamento mostrado na Fig. 4.1, próximo ao ponto $V_G \approx 479$ mV, ocorrer. (c) Aqui é onde os níveis marcados com uma seta cruzam simultaneamente o nível de Fermi. (d) Campo logo após o cruzamento ter acontecido. . . . 45

4.4 Gráfico em escala de cores da transcondutância em função de V_G e B. Além do potencial de Hartree, efeitos de troca foram incluídos no cálculo autoconsistente. As mesmas característica observadas a campo finito na seção anterior também são observadas aqui. 48

4.5 O gráfico ilustra o comportamento das energias das subbandas em função do potencial de *gate* para $B = 0$ T. Nesse caso, a degenerescência do momento angular orbital não foi quebrada, portanto, no gráfico acima temos dez curvas, sendo cinco para cada spin: sendo uma para $l = 0$, duas para $l = \pm1$ e outras duas para $l = \pm2$. Nota-se que, mesmo na ausência de um campo magnético, os níveis de energia devido a elétrons com spin *up* e spin *down* separam-se ao cruzar o nível de Fermi. O tamanho da separação diminui com a subbanda. . . . 49

4.6 Os gráficos ilustram o comportamento da condutância do nanofio em função do potencial de *gate*. (a) Condutância para $B = 0$ T, observa-se uma separação da condutância em duas componentes, uma para spin *up* e outra para spin *down*. As componentes z do momento angular não separadas. 50

4.7 Gráfico da transcondutância em função de B e V_G. O comportamento a campo finito é semelhante ao caso que só considera o potencial de Hartree. Vemos que em $B = 0$ T as curvas da transcondutância em torno de 300 mV e 460 mV estão abertas, enquanto a curva em 230 mV não apresenta abertura. Portanto, quando a primeira subbanda cruza o nível de Fermi o sistema permanece paramagnético, já quando as demais cruzam o nanofio sofre uma transição de fase do estado paramagnético para o ferromagnético. 51

4.8 Comportamento da condutância do nanofio em função do potencial de *gate*. Observa-se que na mudança do primeiro para o segundo platô e do segundo para o terceiro, a condutância para elétrons com spin *up* é diferente da condutância para aqueles com spin *down*. 53

4.9 O gráfico ilustra o comportamento das energias das subbandas em função do potencial de *gate* para $B = 0$ T. Nesse caso, a degenerescência do momento angular orbital não foi quebrada, portanto, no gráfico acima temos dez curvas, sendo cinco para cada spin: sendo uma para $l = 0$, duas para $l = \pm 1$ e outras duas para $l = \pm 2$. Note que em $l = 0$, assim como no gráfico da condutância, a degenerescência em spin não foi quebrada, enquanto que para $l = \pm 1, \pm 2, \ldots$ ela é quebrada. 54

4.10 Energia total do sistema em função do potencial de *gate* para dois tipos de cálculos, um com B 0 T (linha preta) caso (II) e o outro com $B = 0$ T (linha vermelha) caso (I). Em (a) temos a energia total em função de V_G, enquanto nas figuras (b), (c) e (d) mostramos o comportamento da energia total nas regiões em que a sua inclinação muda. Em (b) o caso com B 0 T possui energia total maior que o caso $B = 0$ T, enquanto que em (c) e (d) observamos um cruzamento das energias totais. Este cruzamento indica que o estado ferromagnético está perdendo sua polarização, pois o estado não polarizado para o caso B 0 T possui energia total maior que o caso $B = 0$ T. 56

4.11 Condutância total do sistema para os dois procedimentos autoconsistente feitos. A curva preta é para o caso (I) $B = 0$ T e a linha vermelha é para o caso (II) B 0. Nas Figs. (b), (c) e (d) temos ampliações das regiões onde ocorrem as mudanças de *platô* na figura (a). Em (b) e (c) a condutância do caso B 0 T é menor do que a do caso $B = 0$ T enquanto que em (c) temos um cruzamento das condutâncias. 58

Lista de Tabelas

4.1 Parâmetros usados nos cálculos de estrutura eletrônica e condutância. A energia de Fermi é mantida constante durante o cálculo autoconsistente da estrutura eletrônica. 42

4.2 Cruzamentos que ocorrem no gráfico da transcondutância 4.1. Os pontos 1,2 e 3 ocorrem para spin opostos, o ponto apresenta um cruzamento de mesmo spin. Note que somente no ponto 1 temos um cruzamento com a mesma simetria do momento angular orbital. 46

D.1 *Parâmetros para o* $Cd_{1-x}Mn_xTe$ 72

Capítulo 1

Introdução

A revolução tecnológica causada pelos materiais semicondutores teve o seu início em 23 de dezembro de 1947, quando J. Bardeen, W. Schokley e W.H. Brattain demonstraram o efeito do transistor em um cristal de germânio (trabalho premiado com o Nobel de Física de 1956). Desde então os materiais semicondutores têm sido responsáveis por inúmeros avanços tanto no desenvolvimento de novas tecnologias[1,2] quanto na compreensão de novos fenômenos físicos.[3] O desenvolvimento e aprimoramento das técnicas de crescimento de cristais semicondutores, como a Epitaxia por Feixe Molecular (*Molecular Beam Epitaxy*-MBE),[4] tornou possível o crescimento de camadas atômicas individuais uma após a outra, produzindo redes cristalinas artificiais e interfaces quase perfeitas. Com o uso dessas técnicas de fabricação juntamente com avançadas técnicas de nanolitografia e de corrosão (*etching*) química, atualmente consegue-se crescer heteroestruturas quase abruptas de ligas binárias e ternárias, por exemplo, as ligas dos elementos II-VI da tabela periódica como as ligas de ZnCdSe e ZnSe devido a proximidade de suas estruturas e parâmetros de rede.

Os dispositivos semicondutores são construídos de modo a aproveitar uma de suas principais características: o *gap* de energia (Eg) que é a diferença de energia entre a banda de condução e banda de valência (ver Fig. 1.1). Na Fig. 1.1 foram crescidos dois materiais A e B com *gaps* de energia diferentes. A diferença entre as energias dos *gaps* (ΔE_g) gera descontinuidades entre as bandas de valência (ΔE_v) e de condução (ΔE_c) sendo que ($\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v$), de forma que cria-se um potencial degrau. Dessa forma pode-se construir

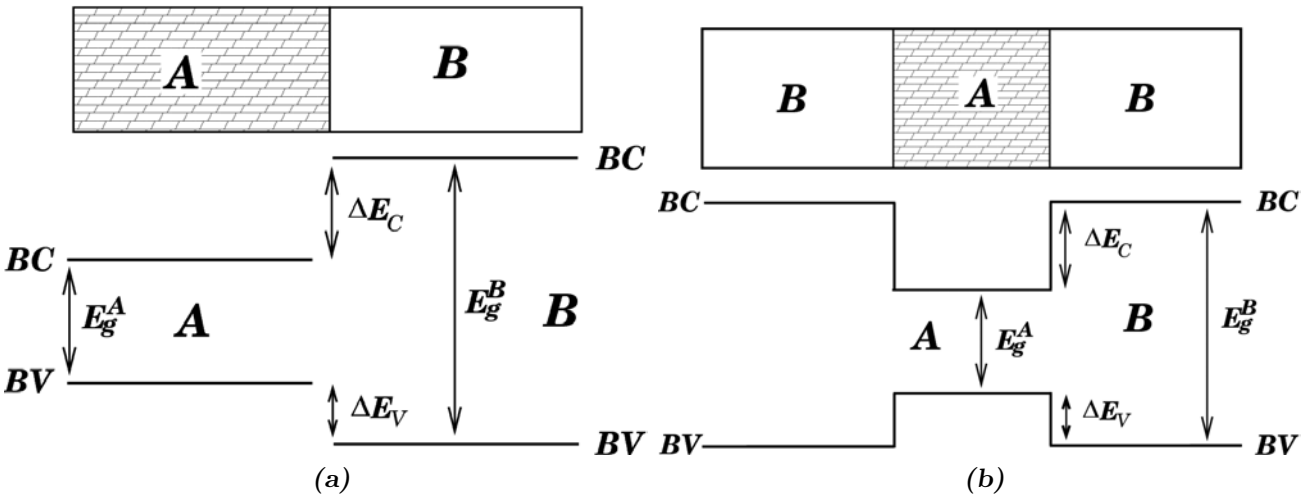


Figura 1.1: *(a) Dois semicondutores separados, A e B, caracterizados por suas respectivas energias de* gap E_g^A *e* E_g^B *e descontinuidades das bandas* (ΔE_c *e* ΔE_v). *(b) Perfil da banda de condução em uma junção tipo BAB, a qual forma um potencial de confinamento em uma direção espacial. Esta é a barreira de potencial.*

estruturas que confinam espacialmente os portadores em uma (poços quânticos), duas (fios quânticos) e três (pontos quânticos) dimensões. Essas heteroestruturas estão sendo o objeto de muitas pesquisas.[5]

Atualmente os dispositivos semicondutores tradicionais estão chegando no seu limite de operação e de tamanho (escala atômica). Substituir a atual indústria de dispositivos semicondutores por uma nova teria um custo da ordem de 3,5 bilhões de dólares, e além disso, 25% dos equipamentos da linha de produção tornam-se obsoletos a cada três anos.[2] Uma alternativa viável economicamente consiste em investir na busca de propriedades e características ainda não exploradas destes dispositivos, as quais possam contribuir de algum modo para a melhoria do seu desempenho. Em 1988 dois grupos descobriram, independentemente, a Magneto-Resistência Gigante (*Giant Magnetoresistence* - GMR),[6,7] essa descoberta causou duas revoluções: uma tecnológica[8] e outra científica.[1,2] A magneto-resistência, descoberta por William Thomson (Lord Kelvin) em 1857, é a mudança na resistência elétrica de alguns materiais sujeitos a um campo magnético externo. Tipicamente, a mudança na resistência elétrica devido a um campo magnético externo nos materiais usados pela indústria era de 5%, já com a descoberta em 1988 da magneto-resistência gigante, esta mudança passou a ser por volta de 50% a uma tempera-

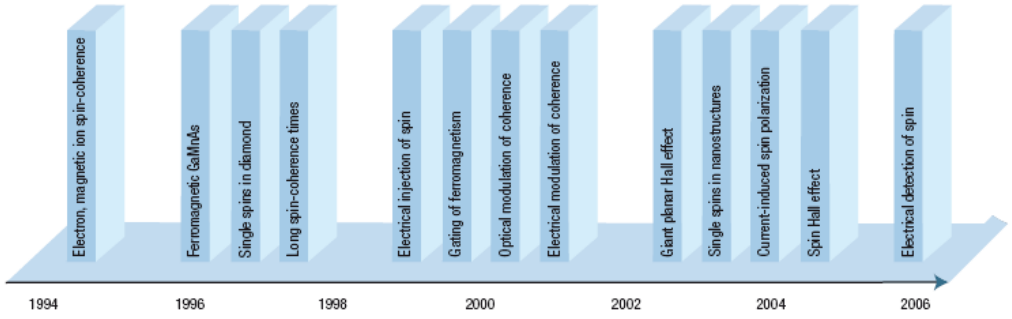


Figura 1.2: *Linha temporal da demonstração experimental de alguns efeitos dependente de spin em semicondutores. Imagem retirada da revista Nature Physics. Vol.* ***3****, Pag. 153 (2007).*

tura de 4 K. Esse aumento drástico na magneto-resistência deve-se primeiramente ao alto grau de pureza das amostras que foram obtidas por MBE, e principalmente ao spin dos elétrons, uma característica intrínseca deles, a qual começa a ter um papel significativo nas propriedades eletrônicas e ópticas dos materiais.

Com a descoberta da magneto-resistência gigante, iniciou-se uma nova área de pesquisa, a spintrônica, tanto em metais quanto em semicondutores. A spintrônica em semicondutores teve um maior desenvolvimento a partir da década de 90 quando vários efeitos começaram a ser demonstrados (ver Fig. 1.2). O rápido desenvolvimento em busca de efeitos físicos que sejam relevantes a temperatura ambiente sugere que dispositivos baseados em materiais semicondutores que fazem uso da spintrônica podem tornar-se aplicáveis num futuro próximo.[2]

Uma das propriedades físicas bastante estudas nos últimos anos é a interação spin-orbita,[5] dela é possível manipular o spin dos elétrons usando um potencial de *gate*,[9] ou seja, um campo elétrico ao invés de campos magnéticos. Um exemplo de aplicação da interação spin-orbita é o transistor de efeito de campo de spin (Spin-FET - *Spin Field Effect Transitor*) que foi proposto em 1990 por Datta e Das[10] é só no último ano que a realização experimental deste dispositivo tornou-se realidade.[11]

Além da manipulação da dinâmica de spins em semicondutores não magnéticos, nos semicondutores magnéticos diluídos (*Diluted Magnetic Semiconductors* - DMS) ou simplesmente semicondutores semimagnéticos é possível, por exemplo o controle do vetor magne-

tização, usando campos elétricos,[12] o que a princípio é improvável em sistemas metálicos. Esta manipulação só é possível porque a concentração de buracos vária com o campo elétrico e, através disso, a anisotropia magnética pode ser controlada, permitindo a manipulação do vetor magnetização, pois a magnetização depende da concentração de buracos na amostra.

Para se estudar os efeitos de spin nos semicondutores, nos últimos anos a comunidade científica investiu seus esforços nos DMS. Estes semicondutores semimagnéticos são constituídos por ligas do tipo $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ ou $A^{III}_{1-x}Mn_xB^{V}$ obtidas adicionando-se manganês aos compostos semicondutores do tipo II-VI ou III-V. Nestas ligas os portadores passam a interagir com íons magnéticos do Mn, via interação *sp-d*, o que os tornam interessantes não só por esta, mas por várias outras razões.[5]

Nos semicondutores magnéticos diluídos é possível controlar o *gap* de energia, através da interação entre os portadores e os íons magnéticos, aplicando um campo magnético.[13] As propriedades físicas, por exemplo, do $Cd_{1-x}Mn_xTe$ são baseadas na forte interação de troca *sp-d* entre os elétrons ou buracos quase-livres com os elétrons *3d* dos íons de Mn^{2+}. Essa interação tem forte influência sobre as propriedades de magneto-transporte e magneto-ópticas do sistema.

Recentemente foi observado ferromagnetismo nos DMS do tipo II-VI,[14] tanto em poços quânticos[15] quanto em pontos quânticos.[16,17] Em nanofios, ainda não houve nenhuma observação ou estudo teórico sobre o tópico. Os primeiros nanofios de DMS fabricados por MBE foram produzidos por W. Zaleszczyk *et. al.*[18] Nesse artigo eles fazem a caracterização dos nanofios e mostram que o Mn foi incorporado perfeitamente no sistema, e que os nanofios produzidos são de altíssima qualidade.

1.1 Nanofios ou Fios Quânticos

Os nanofios ou fios quânticos formam uma classe de materiais que confinam os portadores em duas dimensões espaciais. Os efeitos de confinamento em conjunto com os de spin podem conduzir a novos efeitos ou intensificar algum efeito visto no *bulk*, gás de elétrons bidimensional ou num ponto quântico. Um dos efeitos marcantes dos nanofios é a quantização da

condutância, ilustrada na Fig. 1.3, ela foi descoberta independentemente por van Wees *et. al*[19] e Wharam *et. al*.[20] Os dois mostraram que

$$G = NG_0, \tag{1.1}$$

sendo $G_0 = e^2/\pi\hbar$ o quantum de condutância e N o número de canais disponíveis para condução, N aumenta com o aumento do potencial de *gate*.

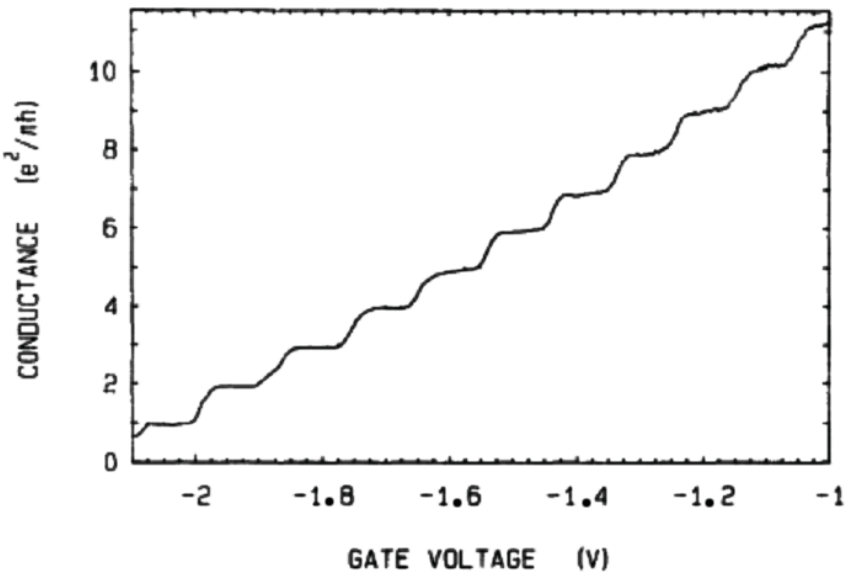


Figura 1.3: *A condutância, G, cresce em passos de $e^2/\pi\hbar$ com o aumento do potencial de* gate, *ou seja, $G = Ne^2/\pi\hbar$, sendo N o número de canais que podem conduzir. A heteroestrutura usada para obter estes resultados é conhecida como fio quântico de geometria de* split-gate. *Figura retirada do Phys. Rev. Lett, Vol.* ***60****, 848, (1988).*

As propriedades do fio quântico na geometria de *split-gate* (ver Fig. 1.4) tem sido bastantes estudadas desde a descoberta da quantização da condutância. Nesta geometria um gás de elétrons bidimensional está confinado na direção z através de um confinamento estrutural, ou seja, um poço quântico. Introduzindo duas placas metálicas (*Gates*) com potencial V_G separadas por uma pequena distância, produz-se um confinamento eletrostático ao longo da direção y, fazendo com que o gás bidimensional torne-se unidimensional, livre apenas na direção x. O confinamento eletrostático controla a dimensionalidade do gás, ou seja, é possível sair de um regime bidimensional para um unidimensional.

Até hoje a condutância de fios quânticos é um tópico de grande interesse,[21,22] pois

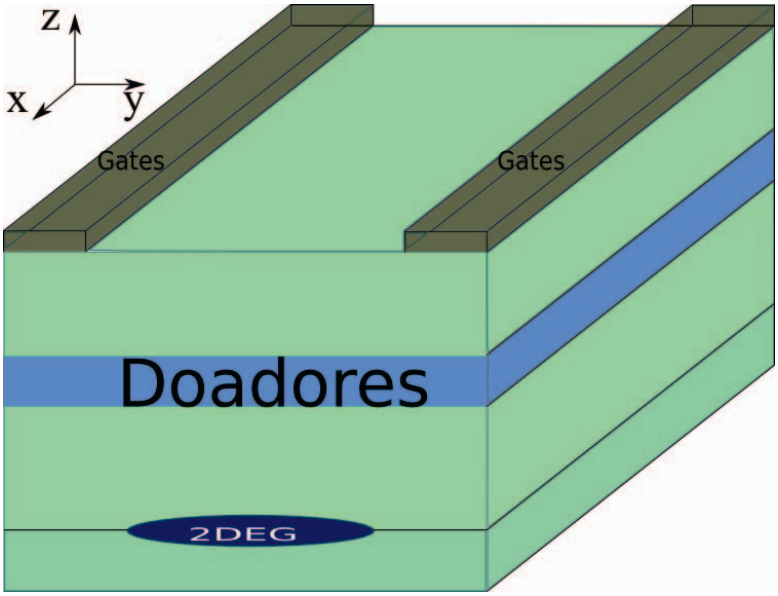


Figura 1.4: *Fio quântico na geometria de* split-gate. *Um gás bidimensional é formando no plano x-y, aplicando uma diferença de potencial entre os* gates *uma constrição é formada na direção y fazendo que o gás torne-se unidimensional ao longo do eixo x.*

nesses sistemas a condutância apresenta uma característica ainda não explicada, conhecida como anomalia 0,7 da condutância, que é o surgimento de um platô em $G = 0{,}7G_0$ e outro em $G = G_0$. Somente em 1996 que Thomas *et. al.*[23] chamaram a atenção para estes platôs, mas olhando com cuidado a Fig. 1.3 vemos que existe um pequeno platô em $G = 0{,}7G_0$ e outro em $G = G_0$, ou seja, a anomalia 0,7 já era vista desde os primeiros experimentos na geometria de *split-gate*. O modelo de partículas não-interagentes não explica o surgimento do platô em $G = 0{,}7G_0$, e uma teoria de muitos corpo é necessária para explicar esse fenômeno. As principais teorias que tentam explicar a origem da anomalia 0,7 são as baseadas na polarização espontânea do spin eletrônico,[23,24] no efeito Kondo[21] e no líquido de Luttinger.[25]

Além dos fios quânticos de geometria de *split-gate*, existem nanofios de geometria cilíndrica, esses confinam estruturalmente os portadores em duas dimensões, não sendo necessário um confinamento eletrostático. Recentemente consegue-se crescer, via MBE, nanofios de semicondutores magnéticos diluídos compostos por ZnMnTe de alta qualidade.[18] A Fig. 1.5 mostra imagens feita por microscopia eletrônica de varredura de emissão de campo (FE-SEM *Field-Emission Scanning Electron Microscopy*) dos nanofios de ZnMnTe. Os fios quânticos de DMS

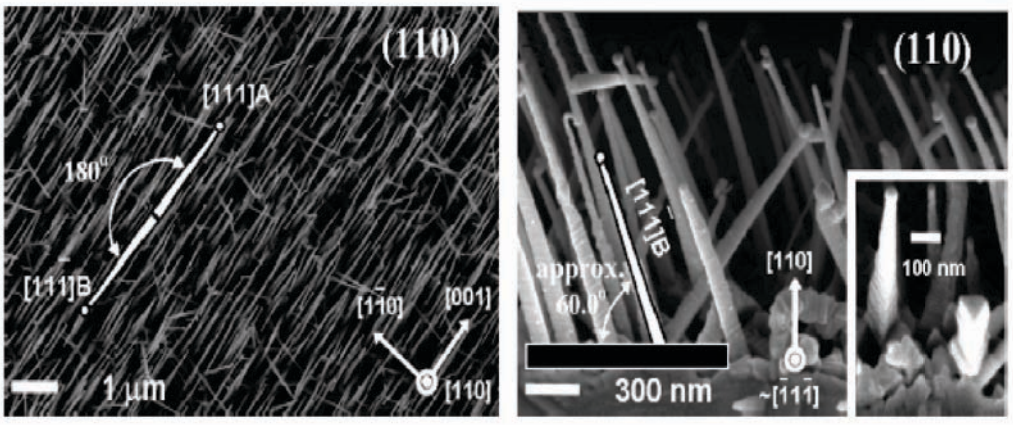


Figura 1.5: *Imagem de microscopia eletrônica de varredura dos nanofios de DMS crescidos por MBE. Neste artigo os autores mostram que os íons de Mn incorporaram com perfeição na rede cristalina do nanofio, e que os nanofios produzidos são de altíssima qualidade. Figura retirada da Nano Lett., Vol.* ***8****, 4061, (2008).*

provêem uma maneira de investigar efeitos de baixa dimensionalidade e propriedades de spin simultaneamente. A incorporação dos íons de Mn, que atuam como impurezas de spin 5/2, dá origem a um forte acoplamento de troca *s-d* entre os elétrons no fio e aqueles dos níveis *d* do Mn.

Outra característica marcante do sistema é que ele possui simetria angular, e devido a isso o momento angular orbital do sistema é bem definido, enquanto que nos fios quânticos de *split-gate*, ele já não é bem definido. Esse fato abre a possibilidade de estudos da ação conjunta dos efeitos de spin e momento angular orbital sobre as propriedades eletrônicas do sistema. Com todas estas características importantes aliadas ao fato de que as pesquisas tanto teóricas quanto experimentais das propriedades físicas dos nanofios cilíndricos ainda são escassas, nos propiciou uma ótima oportunidade para estudarmos as propriedades eletrônicas desse sistema para tentar compreender como os efeitos da forma do confinamento e os de muitos corpos, que nesse sistema são dependentes de spin, influenciam na estrutura eletrônica, e consequentemente, na magnetocondutância do fio quântico. Motivados principalmente pela existência da anomalia 0,7 em fios quânticos de geometria de *split-gate*, resolvemos estudar a condutância nesse nanofio de DMS, pois nele as propriedades dependentes de spin são aumentadas pela interação de troca *s-d*.

O sistema estudado é composto por um nanofio do tipo caroço-casca (*core-shell*), sendo o caroço (*core*) composto por CdMnTe e a casca (*shell*) por CdMgTe, com dopagem remota do tipo-n Fig. 3.1. Para obter a estrutura eletrônica desse sistema, e de tantos outros, é necessário resolver a equação de Schrödinger de várias partículas interagentes, o que é impossível hoje devido ao grande número de graus de liberdade do sistema. Mas existem várias aproximações que tornam possível o cálculo, são elas: aproximação de Hartree, Hartree-Fock, e teoria do funcional da densidade (DFT- *Density Functional Theory*). A primeira leva em conta somente o potencial de Coulomb, ou seja, o potencial de Hartree. Na segunda, além do potencial de Hartree, o efeito de troca também é levado em conta. Já última leva em consideração os efeitos quânticos tanto de troca quanto de correlação. Estas aproximações tornam o problema autoconsistente, pois inicialmente não conhecemos o potencial real e nem a densidade de portadores. A técnica utilizada para resolver a equação de Schrödinger é a do *Split-Operator* dentro da aproximação da massa efetiva, enquanto que a equação de Poisson, que fornece o potencial de Hartree, é uma equação diferencial unidimensional de segunda ordem. As energias de troca e correlação são obtidas através de parametrizações.

Para estudar o sistema utilizamos tanto a teoria do funcional da densidade dependente de spin quanto a aproximação de Hartree para obter a estrutura eletrônica do sistema, e consideramos que os autoestados de Kohm-Shan são autoestados reais do problema. Utilizamos a formulação de Landauer-Büttiker para o cálculo da condutância no regime de resposta linear,[26] que é uma formulação para partículas independentes. Consideramos que o nanofio é infinito na direção axial e possui um contato metálico em torno de todo o fio quântico.

A dissertação está divida em cinco capítulos sendo o primeiro a introdução na qual fizemos uma breve discussão sobre semicondutores, spintrônica, nanofios e as características da condutância em fios quânticos. No Capítulo 2 apresentamos a teoria necessária para obter a estrutura eletrônica de gás de elétrons unidimensional, as propriedades dos semicondutores magnéticos diluídos e o formalismo de Landauer-Büttiker usado para obter a condutância do sistema. No Capítulo 3 descrevemos o sistema investigado e o método do *split-operator* que é

utilizado para resolver a equação de Schrödinger numericamente. No Capítulo 4 apresentamos e discutimos os resultados. No último capítulo concluímos o trabalho e mostramos algumas perspectivas de novos trabalhos. Aqui vale ressaltar que este é o primeiro trabalho teórico sobre nanofios de semicondutores magnéticos diluídos do tipo caroço-casca com dopagem remota do tipo-n.

Capítulo 2

Propriedades dos Materiais Semicondutores

A maioria dos dispositivos eletrônicos e opto-eletrônicos atuais são feitos de materiais semicondutores. O grande leque de aplicações tecnológicas tornam esses materiais o centro da atenção de muitos pesquisadores em busca de um melhor controle de algumas de suas propriedades físicas ou até mesmo novas propriedades físicas destes materiais, que proporcionem um melhor desempenho nas aplicações tecnológicas. Os semicondutores intrínsecos são conhecidos por possuírem uma pequena faixa de energia, entre as banda de valência e condução, na qual não há estados eletrônicos. Essa região entre as bandas é conhecida como "*gap*" de energia. Em geral, esse *gap* de energia é da ordem de 2 eV para os semicondutores mais comuns e ele depende da temperatura.

Os grandes avanços obtidos até o momento, devem-se em boa parte ao atual estágio de desenvolvimento tecnológico das técnicas de crescimento de cristais, como MBE, aliadas com as técnicas de litografia e corrosão química, as quais tornaram possível crescer uma grande variedade de heteroestruturas semicondutoras, com um excelente controle sobre a concentração das ligas, o tamanho da camadas, a concentração de impurezas doadoras e aceitadoras na ligas, etc. Essas técnicas tornaram possível a obtenção de inúmeras ligas semicondutoras, obtidas pela combinação de vários elementos da tabela periódica, possuindo propriedades elétricas, ópticas, e magnéticas, ajustadas convenientemente pelo acréscimo de elementos à rede cristalina. Além do crescimento de ligas, as técnicas de crescimento atuais permitem uma dopagem controlada

dos materiais. Durante o crescimento de um cristal, a dopagem é realizada ao trocarmos um átomo do cristal hospedeiro por um átomo dopante (impureza). Como consequência, o tipo de portador (elétron ou buraco) dominante vai depender da valência da impureza adicionada. Esses são os semicondutores extrínsecos. Os semicondutores dopados tem condutividade que varia pouco com a temperatura e cujo valor é controlado pela concentração de impurezas no cristal.

As ligas mais conhecidas são as de elementos das colunas III-V e II-VI da tabela periódica, como: AlGaAs, CdTe, ZnSe, HgTe, GaAs entre outros. É possível também formar compostos ternários e quaternários a partir dos compostos binários. Nesse caso, um dos constituintes é substituído em fração controlada por outro de mesma valência. É importante observar que nessas ligas não há acréscimo de portadores, e as mudanças de interesse ocorrem na estrutura da banda.

Neste trabalho estamos especialmente interessados nas ligas ternárias dos grupos II-VI com o átomo substitucional sendo o manganês, resultando em ligas do tipo $\mathrm{A}^{II}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{B}^{VI}$. Em particular, investigamos nanofios composto por uma caroço de $\mathrm{Cd}_{1-x}\mathrm{Mn}_x\mathrm{Te}$ envolto por uma casca de $Cd_{1-y}Mg_yTe$ que é dopada tipo n. As principais características dos nanofios de semicondutores magnéticos diluídos a serem exploradas devem-se ao fato de que:

- na presença de um campo magnético externo, a interação de troca entre os íons magnéticos e os portadores quase-livres produz um efeito conhecido como efeito Zeeman gigante, que será discutido na Seção 2.3.

- os nanofios são heteroestruturas que confinam os portadores em duas dimensões espaciais fazendo com que haja uma competição entre o confinamento estrutural e o confinamento devido ao campo magnético quando ele é aplicado ao longo do nanofio.

Essas características juntas podem criar condições para que haja um aumento de algumas propriedades físicas ou até mesmo o surgimento de uma nova propriedade física nesse tipo de heteroestruturas. A seguir serão discutidas algumas das aproximações usuais para tratarmos

esse tipo de problema. Elas podem ser agrupadas da seguinte forma:

i) Características físicas dos materiais: teoria de bandas, massa efetiva, propriedades cristalinas e magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos.

ii) Solução da equação de Schrödinger para um gás de elétrons interagentes: aproximação do campo autoconsistente, a aproximação de Hartree, e a teoria do funcional da densidade.

iii) Transporte eletrônico: formulação de Landauer-Büttiker no regime de resposta linear.

2.1 As Aproximações na Teoria de Banda

Quando estuda-se heteroestruturas semicondutoras os efeitos quânticos são de grande importância, devido às dimensões do sistema serem comparáveis ao comprimento de onda de de Broglie. Para estudarmos a dinâmica de portadores confinados, será necessário resolver a equação de Schrödinger para um sistema de muitos corpos, e para isso algumas aproximações tradicionais neste tipo de problema serão usadas para tornar a solução do problema factível.

Antes de escrever a equação de Schrödinger para a heteroestrutura é conveniente lembrar que, de modo geral, os elétrons de um cristal se dividem em dois grupos: elétrons de valência, que contribuem para as ligações químicas, e elétrons do caroço, que estão fortemente ligados em camadas fechadas dos núcleos. Desse modo o hamiltoniano para o sistema de elétrons (de valência) e os íons que formam o cristal semicondutor pode ser separado nas seguintes contribuições: puramente eletrônica H_{el}, puramente nuclear H_n e mista H_{el-n}, ou seja o hamiltoniano pode ser dado por

$$H = H_{el} + H_n + H_{el-n}. \tag{2.1}$$

O termo eletrônico é dado por

$$H_{el} = \sum_i -\frac{\hbar^2}{2m} \quad {}_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{j=i} \frac{e^2}{\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i},$$

no qual m é a massa dos elétrons, $\mathbf{r_i}$ e $\mathbf{r_j}$ são as posições do i-ésimo e j-ésimo elétron, respectivamente. O primeiro termo do hamiltoniano eletrônico é a energia cinética e o segundo é a energia potencial de interação elétron-elétron.

O termo nuclear H_n é dado por

$$H_n = \sum_{\mu} -\frac{\hbar^2}{2M_\mu} \quad {}^2_\mu + \frac{1}{2}\sum_{\nu=\mu} V_n(\mathbf{R}_\nu - \mathbf{R}_\mu),$$

no qual M_μ é a massa dos núcleos, $\mathbf{R}_\mu$ e $\mathbf{R}_\nu$ representa as posições dos núcleos. O primeiro termo do hamiltoniano nuclear é a energia cinética dos núcleos e o segundo é a energia potencial de interação núcleo-núcleo. Para o termo misto temos

$$H_{el-n} = \sum_{i,\mu} V_n(\mathbf{R}_\mu - \mathbf{r_i}),$$

que representa o termo de interação elétron-núcleo.

Resolver a equação de Schrödinger com o hamiltoniano dado pela equação (2.1) é extremamente complicado, pois envolve um número macroscópico de partículas interagentes, e para tratá-la deve-se fazer algumas simplificações.

2.1.1 Aproximação de Born-Oppenheimer

A separação dos movimentos nuclear e eletrônico é quase sempre o primeiro passo para qualquer aplicação da mecânica quântica em cristais. Fisicamente essa separação considera a desigualdade entre as massas dos elétrons e dos núcleos (elétrons são 10^3 a 10^4 vezes mais leves que os núcleos), portanto pode-se considerar que os núcleos movem-se bem mais lentamente que os elétrons. Dessa maneira os núcleos movem-se no meio de uma distribuição de carga eletrônica cujas flutuações são rápidas demais para afetá-los.

A *aproximação de Born-Oppenheimer* consiste em separar os movimentos eletrônicos e nucleares, admitindo que o sistema eletrônico responde instantaneamente a uma mudança nas coordenadas dos núcleos. Isto é equivalente a escrever a função de onda total como

$$\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \eta(\mathbf{R})\Psi(\mathbf{r}), \tag{2.2}$$

em que $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_n$ e $\mathbf{R} = \mathbf{R}_1 \dots \mathbf{R}_n$ representam as coordenadas dos elétrons e núcleos, respectivamente. Observa-se que a função de onda eletrônica Ψ depende parametricamente de $\mathbf{R}$, pois considera-se conhecida uma determinada configuração espacial dos núcleos.[27]

Assim, o problema eletrônico torna-se o de uma rede estática para uma dada configuração de núcleos, cujas autofunções e autoenergias são obtidas resolvendo a equação de Schrödinger na forma

$$[H_{el} + H_{el-n}]\,\Psi(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{R}}\Psi(\mathbf{r}). \tag{2.3}$$

Da mesma maneira pode-se escrever a equação de Schrödinger para o movimento nuclear, contudo as propriedades que desejamos estudar não dependerão desse movimento.

2.2 Teoria do Campo Autoconsistente

O problema investigado trata-se de um gás unidimensional confinando numa região da ordem 100 Å, este confinamento faz como que os elétrons sejam altamente interagentes. Portanto, a aproximação de única partícula não pode ser usada, e outras aproximações são necessárias, pois a solução exata da equação de Schrödinger (a Eq. (2.3)) para muitos elétrons é insolúvel tanto analiticamente quanto computacionalmente. Para contornar esta dificuldade existem alguns métodos bem estabelecidos, como o método de Hartree, Hartree-Fock, e teoria do funcional da densidade (DFT - *Density Functional Theory*).[28,29] Neste trabalho faremos uso da aproximação de Hartree e da DFT.

2.2.1 Aproximação de Hartree

Uma aproximação bastante utilizada para resolver a Eq. (2.3) é devido a Hartree. Ele propôs que cada elétron pode ser tratado individualmente, como se ele movesse num campo médio que é a soma dos campos dos núcleos mais a média do campo eletrostático devido a todos os outros elétrons. Isto corresponde a escrevermos uma equação de Schrödinger de um único elétron movendo-se num potencial efetivo $U(\mathbf{r})$,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \quad ^2\psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \tag{2.4}$$

aqui $U(\mathbf{r})$ incorpora os potenciais devido aos núcleos ($V_{\text{íons}}(\mathbf{r})$) e a todos os outros elétrons ($v_H(\mathbf{r})$), ou seja,

$$U(\mathbf{r}) = V_{\text{íons}}(\mathbf{r}) + v_H(\mathbf{r}). \tag{2.5}$$

$v_H(\mathbf{r})$ é o conhecido como potencial de Hartree, *i.e.* o potencial eletrostático devido a densidade total $n(\mathbf{r})$

$$v_H(\mathbf{r}) = -\frac{e}{8\pi\epsilon}\int d\mathbf{r}\ \frac{n(\mathbf{r}\,)}{\mathbf{r}-\mathbf{r}}, \tag{2.6}$$

na qual ϵ a constante dielétrica do material. Na representação de elétron independente, a contribuição de um elétron no nível $\psi_i(\mathbf{r})$ para a densidade de carga é

$$n_i(\mathbf{r}) = -e\ \psi_i(\mathbf{r})\ ^2. \tag{2.7}$$

Assim a densidade eletrônica total é

$$n(\mathbf{r}) = -e\sum_i\ \psi_i(\mathbf{r})\ ^2, \tag{2.8}$$

na qual a soma é feita sobre todos os estados ocupados de um elétron. Substituindo a Eq. (2.5) na Eq. (2.4), obtemos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\quad ^2 + V_{\text{íons}}(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) + v_H(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{2.9}$$

A Eq. (2.9) é uma equação para de um único elétron movendo-se sob a ação do potencial dos íons, $V_{\text{íons}}$, e o potencial devido a todos outros elétrons $v_H(\mathbf{r})$. Usa-se a aproximação da massa efetiva para obter a estrutura eletrônica da heteroestrutura. Essa aproximação é muito utilizada para descrever o movimento eletrônico perto do extremo da banda na presença de perturbações fracas tais como campos magnético e elétrico externos aplicados no sistema. Dentro dessa aproximação, podemos escrever

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\quad ^2 + V_{\text{íons}}(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) \qquad -\frac{\hbar^2}{2m^*}\quad ^2\psi(\mathbf{r}), \tag{2.10}$$

na qual m^* é a massa efetiva do elétron[1]. Substituindo a Eq. (2.10) na Eq. (2.9) temos

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\quad ^2 + v_H(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \tag{2.11}$$

[1]De agora em diante, usaremos m, ao invés de m^*, para nos referir a massa efetiva do elétron.

As Eqs. (2.6), (2.8) e (2.11), são conhecidas como as equações autoconsistentes de Hartree. A aproximação de Hartree ou equação do campo autoconsistente leva em conta somente os efeitos clássicos da interação elétron-elétron, ou seja, ela descreve a interação do elétron somente com o campo obtido pela média sobre as posições dos elétrons remanescentes. Esse conjunto de equação deve ser resolvido auto-consistentemente.

Efeitos importantes de muitos corpos não são levados em conta na aproximação de Hartree. Para uma melhor descrição do sistema físico os efeitos de troca e correlação eletrônica devem ser incluídos no cálculo, pois a maioria dos sistemas estudados hoje em dia estão na escala nanométrica na qual esses efeitos são de grande importância. Portanto, uma teoria que inclua esses efeitos é necessária. Uma das teorias que levam em conta a troca e correlação eletrônica é a teoria do funcional da densidade. Na próxima seção discutiremos detalhadamente a formulação dela.

2.2.2 Teoria do Funcional da Densidade

Os efeitos de muitos corpos são importantes para explicar as propriedades física de sistemas altamente interagentes, como o investigado nesta dissertação. A solução da equação de Schrödinger para esses sistemas é praticamente impossível e alguma aproximação ou método deve ser usado na obtenção da estrutura eletrônica. Para obter as propriedades eletrônicas do sistema de muitos corpos um dos métodos mais utilizados é a DFT.[28,29] Ela nos permite mapear o problema de muitos corpos num problema efetivo de um corpo que reproduz a densidade e a energia total do sistema de muitos corpos.

A DFT está fundamentada nos dois teoremas de Hohenberg-Kohn.[28] A implementação dos teoremas pode ser feita de diversas maneiras, a mais utilizada é a aproximação de Kohn-Sham.[29] Os teoremas de Hohenberg-Kohn são

i) A densidade do estado fundamental $n(\mathbf{r})$ de um sistema interagente em algum potencial externo $v(r)$ define de modo único esse potencial. Da mesma maneira, o potencial externo define o halmitoniano, que por sua vez define a função de onda do estado fundamental

$\Psi(\mathbf{r})$,

$$n_{el}(\mathbf{r}) \qquad V(\mathbf{r}) \qquad H(\mathbf{r}) \qquad \Psi(\mathbf{r}), \tag{2.12}$$

sendo $H = T + U + V$ o operador hamiltoniano, e no qual T, U e V são os operadores energias cinética, interação de Coulomb e o potencial externo, respectivamente. Esses operadores são dados por

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i}^{N} \quad {}_{i}^{2}; \tag{2.13}$$

$$U = \frac{e^2}{8\pi\epsilon}\sum_{i,j}^{N}\frac{1}{\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j}; \tag{2.14}$$

$$V = \sum_{i}^{N} v(\mathbf{r}_i). \tag{2.15}$$

sendo ϵ a constante dielétrica do material. Portanto, esse teorema garante que toda a informação do sistema de muitos corpos está contida na densidade do estado fundamental. Como consequência desse teorema o valor esperado de qualquer observável é um funcional da densidade $n(\mathbf{r})$,

$$O[n] = \ \Psi[n]\ O\ \Psi[n]\ . \tag{2.16}$$

ii) A densidade do estado fundamental é aquela que minimiza o funcional energia total $E[n]$.

O funcional $E[n]$ e tem a seguinte forma

$$E[n] = T[n] + V[n] + U[n], \tag{2.17}$$

a energia cinética $T[n]$ pode ser separada em duas contribuições, T_S e T_C, que são as energias cinéticas da parte não interagente e de correlação, respectivamente. A energia coulombiana também é separada em dois termos, U_H e U_{XC} sendo o primeiro devido a parte de Hartree e o segundo é a parte de troca e correlação da energia de Coulomb. Reescrevendo a energia total

$$E[n] = T_S[n] + V[n] + U_H[n] + E_{XC}[n], \tag{2.18}$$

sendo $E_{XC}[n] = T_C[n] + U_{XC}[n]$ a energia de troca e correlação.

A energia de troca e correlação não é conhecida a priori e necessitamos de alguma aproximação. Uma aproximação bastante utilizada é a aproximação da densidade local, ela consiste em consideramos a energia de troca e correlação de cada elemento de volume com densidade $n(\mathbf{r})$ pelo valor conhecido dessa energia para um gás de elétrons homogêneo com a mesma densidade, ou seja,

$$E_{xc}[n] = \int n(\mathbf{r})\varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r});\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{2.19}$$

no qual $\varepsilon_{xc}(n(\mathbf{r});\mathbf{r})$ a energia de troca e correlação por partícula do gás de elétrons homogêneo.

Um esquema de minimização $E[n]$ com relação a densidade foi proposto por Kohn e Sham.[29] Efetuando a minimização obtemos o potencial efetivo

$$V_{KS}(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r}) + v_h(\mathbf{r}) + v_{xc}(\mathbf{r}), \tag{2.20}$$

no qual

$$v_h(\mathbf{r}) = \frac{e}{8\pi\epsilon}\int \frac{n(\mathbf{r}\,)}{\mathbf{r}-\mathbf{r}}d\mathbf{r}\,, \tag{2.21}$$

é o potencial de Hartree.

$$v_{xc}(\mathbf{r}) = \frac{\partial(n\varepsilon_{xc}(n))}{\partial n}, \tag{2.22}$$

o potencial de troca e correlação na aproximação local da densidade.

O processo de minimização de $E[n]$ nos permite descrever o problema de muitos corpos em termos de um problema de um corpo sujeito ao potencial V_{KS}. A equação de Schrödinger para V_{KS} é

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\quad^2 + V_{KS}(\mathbf{r})\right]\varphi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i\varphi_i(\mathbf{r}). \tag{2.23}$$

sendo $\varphi_i(\mathbf{r})$ e ε_i os autoestados e autovalores de Kohn-Sham, respectivamente. Dessa forma, a densidade eletrônica do sistema de muitos corpos é igual à densidade eletrônica do problema de um corpo n_s sujeito ao potencial efetivo. Logo,

$$n(\mathbf{r}) = n_S(\mathbf{r}) = -e\sum_i \varphi_i(\mathbf{r})\,^2. \tag{2.24}$$

As equações (2.20), (2.23) e (2.24) são conhecidas como equações autoconsistentes de Kohn-Sham. No Capitulo 3 apresentamos como resolvemos esse conjunto de equações.

2.3 Semicondutores Magnéticos Diluídos

Os semicondutores magnéticos diluídos se diferenciam dos outros semicondutores devido à incorporação de íons que possuem a camada $3d$ semipreenchida, como o Mn^{+2}. Essa camada semipreenchida interage com os elétrons quase-livres do sistema, dando origem a interação de troca *s-d*. Nas próximas duas seções será discutido como o íon Mn^{+2} é incorporado pela rede cristalina e também como surgem as propriedades magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos.

2.3.1 Estrutura Cristalina

Do ponto de vista da estrutura cristalina, os semicondutores magnéticos diluídos são ligas semicondutoras em que parte de seus sítios são ocupados por íons magnéticos de um elemento de transição.[13] Os mais estudados são aqueles da forma $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$, onde uma fração dos átomos do grupo II é substituída, aleatoriamente, por átomos de manganês. Sua natureza ternária possibilita o controle do parâmetro de rede e dos parâmetros de banda (energia de gap, massas efetivas, etc.) pela variação da composição de manganês. Por causa dessa controlabilidade, as ligas $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ são excelentes para preparação de poços quânticos, super-redes e outras heteroestruturas semicondutoras.

As ligas ternárias da forma $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ se cristalizam na estrutura blenda de zinco (como ilustrado na Fig. 2.1) ou na estrutura *wurtzita*, dependendo dos elementos que compõem a liga e da fração molar de Mn. O manganês é um metal de transição com dois elétrons de valência no orbital $4s$. Ele difere dos elementos do grupo II pelo fato de sua camada $3d$ ser semi-preenchida. Dessa forma, ele pode contribuir com seus elétrons $4s^2$ para a hibridização sp^3, podendo substituir os elementos do grupo II nas estruturas tetraédricas $A^{II}B^{VI}$.

As estruturas de banda das ligas $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ são qualitativamente iguais aquelas dos compostos $A^{II}B^{VI}$ que possuem a mesma estrutura cristalina. Em particular, elas possuem *gaps* diretos com os extremos das bandas ocorrendo no ponto Γ (ponto de maior simetria das bandas). Quantitativamente, a estrutura de $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$ se transforma de uma maneira suave do

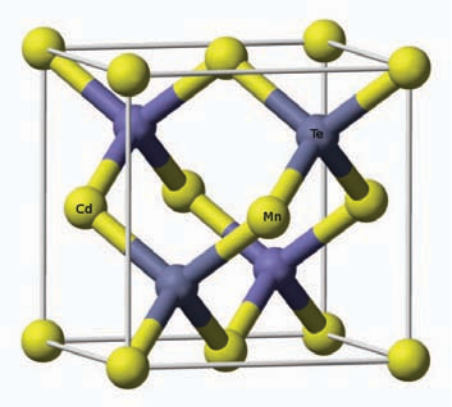


Figura 2.1: *Representação da estrutura blenda de zinco para o $Cd_{(1-x)}Mn_xTe$. Esta representação é a mesma para os materiais do tipo $A^{II}_{(1-x)}Mn_xB^{VI}$.*

composto $A^{II}B^{VI}$ para o composto tetraédrico MnB^{VI}. Essa evolução não é estritamente linear. No entanto, a variação linear é uma excelente aproximação para uma descrição quantitativa da dependência dos parâmetros da maioria dos compostos com a concentração de manganês.

Dessa forma, na ausência de campo magnético externo, a principal diferença entre os sistemas ternários II-VI, sem a presença de íons magnéticos, como por exemplo, o $Cd_{1-y}Zn_yTe$, e os compostos $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$, é que esses possuem a camada $3d$ com a metade de sua acomodação de elétrons. Como consequência, podem ocorrer transições eletrônicas dentro da camada $3d$, envolvendo a troca de spins dos elétrons.

2.3.2 Propriedades Magnéticas

As peculiaridades dos semicondutores magnéticos diluídos têm sua origem na camada incompleta $3d$ dos íons manganês. Os elétrons nessa camada produzem momentos magnéticos localizados que são responsáveis pelas propriedades magnéticas desses compostos.

A principal característica dos semicondutores magnéticos diluídos é que, na presença de um campo magnético externo, suas propriedades eletrônicas são fortemente influenciadas pela interação de troca entre os momentos localizados dos íons de Mn e os elétrons de condução. Isto ocorre porque o campo magnético orienta os momentos localizados, criando uma componente diferente de zero para as componentes de spins do manganês ao longo da direção do campo. Nos

semicondutores magnéticos diluídos pode-se distinguir dois conjuntos de estados eletrônicos:

1. Estados localizados em torno dos íons de Mn^{+2} com origem nos orbitais semi-preenchidos $3d^5$, produzindo momentos magnéticos localizados. A partir das regras de Hund obtemos que o estado fundamental possui momento magnético $L = 0$ e spin total $S = 5/2$.

2. Estados estendidos, produzindo as bandas de energia, que se originam das camadas mais externas dos átomos que compõem o cristal.

Nas ligas binárias tipo $A^{II}B^{VI}$, os átomos do tipo A^{II}, podem ser substituídos por átomos de manganês e os estados eletrônicos nesses compostos podem também ser obtidos dentro da aproximação de cristal virtual[2].

Na presença de um campo magnético, os estados eletrônicos em semicondutores magnéticos diluídos são obtidos adicionando-se a interação de troca *sp-d*. Essa interação entre os elétrons $3d$ e os portadores das bandas é descrita pelo hamiltoniano de Heisenberg

$$H_{sd} = \sum_{\mathbf{R}_i} J\left(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i\right) \mathbf{S}_i \cdot \boldsymbol{\sigma},$$

sendo $\mathbf{S}_i$ o operador de spin do íon magnético localizado no sítio $\mathbf{R}_i$ ($S_i = 5/2$), $\boldsymbol{\sigma}$ é o operador de spin dos portadores e $J\left(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i\right)$ é a integral de troca. Como os portadores possuem funções de onda espacialmente estendidas, eles interagem simultaneamente com um grande número de íons de Mn. Isto nos permite usar a aproximação de campo médio, isto é, os operadores de spin dos íons de manganês são trocados por sua média térmica $\langle \mathbf{S} \rangle$. Na ausência de um campo magnético externo, $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$. Quando um campo magnético $\mathbf{B}$ é aplicado ao semicondutor, a média térmica de $\mathbf{S}$ terá uma componente diferente de zero na direção do campo, que denotamos como $\langle \mathbf{S}_B \rangle$. Além disso, na aproximação de cristal virtual, a soma sobre os íons magnéticos é trocada pela soma sobre os sítios da sub-rede dos cátions multiplicada pela fração molar dos íons de manganês, logo,

$$H_{ex} = -x \langle \mathbf{S}_B \rangle \cdot \boldsymbol{\sigma} \sum_{\mathbf{R}} J\left(\mathbf{r} - \mathbf{R}\right),$$

[2]Nesta aproximação, o potencial aleatório dos diversos elementos é substituído por um potencial médio periódico, no qual a contribuição de cada elemento é pesada pela sua concentração na liga. Nesta aproximação a simetria de translação é recuperada.

onde a soma em **R** é sobre os sítios da sub-rede dos cátions.

Ainda não existe uma compreensão geral das propriedades magnéticas dos semicondutores magnéticos diluídos. Sua descrição analítica é limitada a alguns casos limites, como por exemplo, para baixas concentrações de Mn (até 10%).[13] Nesse limite, onde os momentos magnéticos dos íons de manganês não interagem, a média térmica dos operadores de spin é dada por

$$\mathbf{S}_B = -S\mathcal{B}_S\left(\frac{Sg_{Mn}\mu_B B}{K_B T}\right), \tag{2.25}$$

sendo $g_{Mn} = 2$ o fator giromagnético do manganês, μ_B o magneton de Bohr, K_B é a constante de Boltzman e B_S a função de Brillouin para um spin total $S = 5/2$,

$$\mathcal{B}_S(y) = \frac{2S+1}{2S}\,\mathrm{cotgh}\left(\frac{2S+1}{2S}y\right) - \frac{1}{2S}\,\mathrm{cotgh}\left(\frac{1}{2S}y\right). \tag{2.26}$$

A equação acima descreve bem o comportamento dos sistema baseados no Mn para baixas concentrações, neste regime, os íons de Mn^{+2} estão praticamente isolados e não interagem entre si. Já a altas concentrações e baixas temperaturas a interação entre íons de Mn^{+2} é antiferromagnética,[13] E a eq. (2.26) não descreve o comportamento destes sistemas. Para contornar este problema uma descrição fenomenológica foi proposta por Gaj, Planel e Fishman.[30] Ela consiste em considerar uma função de Brillouin efetiva, que ao invés de usar a temperatura e o spin $S = 5/2$ usa-se uma temperatura efetiva $T_{ef} = T + T_0(x)$ e um spin efetivo $S_0(x) \leq 5/2$. Tanto $T_{ef}(x)$ quanto $S_0(x)$ dependem da concentração x de Mn , e ambos são obtidos através de ajustes (*fits*) de resultados experimentais. A função de Brillouin efetiva é:

$$\mathbf{S}_B = -S_0(x)\mathcal{B}_S\left(\frac{Sg_{Mn}\mu_B B}{K_B T_{ef}}\right). \tag{2.27}$$

O conceito de spin efetivo pode ser entendido da seguinte forma: todos os íons de Mn^{+2} que estão alinhados contribuem com um spin efetivo para a magnetização total. Isto é equivalente a dizer que existe apenas uma fração dos íons que estão alinhados que contribuem com $S = 5/2$ para a magnetização total. Portanto, isso pode ser entendido como uma concentração efetiva, i.e,

$$xS_0(x) = x_{ef}S. \tag{2.28}$$

A expressão que usamos para $x_{ef}(x)$ e T_{ef} são

$$x_{ef}(x) = 0{,}265\exp(-43{,}34x) + 0{,}729\exp(-6{,}19x) + 0{,}00721, \tag{2.29}$$

$$T_{ef} = \frac{35{,}37\text{K}}{1 + 2{,}752x}x. \tag{2.30}$$

Uma melhor descrição do comportamento de sistema baseados no Mn e para expressões de $x_{ef}(x)$ e T_{ef} podem ser encontradas nas seguintes referências.[31–33] As expressões para $x_{ef}(x)$ e T_{ef} são válidas para todos os semicondutores magnéticos diluídos do grupo II-VI.

Para este trabalho o material magnético escolhido foi o $Cd_{1-x}Mn_xTe$, mas poderia ser qualquer um do tipo $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$, os parâmetros para o CdMnTe estão descrito no Apêndice D.

2.4 Condutância no Formalismo de Landauer-Büttiker

Uma vez que a estrutura eletrônica é obtida, diversas propriedades físicas do sistema podem ser extraídas, tais como as de transporte e/ou ópticas. Neste seção, apresentamos a teoria de Landauer-Büttiker[26,34] para a corrente que flui através de um condutor unidimensional. A Fig. 2.2 ilustra o nanofio (condutor) conectado a dois contatos que possuem potenciais químicos μ_1 e μ_2. Entre os contatos é aplicada uma voltagem V_{SD}, voltagem de fonte-dreno (SD - *source-drain*). Ao fio quântico é aplicada uma voltagem de *gate* (V_G), que permite um maior controle sobre o sistema. A corrente total I que flui através do fio quântico é

$$I = I_{12} + I_{21} \tag{2.31}$$

sendo que I_{21} (I_{12}) é a corrente que flui da direita (esquerda) para a esquerda (direita). A corrente é obtida calculando a corrente transmitida em um único nível de energia e depois somando sobre todos. Para um gás contendo n elétrons por unidade de comprimento, movendo-se a velocidade v a corrente é escrita como

$$i = env. \tag{2.32}$$

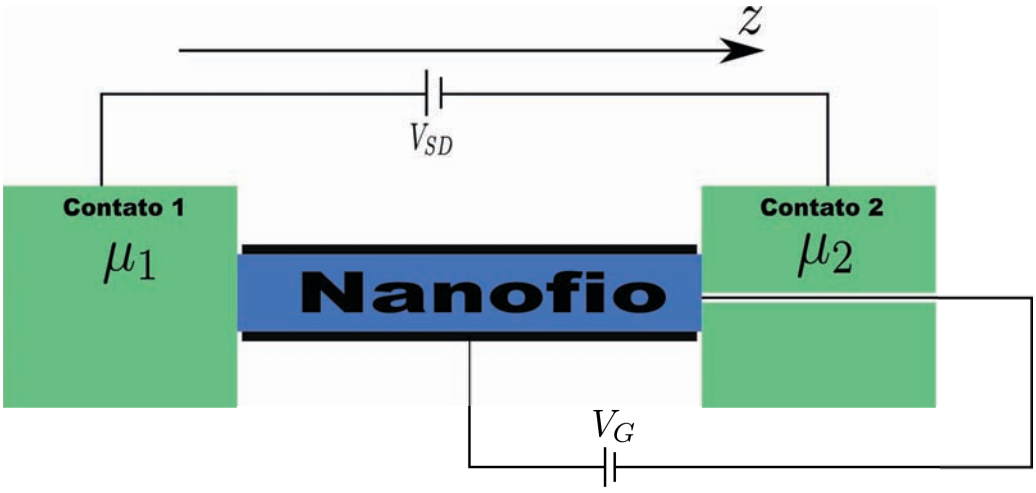


Figura 2.2: *Nanofio conectado a dois contatos, com voltagem de fonte-dreno V_{SD}. No condutor existem apenas alguns níveis eletrônicos disponíveis, enquanto que nos contatos existem infinitos níveis ocupados. O número de canais disponíveis para condução é controlado pela voltagem de* gate.

Considerando $n = 1/L_z$, sendo L_z o tamanho do nanofio na direção z, a corrente que flui da esquerda para direita pode ser escrita como

$$I_{12} = \frac{e}{L_z} \sum_i \sum_{k_z=0} v_{i,k_z} T_{k_z,i} f^1_{i,k_z}, \tag{2.33}$$

similarmente, a corrente que flui da direita para esquerda é

$$I_{21} = \frac{e}{L_z} \sum_i \sum_{k_z=-}^{0} v_{i,k_z} T_{k_z,i} f^2_{i,k_z}, \tag{2.34}$$

sendo $T_{k_z,i}$ o coeficiente de transmissão entre os contatos 1 e 2, f^1_{i,k_z} e f^2_{i,k_z} são respectivamente as funções de Fermi-Dirac do contato 1 e 2, aqui i representa os números quânticos n, l e σ_z, enquanto k_z é o vetor de onda na direção z. As diferenças nos dois somatórios sobre k_z, vem do fato que os elétrons que são transmitidos do contato 1 para o contato 2 na direção positiva do eixo z são transportados por valores positivos de k_z, enquanto que aqueles que saem do contato 2 para o contato 1 viajam em sentido oposto ao eixo, portanto, com valores negativos de k_z. Substituindo as eqs. (2.33) e (2.34) na eq. (2.31) obtém-se

$$I = \frac{e}{L_z} \sum_i \left(\sum_{k_z=0} v_{i,k_z} T_{k_z,i} f^1_{i,k_z} + \sum_{k_z=-}^{0} v_{i,k_z} T_{k_z,i} f^2_{i,k_z} \right). \tag{2.35}$$

Sabe-se que a velocidade dos portadores em cada nível eletrônico é dada por

$$v_{i,k_z} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{i,k_z}}{\partial k_z}, \tag{2.36}$$

e que para o nanofio investigado aqui, a energia dos níveis eletrônicos é

$$E_{i,k_z} = E_i + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \tag{2.37}$$

Logo,

$$I = \frac{e\hbar}{mL_z} \sum_i \sum_{k_z=-} k_z T_{k_z,i} \left(f^1_{i,k_z} - f^2_{i,k_z} \right). \tag{2.38}$$

Neste trabalho, consideramos o nanofio infinito na direção z, com isso os valores de k_z são contínuos e o somatório nessa variável pode ser transformado numa integral da seguinte forma

$$\sum_{k_z=-} \quad - \quad \frac{L_z}{2\pi} \int_- \quad dk_z, \tag{2.39}$$

e através da eq. (2.37) é possível mudar k_z para a variável de energia, temos que

$$I = \frac{e}{h} \sum_i \int_- \quad T_i(E) \left(f_i^1(E) - f_i^2(E) \right) dE. \tag{2.40}$$

Conhecendo $T_i(E)$ a corrente é obtida por integração direta da eq. (2.40), o coeficiente de transmissão só é conhecido analiticamente para casos bem simples. Para simplificar, vamos considerar o que o sistema está no regime de respota linear, ou seja, $I \quad V_{SD}$ e que $eV_{SD} = \mu_1 - \mu_2$.

2.4.1 Corrente no Regime de Resposta Linear

Se ambos contatos tem o mesmo potencial químico $\mu_1 = \mu_2$ a corrente é zero. Para pequenos desvios do equilíbrio, a corrente é proporcional à voltagem aplicada V_{SD}. A Eq. (2.40) pode ser escrita como

$$I = \delta I = \frac{e}{h} \sum_i \int_- \quad \left[T_i^{eq}(E) \delta \left(f_i^1(E) - f_i^2(E) \right) + \left(f_i^1(E) - f_i^2(E) \right)_{eq} \delta T_i(E) \right] dE, \tag{2.41}$$

o segundo termo é nulo, pois $f_i^1 = f_i^2$ no equilíbrio. Temos que

$$\begin{aligned} \delta \left(f_i^1 - f_i^2 \right) &= f_i^1(E_{eq}) + \mu_1 \frac{\partial f_i^1}{\partial \mu}\Big|_{eq} - f_i^2(E_{eq}) + \mu_2 \frac{\partial f_i^2}{\partial \mu}\Big|_{eq} \\ &= (\mu_1 - \mu_2) \frac{\partial f_i}{\partial \mu}\Big|_{eq}, \end{aligned} \tag{2.42}$$

sendo que

$$\frac{\partial f_i^1}{\partial \mu}\Big|_{eq} = \frac{\partial f_i^2}{\partial \mu}\Big|_{eq} = \frac{\partial f_i}{\partial \mu}\Big|_{eq} = -\frac{\partial f_0}{\partial E}, \tag{2.43}$$

onde f_0 é a função de Fermi-Dirac no equilíbrio

$$f_0(E_i) = \frac{1}{1 + e^{(E-\mu)/K_B T}}. \tag{2.44}$$

Substituindo (2.42) na (2.41) obtém-se a corrente, no regime de resposta linear, que é

$$I = \frac{e}{h}(\mu_1 - \mu_2) \sum_i \int_- \quad T_i(E) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial E} \right) dE. \tag{2.45}$$

Como

$$\mu_1 - \mu_2 = eV_{SD}, \tag{2.46}$$

que substituída na Eq. (2.45), resulta

$$I = \frac{e^2}{h} V_{SD} \sum_i \int_- \quad T_i(E) \left(-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE. \tag{2.47}$$

A corrente obtida no regime de resposta linear será analisada em duas situações distintas:

1. *Temperatura igual a zero Kelvin:* Neste caso a função de Fermi-Dirac é igual a uma função degrau, $f_0(E) = \Theta(E_f - E)$ e $\frac{\partial f_0}{\partial E} = \delta(E - E_f)$, em que E_f é a energia de Fermi, assim a corrente toma a seguinte forma

   $$I = \frac{e^2}{h} V_{SD} \sum_i T_i(E_f), \tag{2.48}$$

   da qual segue que a condutância é dada por

   $$G = \frac{\partial I}{\partial V_{SD}} = \frac{e^2}{h} \sum_i T_i(E_f). \tag{2.49}$$

2. *Condutor Balístico:* Consideramos que o nanofio se comporta como um condutor balístico, ou seja, que não há espalhamento incoerente ou processos de relaxação. Dessa forma, o coeficiente de transmissão é $T_i(E) = \Theta(E - E_i)$. Portanto, a Eq. (2.47) para a corrente torna-se

   $$I = \frac{e^2}{h} V_{SD} \sum_i \int_-^{E_i} \left(-\frac{\partial f_0(E)}{\partial E} \right) dE = \frac{e^2}{h} V_{SD} \sum_i f(E_i), \tag{2.50}$$

e neste caso, a condutância toma a seguinte forma

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_i f_0(E_i). \tag{2.51}$$

Se substituirmos $T_i(E) = \Theta(E - E_i)$ na eq. (2.49) ou a função de Fermi-Dirac para $T = 0$ K $f_0(E) = \Theta(E_f - E)$ na eq. (2.51), a condutância terá a mesma expressão para os dois casos, ou seja, a condutância para $T = 0$ de um condutor balístico é

$$G = \frac{e^2}{h} \sum_i \Theta(E - E_i). \tag{2.52}$$

Além da condutância, estamos interessados na transcondutância, que é definida como sendo a derivada da condutância com relação ao potencial de *gate* (V_G). Para um condutor balístico a temperatura de zero Kelvin, a transcondutância é:

$$\frac{dG}{dV_G} = \frac{e^2}{h} \sum_i \frac{d\Theta(E - E_i)}{dV_G} = -\frac{e^2}{h} \sum_i \delta(E - E_i) \frac{dE_i}{dV_G} \tag{2.53}$$

Capítulo 3

Descrição Teórica do Problema

Neste capítulo descrevemos o sistema físico investigado, e em sequência apresentamos a equações de Kohn-Sham que resolvemos juntamente com o procedimento autoconsistente utilizado para obter a estrutura eletrônica do nanofio. Apresentamos os potenciais de Hartree e troca e correlação, que nos fornecem os efeitos de muitos corpos. Na última seção mostramos o método do *Split-Operator* que é usado para resolver a equação de Schrödinger numericamente.

3.1 Descrição do Sistema Físico e Cálculo Autoconsistente

O sistema investigado é um nanofio cilíndrico do tipo casca-caroço de raio R envolto por uma camada metálica, cujo caroço é constituído por um material magnético (CdMnTe) e a casca por um material não-magnético (CdMgTe), como ilustrado na Fig. 3.1. A casca é composta basicamente por três camadas de material não-magnético, a primeira é uma camada muito fina chamada de *spacer*, tipicamente da ordem de 50 Å a 100 Å , a qual é constituída por um material não-dopado, já a segunda também é uma camada fina, da ordem de 50 Å dopada tipo-n, e a terceira e última camada é constituída por um material não-dopado. A camada dopada tipo-n irá fornecer portadores para o poço, que é a região magnética. A camada metálica que envolve o nanofio tem por finalidade a aplicação de um potencial de *gate* V_G, o que fornece um controle tanto sobre os estados no interior do poço quanto sobre suas populações. Aplicando um campo magnético na direção axial, separamos as subbandas dos elétrons com spin *up* das

com spin *down*. Dependendo da magnitude do campo magnético surge uma competição entre confinamento estrutural e o confinamento gerado pelo campo, ou seja, é possível aumentar ou diminuir o confinamento aplicando um campo magnético.

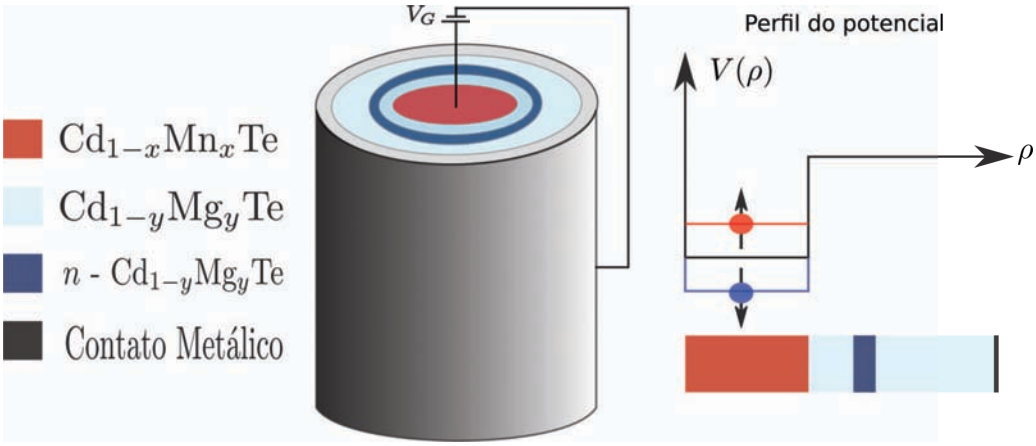


Figura 3.1: *Representação esquemática do nanofio. O fato de poço quântico ser magnético nos permite, com ação de campo magnético, mudar a profundidade dele, os elétrons com spin down sente um potencial de confinamento maior que aqueles com spin up. O potencial de* gate *nos dá um controle sobre o número de portadores confinados.*

Para obtermos a estrutura eletrônica do sistema, temos que resolver a equação de Schrödinger. Como o sistema possui uma enorme quantidade de elétrons confinados numa pequena região, os efeitos da interação de Coulomb são importantes e devem ser levados em conta. Portanto, devemos resolver a equação de Schrödinger de muitos corpos, e para isso usaremos as aproximações discutidas no capítulo anterior, ou seja, obteremos a estrutura eletrônica do nanofio resolvendo as equações autoconsistentes de Kohn-Shan. Nesse caso, a equação de Schrödinger independente do tempo (3.1), para um elétron confinado no nanofio cilíndrico, sob a influência de um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo z do cilindro, a qual toma a seguinte forma:

$$H\Psi(z,\rho,\phi,\sigma_z) = E\Psi(z,\rho,\phi,\sigma_z). \tag{3.1}$$

O operador de Hamilton H na representação das coordenadas é expresso como

$$H = \frac{1}{2m}\left(p + e\mathbf{A}\right)^2 + V_{Het}(\rho) + v_h(\rho) + v_{xc}(\rho) + g\mu_B B\sigma_z - N_{0\alpha}x_{ef}\ S_B\ \sigma_z, \tag{3.2}$$

no qual p é o momento canônico, $\mathbf{A}$ é o potencial vetor, $V_{Het}(\rho)$ é o potencial de confinamento

estrutural do sistema que só depende de ρ, $v_H(\rho)$ é o potencial de Hartree, v_{xc} o potencial de troca e correlação, $\sigma_z = \pm 1/2$ é o spin do elétron, μ_B é o magneton de Bohr, $g = 2$ é o fator giromagnético do elétron e $g\mu_B B\sigma_z$ é o termo Zeeman eletrônico, e o último termo é devido a interação de troca *s-d*, descrito na Seção 2.3.2.

Como temos um campo magnético uniforme aplicado ao longo do eixo z, $\mathbf{B} = B\hat{\mathbf{k}}$, devido a simetria cilíndrica do sistema escolhemos o potencial vetor no gauge simétrico da seguinte forma

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \boldsymbol{\rho} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\boldsymbol{\rho}} = \frac{1}{2}B\rho\hat{\boldsymbol{\phi}}. \tag{3.3}$$

A equação de Schrödinger para o halmiltoniano (3.2)(ver apêndice A para maiores detalhes), é a seguinte

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{d}{d\rho}\left(\rho\frac{d}{d\rho}\right)\right] R_{n,l,\sigma_z}(\rho) + V_{KS}(\rho)R_{n,l,\sigma_z}(\rho) = E_{n,l,\sigma_z}R_{n,l,\sigma_z}(\rho), \tag{3.4}$$

na qual o potencial efetivo $V_{KS}(\rho)$ é:

$$V_{KS}(\rho) = V_{Het}(\rho) + v_h(\rho) + v_{xc}(\rho) + \frac{\hbar^2 l^2}{2m\rho^2} - \frac{\hbar w_c}{2}l - N_{0\alpha}x_{ef}\ S_B\ \sigma_z + g\mu_B B\sigma_z + \frac{mw_c^2}{8}\rho^2. \tag{3.5}$$

Com energia dada por

$$\varepsilon = E_{n,l,\sigma_z} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m},$$

sendo E_{n,l,σ_z} a energia da n-subbanda e k_z o vetor de onda na direção z. A densidade eletrônica é

$$n_{el.}(\rho) = \sum_{n,l,\sigma_z} N_{n,l,\sigma_z}\ R_{n,l,\sigma_z}(\rho)\ ^2. \tag{3.6}$$

em que N_{n,l,σ_z} é o número total de elétrons[1] na n-ésima sub-banda,

$$N_{n,l,\sigma_z} = \begin{cases} \dfrac{L_z}{\pi a_0^*}\cdot\sqrt{\dfrac{K_B T 2m a_0^{*2}}{\hbar^2}}F_{-1/2}(\eta_{n,l,\sigma_z}) & \text{se } T = 0; \\ \\ \dfrac{2L_z}{\pi a_0^*}\cdot\sqrt{\dfrac{2m a_0^{*2}}{\hbar^2}}\cdot\sqrt{\varepsilon_F - E_{n,l,\sigma_z}} & \text{se } T = 0, \end{cases} \tag{3.7}$$

[1]Para detalhes sobre o cálculo do número do portadores veja os Apêndices B e C

sendo, a_0^* o raio de Bohr efetivo, L_z o tamanho do fio na direção z, T a temperatura e ε_F é a energia de Fermi. $F_{-1/2}(\eta_{n,l,\sigma_z})$, é a função integral de Fermi-Dirac, a qual é definida como

$$F_j(\eta_{n,l,\sigma_z}) = \int_0 \frac{x^j dx}{1 + e^{x-\eta_{n,l,\sigma_z}}} \qquad \text{Para } j > -1$$

sendo $\eta_{n,l,\sigma_z} = (\varepsilon_F - E_{n,l,\sigma_z})/K_B T$. Por uma questão de simplicidade numérica usamos a seguinte aproximação para a função de Fermi-Dirac, que apresenta um erro inferior a 1%,[35,36]

$$F_j(\eta_{n,l,\sigma_z}) = \left(\frac{(j+1)2^{j+1}}{\left[b + \eta_{n,l,\sigma_z} + \left(\eta_{n,l,\sigma_z} - b^{\,c} + a^c \right)^{1/c} \right]^{j+1}} + \frac{e^{-\eta_{n,l,\sigma_z}}}{\Gamma(j+1)} \right)^{-1}$$

na qual

$$\begin{aligned} a &= \left[1 + \frac{15}{4}(j+1) + \frac{1}{40}(j+1)^2 \right]^{1/2} \\ b &= 1.8 + 0.61j \\ c &= 2 + (2 - \overline{2})2^{-j} \end{aligned}$$

Como a nossa função é a $F_{-1/2}(\eta_{n,l,\sigma_z})$, temos para esse caso que,

$$F_{-1/2}(\eta) = \left(\frac{\overline{2}}{2\sqrt{b + \eta + \left(\eta - b^{\,c} + a^c \right)^{1/c}}} + \frac{e^{-\eta}}{\overline{\pi}} \right)^{-1} \tag{3.8}$$

sendo:

$$\begin{aligned} a &= 1.69742452; \\ b &= 1.495; \\ c &= 2.828427125. \end{aligned}$$

As equações (3.4), (3.5) e (3.6) são resolvidas de forma autoconsistente, pois inicialmente a densidade eletrônica, não é conhecida. Logo, V_{KS} também não é completamente conhecido, pois os potenciais de Hartree e de troca e correlação dependem da densidade. Portanto, não é possível obter os autovetores e autoenergias do sistema. Logo, é necessário um procedimento autoconsistente para obter a estrutura eletrônica. Para iniciar o procedimento autoconsistente consideramos a densidade eletrônica inicial, e depois fazemos um ciclo, como representado na Fig. 3.2, obtendo a nova densidade. O ciclo autoconsistente é repetido diversas vezes até que a convergência seja obtida.

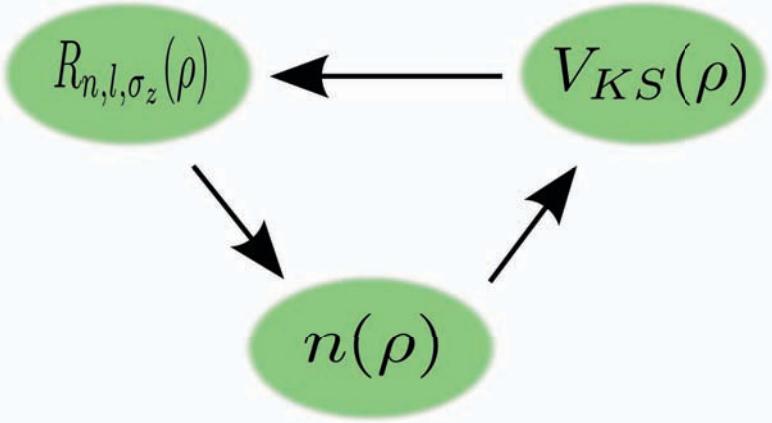


Figura 3.2: *Representação do procedimento autoconsistente. 1° Escolhemos a densidade inicial nula. 2° calcula-se o potencial efetivo e 3° obtêm se os autovetores e autovalores da eq. de Schrödinger. Com estes autovetores obtemos uma nova densidade e repetimos o ciclo até que a convergência seja obtida.*

As propriedades físicas de interesse do trabalho (níveis de energia, condutância, transcondutância, e energia total), foram obtidas como função do potencial de *gate* e/ou do campo magnético. Para diminuir o tempo computacional fixamos o potencial de *gate* e variamos o campo magnético em incrementos de 0.1 T. Para um novo campo magnético usamos a densidade do passo anterior para iniciar o novo ciclo autoconsistente. Isso fez com que o tempo computacional reduzisse bastante. Quando o potencial de *gate* variava a densidade eletrônica era zerada.

3.2 Solução da Equação de Poisson

Para encontrarmos o potencial de Hartree v_h deve-se resolver a equação de Poisson

$$^2v_h(\rho) = -\frac{4\pi e^2}{\epsilon} n(\rho). \tag{3.9}$$

A seguir apresentamos a abordagem usada para resolvermos a equação de Poisson (3.9) numericamente. Todos os cálculos são feitos em unidades adimensionais, para adimensionalizá-la multiplica-se por a_0^{*3}/Ry^*, em que $Ry^* = \dfrac{e^2}{2a_0^*}$ é o rydberg efetivo, obtendo assim:

$$^2v_h(\rho) = 8\pi n(\rho), \tag{3.10}$$

na qual $n(\rho) = -\frac{a_0^{*3}}{\epsilon}\left[n_{el.}(\rho) - N_d\Theta(\rho - R_{\text{spacer}})\Theta(R_d - \rho) + N_a\right]$, N_d e N_a as densidades de doadores e aceitadores, respectivamente. R_d é o raio da camada doadora e R_{spacer} o raio do

spacer. Em coordenadas cilíndricas, a equação de Poisson para o potencial de Hartree é

$$^2v_h(\rho) = \frac{\partial^2 v_h}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial v_h}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2 v_h}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 v_h}{\partial z^2} = 8\pi n(\rho). \tag{3.11}$$

Como potencial não depende de ϕ e z, a equação acima simplifica-se:

$$\frac{\partial^2 v_h}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial v_h}{\partial \rho} = 8\pi n(\rho). \tag{3.12}$$

Usando o método das diferenças finitas para uma rede não-uniforme conforme a figura 3.3, temos:

$$a_i v_{h_{i-1}} + b_i v_{h_i} + c_i v_{h_{i+1}} = 8\pi n_i, \tag{3.13}$$

na qual os coeficientes acima são, para $\rho = 0$, dados por

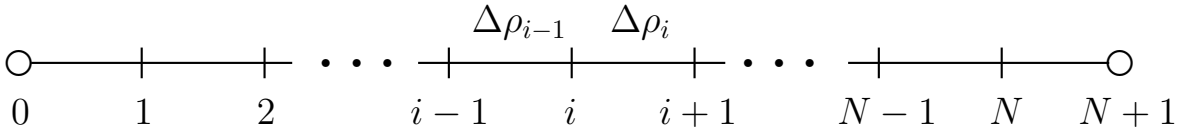


Figura 3.3: *Discretização não-uniforme da rede.*

$$\begin{aligned}
a_i &= \frac{2}{\Delta\rho_{i-1}(\Delta\rho_i + \Delta\rho_{i-1})} - \frac{1}{\rho_i}\frac{\Delta\rho_i}{\Delta\rho_{i-1}(\Delta\rho_i + \Delta\rho_{i-1})}, \\
b_i &= \frac{1}{\rho_i}\frac{\Delta\rho_i - \Delta\rho_{i-1}}{\Delta\rho_i\Delta\rho_{i-1}} - \frac{2}{\Delta\rho_i\Delta\rho_{i-1}}, \\
c_i &= \frac{2}{\Delta\rho_i(\Delta\rho_i + \Delta\rho_{i-1})} + \frac{1}{\rho_i}\frac{\Delta\rho_{i-1}}{\Delta\rho_i(\Delta\rho_i + \Delta\rho_{i-1})},
\end{aligned}$$

Como a equação de Poisson é uma equação diferencial de segunda ordem é necessário duas condições de contorno para determinar o potencial de Hartree que são as seguintes,

- O potencial de Hartree na interface semicondutor-metal, é igual a $v_h(R) = V_{bs} - V_G$, sendo V_{bs} o potencial da barreira Schottky e V_{gate} o potencial de *gate* aplicado;
- O potencial de Hartree em $\rho = 0$ é $v_h(0) = 0$.

Para considerarmos as condições de contorno, devemos introduzir os pontos $i = 0$ e $i = N + 1$ em nossa rede, como mostramos na figura 3.3. Nestes pontos o potencial tem o seguintes valores $v_{h_0} = 0$ e $v_{h_{N+1}} = v_h(R)$.

Para o ponto $i = 1$ a equação diferencial que descreve potencial de Hartree na origem pode ser escrita como:

$$a_1 v_{h_0} + b_1 v_{h_1} + c_1 v_{h_2} = 8\pi n_1, \tag{3.14}$$

considerando que $\Delta\rho_0 = \Delta\rho_1$, e consideramos ainda que quando $\rho \quad 0$ o seu valor é $\rho = \frac{1}{2}\Delta\rho_1$ e com essas aproximações obtemos que:

$$a_1 = 0, \qquad b_1 = -\frac{2}{\Delta^2\rho_1}, \qquad \text{e} \qquad c_1 = \frac{2}{\Delta^2\rho_1},$$

para $\rho = 0$.

Para o ponto N, temos que:

$$a_N v_{h_{N-1}} + b_N v_{h_N} + c_N v_{h_{N+1}} = 8\pi n_N, \tag{3.15}$$

Dessa forma, podemos escrever o potencial de Hartree da seguinte forma:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & a_4 & b_4 & c_4 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_5 & b_5 & \cdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & c_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & a_{N-1} & b_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} v_{h_1} \\ v_{h_2} \\ v_{h_3} \\ v_{h_4} \\ v_{h_5} \\ \vdots \\ v_{h_N} \end{pmatrix} = 8\pi \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ n_4 \\ n_5 \\ \vdots \\ n_N - c_n v_{h_{N+1}} \end{pmatrix} \tag{3.16}$$

Aqui vemos que o nosso problema foi transformado em um sistema linear cuja matriz associada é tridiagonal. A solução deste sistema é a matriz inversa dos coeficientes a_j, b_j e c_j.

3.3 Potencial de Troca e Correlação

A formulação apresentada na Seção 2.2.2 foi para sistemas nos quais as propriedades físicas são independentes do spin, no sistema investigado as propriedades são dependentes do spin. Então é necessário estender a DFT para levar em consideração esses efeitos. A extensão da DFT que leva em consideração os efeitos de spin é conhecida como teoria do funcional da densidade dependente de spin (*Spin-Density Functional Theory* - SDFT) e ela consiste em considerar a magnetização **m** do sistema como uma variável básica assim como a densidade

n. Como o campo magnético está na direção z, a magnetização está na mesma direção e é dada por $\mathbf{m} = m\hat{\mathbf{k}}$, com $m = \mu_B(n\ - n\ )$, sendo $n\ $ e $n\ $ as densidades de spin *up* e *down* respectivamente. Reescrevendo a equação da energia total (2.18) na SDFT temos

$$E[n\ , n\ ] = T_S[n\ , n\ ] + U_H[n\ , n\ ] + V[n\ , n\ ] + E_{xc}[n\ , n\ ]. \tag{3.17}$$

Da mesma forma que foi feito na Seção (2.2.2) deriva-se equações de um elétron para SDFT, só que agora temos que minimizar a energia com respeito a $n\ , n\ $, resultando numa equação de Schrödinger para cada componente de spin. Na aproximação local da densidade dependente de spin, a energia de troca e correlação é escrita como

$$E_{xc}[n\ , n\ ] = \int n(\mathbf{r})\epsilon_{xc}([n\ , n\ ]; (\mathbf{r}))dr \tag{3.18}$$

Neste trabalho utilizamos a parametrização para $\epsilon_{xc}([n\ , n\ ]; (\mathbf{r}))$ descrita por Vosko, Wilk e Nusair.[37] Usando essa parametrização a energia de troca por elétron é descrita por:

$$\varepsilon_x(n, \zeta) = \varepsilon_x(n, 0) + f(\zeta)\left[\varepsilon_x(n, 1) - \varepsilon_x(n, 0)\right] \tag{3.19}$$

na qual $\varepsilon_x(n, 1) = 2^{1/3}\varepsilon_x(n, 0)$ é a energia de troca para um gás de elétron polarizado, ou seja, $\zeta = (n\ - n\ )/n = 1$. Já $\varepsilon_x(n, 0)$ é a energia de troca por elétrons de um gás de elétrons homogêneo,[38] a qual é dada por

$$\varepsilon_x(n, 0) = -\frac{3}{4\pi}(3\pi^2)^{1/3}n^{1/3}. \tag{3.20}$$

A função $f(\zeta)$ é dada por,

$$f(\zeta) = \frac{(1+\zeta)^{4/3} + (1-\zeta)^{4/3} + 2}{2(2^{1/3} - 1)}. \tag{3.21}$$

A energia de correlação por elétron é

$$\varepsilon_c(n, \zeta) = \varepsilon_c(n, 0) + \alpha_c(n)\frac{f(\zeta)}{f\ (0)}(1 - \zeta^4) + \left[\varepsilon_c(n, 1) - \varepsilon_c(n, 0)\right] f(\zeta)\zeta^4, \tag{3.22}$$

os valores de $\alpha_c(n)$ são tabulados para várias densidades, do mesmo modo que os valores de $\varepsilon_c(n, 0)$ e $\varepsilon_c(n, 1)$ são tabulados (ver referência[37]).

Na SDFT o potencial de troca e correlação é obtido da seguinte forma

$$v_{xc} = \frac{\partial(n\varepsilon_{xc})}{\partial n_{\sigma_z}} = \frac{\partial(n\varepsilon_x)}{\partial n_{\sigma_z}} + \frac{\partial(n\varepsilon_c)}{\partial n_{\sigma_z}} \tag{3.23}$$

sendo que ε_x e ε_c são dados pelas eqs. (4.2) e (3.22), respectivamente.

A energia total do nanofio na SDFT é:

$$E[n\ , n\ ] = \sum_{n,l,\sigma_z} E_{n,l,\sigma_z} - \frac{1}{2}\int v_h(r)n(r)d\mathbf{r} - \sum_{\sigma_z}\int v_{xc}^{\sigma_z}(r)n_{\sigma_z}(r)dr + E_{xc}[n\ , n\ ] \tag{3.24}$$

3.4 Solução da Equação de Schrödinger

Nesta seção discutiremos o método utilizado na solução da equação de Schrödinger. O método, conhecido como *split-operator*, tem por base a equação de Schrödinger dependente do tempo. Inicialmente usado em dinâmica molecular[39,40] foi adaptado para o uso em física da matéria condensada, onde tem sido aplicado com sucesso.[41–44] Ele possibilita o estudo da evolução temporal das funções de onda de um dado sistema. Quando utiliza-se a evolução no domínio de tempos imaginários obtém-se os autoestados do sistema. Será mostrado inicialmente como calcular a propagação da função de onda no domínio de tempo real. Depois, repetindo este procedimento trocando t por $-i\tau$, isto é, fazendo a propagação da função de onda no domínio de tempo imaginário, será mostrado que a função de onda evolui para o estado fundamental do sistema, sendo que os estados excitados são obtidos impondo a ortogonalidade entre eles.

3.4.1 Evolução da Função de Onda Em Tempo Real

A equação de Schrödinger dependente do tempo

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\rho,t)}{\partial t} = H\Psi(\rho,t) \tag{3.25}$$

com o hamiltoniano[2]

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right] + V_{KS}(\rho) = T + V_{KS}(\rho), \tag{3.26}$$

[2]T não é o operador energia cinética, e sim, apenas algumas componentes dele

tem formalmente a seguinte solução

$$\Psi(\rho,t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_0^t \hat{H}dt\right)\Psi(\rho,0),$$

para um instante Δt posterior, temos

$$\Psi(\rho,t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t+\Delta t} \hat{H}dt\right)\Psi(\rho,t), \tag{3.27}$$

Como o Hamiltoniano não depende do tempo, reescreve-se a equação acima como

$$\Psi(\rho,t+\Delta t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}\Delta t\right)\Psi(\rho,t). \tag{3.28}$$

Usando (3.26), a Eq. (3.28) é escrita da seguinte forma

$$\Psi(\rho,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}\left(\frac{V_{KS}(\rho)}{2}+T+\frac{V_{KS}(\rho)}{2}\right)\right]\Psi(\rho,t). \tag{3.29}$$

Com o auxílio da identidade $e^{A+B+A} = e^A e^B e^A$, que é válida para dois operadores A e B que satisfaçam as relações de comutação $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$, a Eq. (3.29) é separada na forma

$$\Psi(\rho,t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV_{KS}(\rho)\Delta t}{2\hbar}\right]\exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right]\exp\left[-\frac{iV_{KS}(\rho)\Delta t}{2\hbar}\right]\Psi(\rho,t). \tag{3.30}$$

Para que as relações de comutação sejam satisfeitas, isto é,

$$\frac{1}{4}\left(\frac{i\Delta t}{\hbar}\right)^3 [V_{KS}(\rho),[V_e(\rho),T]] = 0; \tag{3.31}$$

$$\frac{1}{4}\left(\frac{i\Delta t}{\hbar}\right)^3 [T,[V_{KS}(\rho),T]] = 0 \tag{3.32}$$

termos da ordem de $(\Delta t)^3$ são desprezados introduzindo assim um erro na Eq. (3.30) devido à não-comutatividade dos operadores energia cinética e potencial. É importante notar que todos os três operadores que aparecem na (3.30) são unitários, logo, a norma da função de onda é conservada nessa operação.

Para obter a evolução temporal da função de onda, a Eq. (3.30) é resolvida numericamente. Isso é feito discretizando o espaço numa rede, podendo essa ser não-uniforme. Assim,

discretiza-se o espaço de forma a considerar uma distância maior entre pontos adjacentes, onde a função de onda varia lentamente. A seguir calcula-se a função de onda inicial e o potencial $V_{KS}(\rho)$ em cada ponto da rede. O uso de uma rede não-uniforme é apropriado para sistemas grandes, reduzindo o tempo computacional.

A função de onda $\Psi(\rho, t+\Delta t)$ é obtida da seguinte forma: Primeiramente, multiplica-se $exp[-\frac{iV_{KS}(\rho)\Delta t}{2\hbar}]$ pela função de onda inicial $\Psi(\rho, t)$:

$$\xi(\rho, t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{iV_{KS}(\rho)\Delta t}{2\hbar}\right]\Psi(\rho, t). \tag{3.33}$$

Em seguida, o operador contendo a energia cinética deve ser aplicado ao resultado obtido acima

$$\eta(\rho, t+\Delta t) = \exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right]\xi(\rho, t+\Delta t). \tag{3.34}$$

Para obter o $\eta(\rho, t+\Delta t)$, aproxima-se o operador exponencial acima da seguinte forma (ver Apêndice E)

$$exp\left[-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right] \approx \left[1+\frac{i\Delta t}{2\hbar}T\right]\cdot\left[1-\frac{i\Delta t}{2\hbar}T\right]^{-1}, \tag{3.35}$$

o erro cometido nessa aproximação também é da ordem de $(\Delta t)^3$. Pode-se observar ainda que o operador do lado direito da equação anterior permanece unitário. Portanto, a Eq. (3.34) pode ser escrita na forma

$$\left[1+i\frac{\hbar\Delta t}{4m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right]\cdot\eta(\rho, t+\Delta t) = \left[1-i\frac{\hbar\Delta t}{4m}\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right]\cdot\xi(\rho, t+\Delta t). \tag{3.36}$$

Para resolver a equação acima, isto é, determinar $\eta(\rho, t+\Delta t)$, as derivadas em cada ponto da rede são calculadas usando o método das diferenças finitas.[45] Escrevendo a eq.(3.36) na forma de diferenças finitas, obtém-se uma equação matricial. O problema foi transformado em um sistema linear cuja matriz associada é tridiagonal. A solução desse sistema é a inversa da matriz, a qual nos dá os valores da função $\eta(\rho, t+\Delta t)$ em cada ponto da rede, e esse passo deverá ser repetido para cada componente do operador energia cinética.

Finalmente, a função de onda no instante $t + \Delta t$ é obtida multiplicando-se em cada ponto da rede $\exp\left(-iV_{KS}(\rho)\Delta t/2\hbar\right)$ por $\eta(\rho, t + \Delta t)$, ou seja,

$$\Psi(\rho, t + \Delta t) = \exp\left(-i\frac{V_{KS}(\rho)\Delta t}{2\hbar}\right)\eta(\rho, t + \Delta t). \tag{3.37}$$

3.4.2 Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário

As autofunções do sistema descrito por um hamiltoniano são obtidos através do mesmo procedimento descrito na seção anterior trocando t por $-i\tau$, isto é, propagando a função de onda no domínio de tempos imaginários. As funções de onda iniciais podem ser quaisquer, sendo que neste trabalho usamos os polinômios de Hermite.

Com essa modificação as funções de onda evoluem para o estado fundamental do sistema (ver Apêndice F). Os estados excitados são obtidos impondo-se a ortonormalidade entre as funções onda a cada evolução temporal usando-se o método de ortonormalização de Gram-Schmidt,

$$\Psi_i(\tau) \;= \frac{\varphi_i(\tau) \;- \sum_{j<i} \Psi_j(\tau)\;\varphi_i(\tau)\;\;\Psi_j(\tau)}{\sqrt{\varphi_i(\tau)\;\varphi_i(\tau)\;\; - \sum_{j<i}\;\;\Psi_j(\tau)\;\varphi_i(\tau)\;\;^2}}.$$

Os índices i e j representam os vários estados de sistema.

Ao contrário da propagação em tempo real, as funções de onda agora devem ser normalizadas a cada evolução de $\Delta t = -i\Delta t$. Esse processo é repetido em ordem crescente de energia para todos os auto-estados. As funções de onda resultantes são novamente evoluídas de Δt, até que a convergência na energia seja alcançada.

Para que as aproximações feitas na seção anterior sejam válidas o incremento temporal Δt deve ser pequeno. Para obter o melhor incremento de tempo Δt para cada caso, faz-se uma propagação da função de onda do sistema em tempos reais e observa-se a conservação da energia; se ela está sendo conservada então este é um bom incremento de tempo, senão deve-se diminuir o incremento até obter um que conserve a energia do sistema na propagação em tempos reais. O Δt utilizado foi de 0,1 fs que, além dele conservar a energia, tornou o cálculo

mas rápido e estável.

Basicamente, as características mais importantes desse método de solução da equação de Schrödinger são:

1. *Boa estabilidade*;

2. *Rápida convergência*;

3. *Depende muito pouco do chute inicial das funções de onda*;

4. *Pode-se estudar qualquer poço de potencial*;

5. *Possibilidade de se estudar transientes quando a propagação é feita no tempo real.*

Como o cálculo é autoconsistente, é necessário definir um critério de convergência, o adotado neste trabalho foi que a diferença de energia para todos os níveis ocupados a cada 100 propagações consecutivas seja menor que 10^{-8} meV, isto é,

$$E_i^{t+\Delta t} - E_i^t \leq 10^{-8}\,\text{meV},\ i = 1, \ldots, n \tag{3.38}$$

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo apresentamos os resultados obtidos pelo cálculo da estrutura eletrônica do sistema para a condutância e transcondutância, usando as teorias apresentadas nos capítulos anteriores. Para compreendermos melhor os efeitos de muitos corpos no sistema investigado, apresentaremos nossos resultados em três aproximações, que são:

i) Aproximação de Hartree: a qual leva em conta a interação coulombiana clássica;

ii) DFT levando em conta somente os efeitos Troca;

iii) DFT levando em conta somente os efeitos de Troca e Correlação.

Todos os cálculos de estrutura eletrônica foram realizados à $T = 0$ K, pois os experimentos, geralmente, são realizados a baixas temperaturas, ou seja, da ordem de alguns milikelvins. Como os cálculos foram realizados para uma temperatura nula, então o potencial químico é a energia de Fermi E_F, a qual é mantida constante durante todo o cálculo da estrutura eletrônica. Para o cálculo da condutância usamos o coeficiente de transmissão do modelo de *saddle-point*,[46] que tem uma forma similar a da função de distribuição de Fermi-Dirac. Nesse modelo, considera-se que há uma temperatura finita T_{SP} que é da ordem de 1 K. Com isso usamos a Eq. (2.51) para calcular a condutância do nanofio.

Os parâmetros usados em todos os cálculos estão descritos na tabela 4.1.

Parâmetros	
Concentração de Doadores (N_d)	5×10^{17} cm^{-3}
Concentração de Aceitadores (N_a)	1×10^{14} cm^{-3}
Raio do Poço (R_p)	80 Å
Energia de Fermi E_F	0 meV
Concentração de Mn	0,05
Concentração de Mg	0,20
Temperatura da Estrutura Eletrônica	0 K
T_{SP}	1 K

Tabela 4.1: *Parâmetros usados nos cálculos de estrutura eletrônica e condutância. A energia de Fermi é mantida constante durante o cálculo autoconsistente da estrutura eletrônica.*

4.1 Aproximação de Hartree

A Fig. 4.1 ilustra o comportamento da transcondutância em função do campo magnético e do potencial de *gate*. Esse gráfico foi obtido fazendo o potencial de troca e correlação igual a zero no cálculo da estrutura eletrônica. Os resultados obtidos mostram que o comportamento da transcondutância em função de B tem o mesmo comportamento da função de Brillouin. Com o aumento do campo magnético observa-se que o primeiro nível separa-se em dois e os seguintes separam-se em quatro, isso é devido à quebra de simetria da componente z do momento angular orbital. A primeira subbanda, ($L_z = 0$), não possui degenerescência de momento angular orbital, já as com $L_z = 0$ são degeneradas a $B = 0$T. Além dessa simetria todas as subbandas são degeneradas em spin. Portando, com a aplicação de um campo magnético, a primeira subbanda separa as componentes de spin, enquanto que as demais separam momento angular orbital e spin.

Agora vamos analisar os resultados obtidos para condutância na ausência (Fig. 4.2a) de campo magnético. Em ambos os casos, observa-se que as subbandas começam a ser preenchidas numa voltagem de *gate* da ordem de 225 mV. Nesse momento tanto a condutância dos elétrons com spin *up* quanto a dos elétrons com spin *down* saem de zero e vão para G_0 ($G_0 = e^2/h$). Como nesse caso o campo magnético é zero não há uma separação dos spins, então a condutância total vai de zero para $2G_0$. A medida que aumentamos a voltagem de *gate* vemos que a

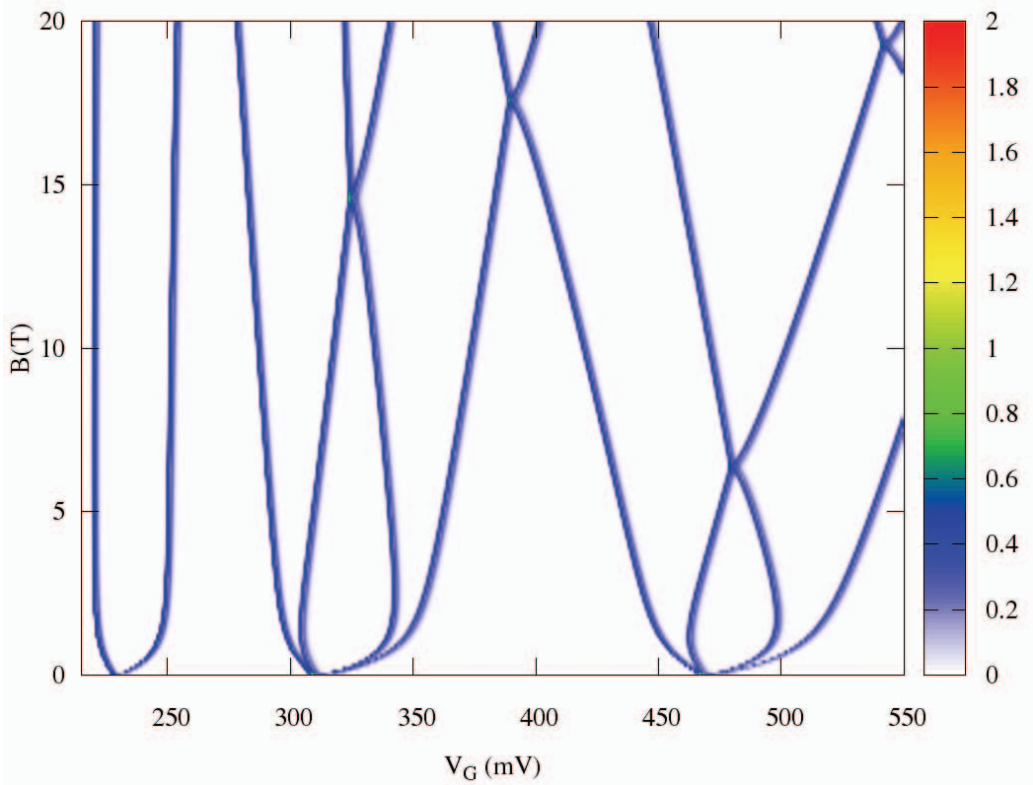
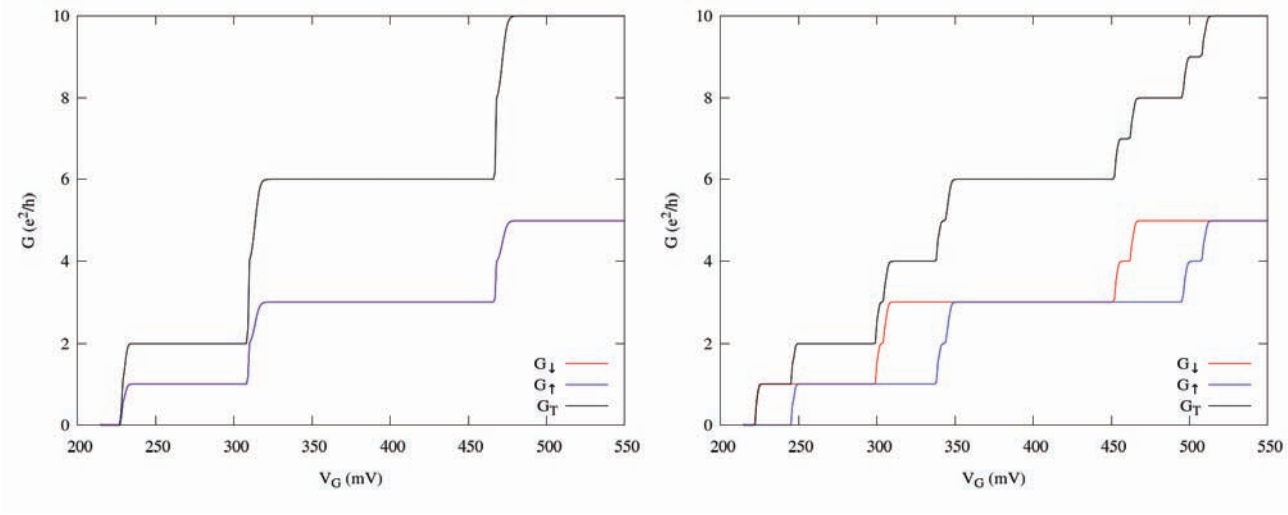


Figura 4.1: *Gráfico em escala de cores da transcondutância em função de V_G e B, na aproximação de Hartree. Todos os níveis seguem a função de Brillouin até um campo de 2 T que é quando ela satura. Observa-se quatro cruzamentos dos níveis eletrônicos.*

condutância permanece constante até que outra subbanda comece a ser preenchida. Quando isso ocorre a condutância total aumenta por um fator de quatro, isso porque ela é degenerada tanto em spin quanto em momento angular orbital. Aqui vale ressaltar que a degenerescência de L_z é uma característica intrínseca da simetria cilíndrica do fio quântico.

Nota-se ainda que para cada um dos valores $G_T = 1, 4$ e $8\ G_0$ existe um pequeno platô, e esses platôs surgem tanto devido a inclusão de T_{SP} no cálculo da condutância quanto ao fato das subbandas "caminharem" sob o nível de Fermi com o aumento de V_G (ver Fig. 4.3a).

Aplicando um campo magnético as degenerescências de spin e L_z são quebradas simultaneamente. A Fig. 4.2 (b) mostra o comportamento da condutância sob a influência de um campo magnético de 1 T. Nesse caso as degenerescências foram totalmente quebradas e a condutância para G , G e G_T aumenta em passos de G_0 com o aumento de V_G. A primeira subbanda, que possui $l = 0$, é totalmente simétrica é não possui degenerescência em L_z, separa as componentes de spins. Já para as demais subbandas sempre ocorre a separação em



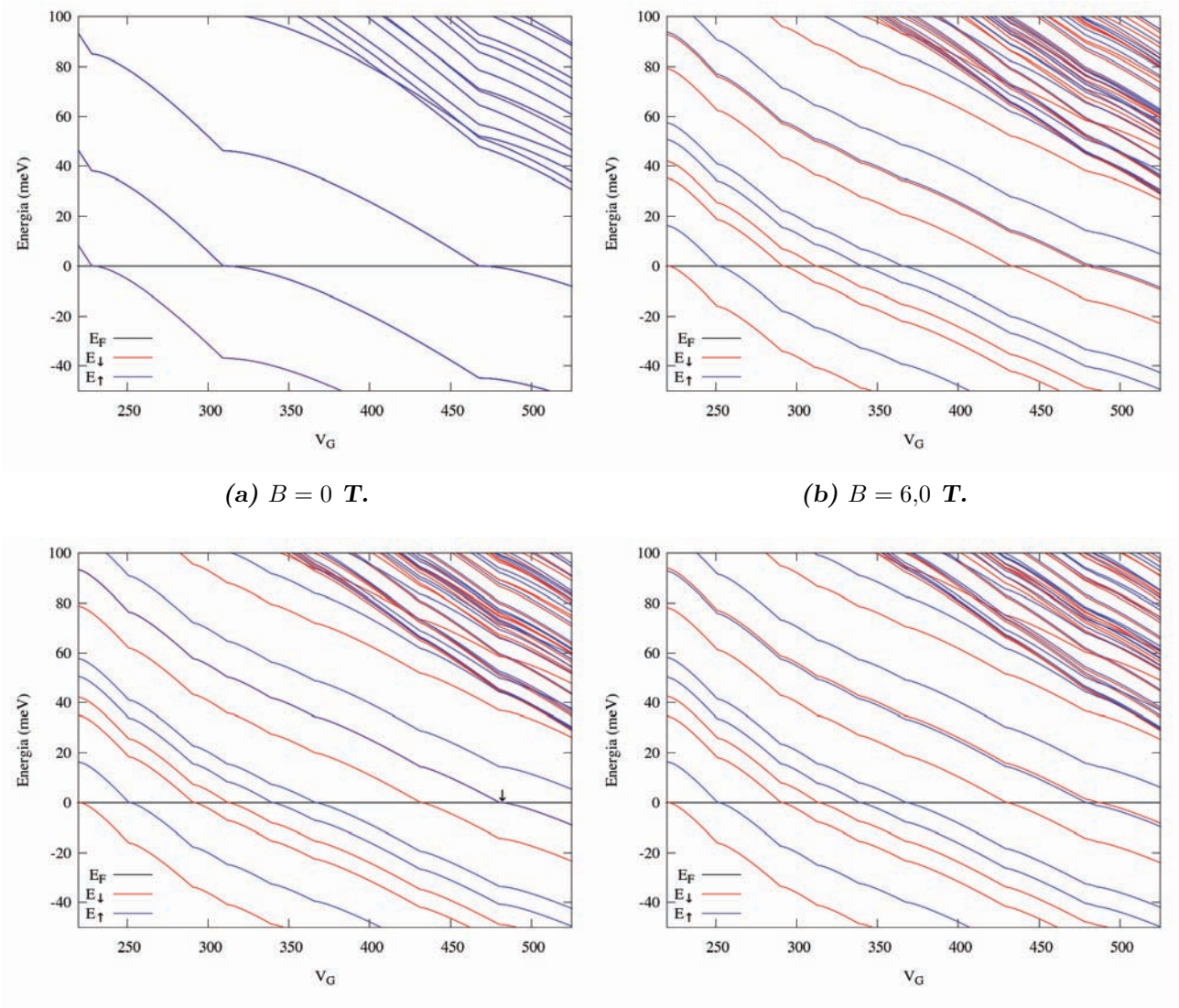
(a) Condutância para $B = 0$ ***T.*** ***(b) Condutância para*** $B = 1$ ***T.***

Figura 4.2: *Os gráficos ilustram o comportamento da condutância do sistema em função do potencial de* gate. *(a) Aqui todos os níveis são degenerados em spin e momento angular orbital* ($l = 0, \pm1, \pm2, \ldots$). *Veja que os níveis com* $l = \pm1$, *segundo* platô *são degenerados, esta degenerescência é quebrada com aplicação de um campo magnético. (b) Nesse caso a degenerescência de spin é quebrada fazendo que todos os níveis se abram em dois, enquanto que a degenerescência de momento angular é quebrada nos níveis com* $l = \pm1, \pm2, \ldots$, *já para* $l = 0$ *não há degenerescência de momento angular orbital a ser quebrada.*

quatro, duas devido aos spins e outras duas por causa do momento angular L_z, cujos autovalores são $l = \pm1, \pm2, \ldots$. Note entretanto que as subbandas com l positivo tem um autovalor correspondente a energia diferente daquele com l negativo.

Retornando a Fig. 4.1, nota-se que há quatro cruzamentos que ocorrem em torno dos pontos mostrado na Tabela 4.2. Devemos ressaltar aqui que cruzamentos de spins opostos também ocorrem em fios quânticos de geometria com *split-gate*, mas cruzamento de mesmo spin não acontecem nesta geometria.[23] Os cruzamentos de mesmo spin só ocorrem por que os níveis tem diferentes valores de l, se eles fossem iguais os níveis não cruzariam. Novamente este comportamento ocorre devido a simetria cilíndrica do nanofio, pois nesta geometria os níveis possuem momento angular orbital bem definidos.

Ainda na Fig. 4.1 observamos que para campos magnéticos de até $B = 2$ T o comportamento da transcondutância com o campo magnético é igual para todas as subbandas, ou seja, eles seguem o comportamento da função de Brillouin. A partir desse campo as subbandas tem comportamentos distintos, pois a função de Brillouin saturou e agora o termo $-\hbar w_c l/2$



(a) $B = 0$ ***T.*** ***(b)*** $B = 6{,}0$ ***T.***

(c) $B = 6{,}4$ ***T.*** ***(d)*** $B = 7{,}0$ ***T.***

Figura 4.3: *Os gráficos ilustram o comportamento das subbandas de energia em função do potencial de gate na ausência de campo magnético e na presença dele. (a) Para $B = 0$ T, todos as subbandas estão degeneradas tanto em spin quanto em momento angular orbital. (b) Todas as degenerescências foram quebradas e este gráfico apresenta o comportamento dos níveis eletrônicos do sistema um pouco antes do cruzamento mostrado na Fig. 4.1, próximo ao ponto $V_G \approx 479$ mV, ocorrer. (c) Aqui é onde os níveis marcados com uma seta cruzam simultaneamente o nível de Fermi. (d) Campo logo após o cruzamento ter acontecido.*

é quem governa o comportamento da transcondutância em função de B. Isto pode ser visto em qualquer uma das subbandas, por exemplo, para a primeira subbanda que tem $l = 0$ o comportamento da transcondutância para campos magnéticos superiores a 2 T é linear com o aumento de B.

Na Fig. 4.3 (a) temos três subbandas cruzando o nível de Fermi, a primeira é du-

Ponto	Cruzamentos		Curva que chega ao cruzamento pela			
	B (T)	V_G mV	Esquerda		Direita	
			l	spin	l	spin
1	6,4	479	-2		+2	
2	14,8	330	-1		+1	
3	17,5	390	-1		+2	
4	19,5	540	-2		+3	

Tabela 4.2: *Cruzamentos que ocorrem no gráfico da transcondutância 4.1. Os pontos 1,2 e 3 ocorrem para spin opostos, o ponto apresenta um cruzamento de mesmo spin. Note que somente no ponto 1 temos um cruzamento com a mesma simetria do momento angular orbital.*

plamente degenerada enquanto as demais são quadruplamente degeneradas. A quebra dessas degenerescências ocorrem somente quando um campo magnético é aplicado, como foi salientado na análise das Figs. 4.1 e 4.2 (b). Das Figuras 4.3, nota-se que quando uma subbanda cruza o nível de Fermi a inclinação de todas as subbandas mudam simultaneamente, isto ocorre porque a densidade eletrônica aumenta, e consequentemente o potencial de Hartree aumenta, pois ele é proporcional a densidade eletrônica, e isso faz com que todas as subbandas sintam um potencial diferente.

A Fig. 4.3 (c) mostra o comportamento das subbandas como função do potencial de *gate* para um campo magnético de 6,4 T. Desta observa-se que as subbandas com spin *up* e *down* estão degenerados ao cruzarem o nível de Fermi próximo ao ponto $Vg \approx 479$ (ver seta), esse é o ponto 1 apresentado na Tabela 4.2. Note que as subbandas são degeneradas independente do potencial de *gate*. Na Fig. 4.3 (b) para $B = 6$ T, a subbanda de spin *down* cruza o nível de Fermi antes da subbanda com spin *up*, já na Fig. 4.3 (d) para $B = 7$ T, após o cruzamento ter acontecido é a subbanda de spin *up* quem cruza E_F primeiro.

Os resultados apresentados mostram que a simetria do nanofio tem forte influência sobre as propriedades eletrônicas e de transporte do sistema. A simetria cilíndrica do fio quântico faz com que o sistema seja altamente degenerado na ausência de um campo magnético, aplicando um campo magnético as degenerescências de spin e de momento angular orbital são quebradas. Nas duas próximas seções, será dada ênfase à análise dos resultados para $B = 0$

T, pois os resultados para campo finito são semelhantes aqueles em que só consideramos o potencial de Hartree.

4.2 Efeitos de Troca

Na Seção 4.1, apresentamos os resultados devido a Hartree, o qual fornece a contribuição das interações coulombiana de muitos corpos classicamente. Agora apresentaremos os resultados obtidos para a estrutura eletrônica, a condutância e a transcondutância incluindo o potencial de troca no cálculo autoconsistente. A troca é um efeito quântico, que vem do fato das partículas serem indistinguíveis. Nossos resultados foram obtidos por meio de um cálculo autoconsistente no qual inicialmente fixamos um potencial de *gate* e o campo magnético em 20 T, e em seguida

i) variamos o campo magnético até 0 T com um decremento de 0,1 T, sempre usando os resultados obtidos no passo anterior, como ponto de partida do novo cálculo, após efetuarmos um decremento no campo magnético;

ii) toda vez que incrementávamos a voltagem de *gate*, começávamos o cálculo do zero, para evitar problemas numéricos na convergência e para que não houvesse resquícios do V_G anterior no novo *gate*.

A Fig. 4.4 apresenta o comportamento da transcondutância, em função do campo magnético e do potencial de *gate*. Quase todas as características observadas na aproximação de Hartree são observadas aqui; entretanto, a grande novidade ocorre em $B = 0$ T onde há uma quebra de degenerescência devido ao spin, ou seja, uma separação em energia das componentes de spin. Essa separação pode ser vista de forma clara na Fig. 4.5, onde nota-se que as subbandas um pouco antes e logo após cruzarem o nível Fermi, são iguais. Num pequeno intervalo de voltagem de *gate*, quando as subbandas vão cruzar o nível de Fermi elas abrem a degenerescência de spin. A degenerescência de L_z, como já era esperado, não é quebrada.

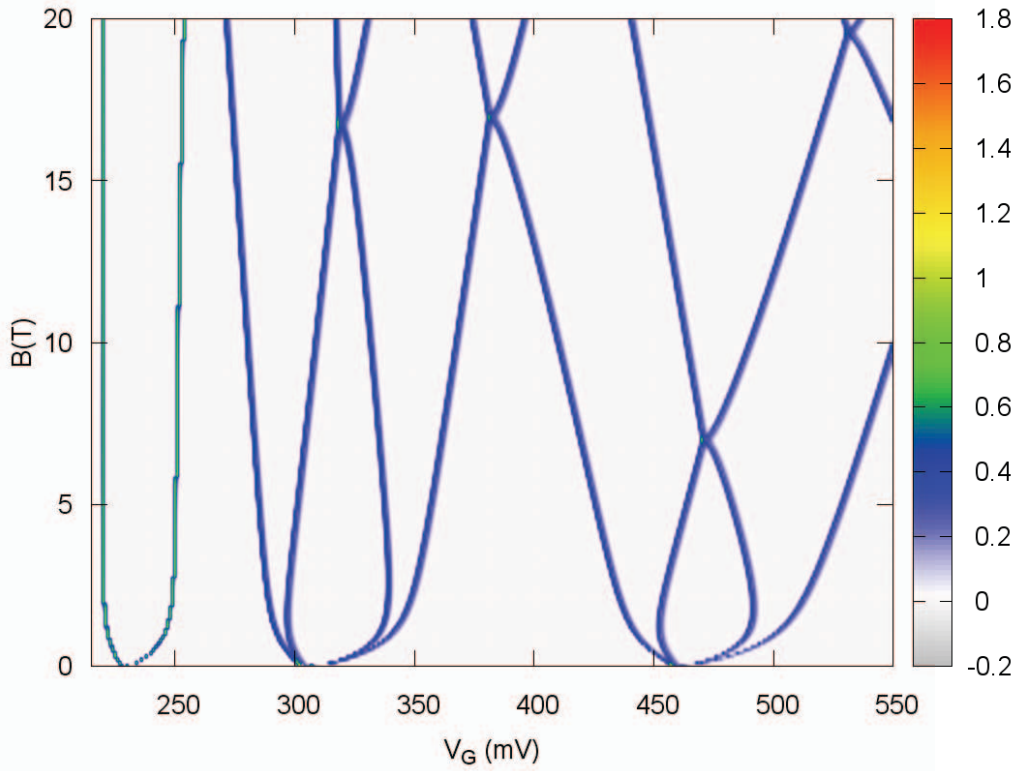


Figura 4.4: *Gráfico em escala de cores da transcondutância em função de V_G e B. Além do potencial de Hartree, efeitos de troca foram incluídos no cálculo autoconsistente. As mesmas característica observadas a campo finito na seção anterior também são observadas aqui.*

O fato de ocorrer uma separação das componentes de spin quando $B = 0$ T, indica que o spins eletrônicos do sistema estão polarizados. Essa polarização caracteriza uma transição ferromagnética, o que já era esperado por duas razões:

i) Existência de ferromagnetismo em semicondutores magnéticos diluídos do tipo $(\mathrm{A}^{II},\mathrm{Mn})\mathrm{B}^{VI}$;[14,16,17]

ii) Instabilidades ferromagnéticas ocorrem em fios quânticos de geometria de *split-gate*.[23]

A Fig. 4.5 apresenta o comportamento das subbandas em função do potencial de *gate* para $B = 0$ T. Para voltagens de *gate* inferiores a 225 mV, todas as subbandas estão desocupadas, isto é, possuem uma energia acima da energia de Fermi, e todas elas estão degeneradas tanto em spin quanto em L_z. Aumentando V_G os estados tendem a cruzar o nível de Fermi. Neste momento acontece a separação das subbandas devido ao spin. A subbanda com spin *down* cruza primeiro E_F, tornando-se populada, o que provoca uma mudança na densidade

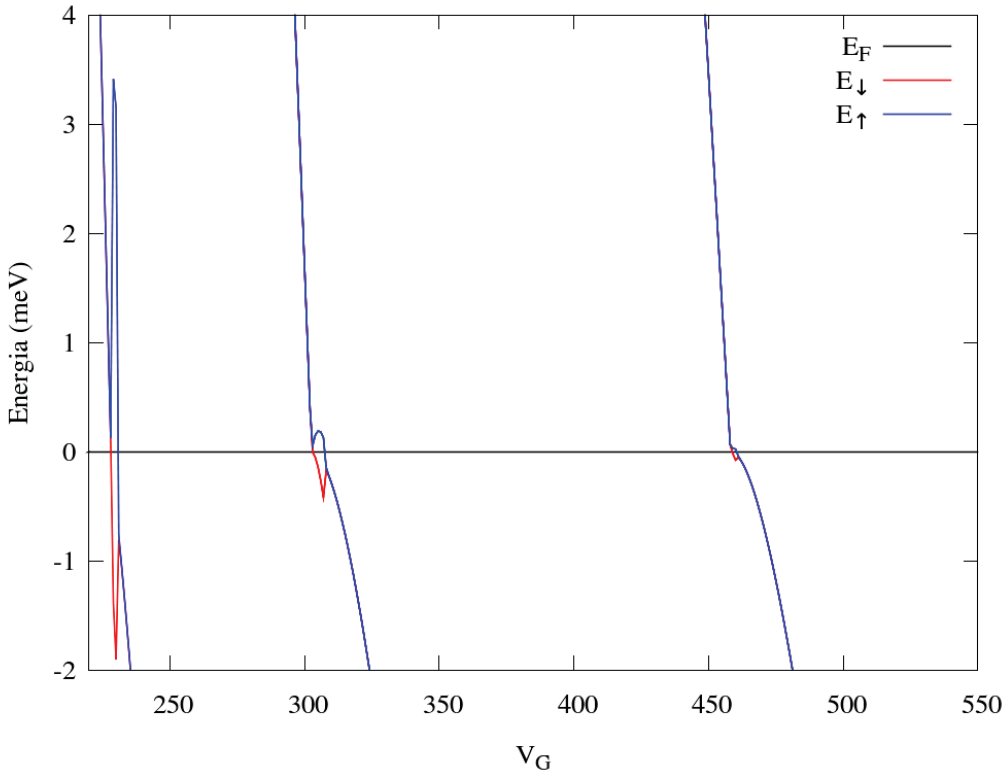


Figura 4.5: *O gráfico ilustra o comportamento das energias das subbandas em função do potencial de* gate *para $B = 0$ T. Nesse caso, a degenerescência do momento angular orbital não foi quebrada, portanto, no gráfico acima temos dez curvas, sendo cinco para cada spin: sendo uma para $l = 0$, duas para $l = \pm 1$ e outras duas para $l = \pm 2$. Nota-se que, mesmo na ausência de um campo magnético, os níveis de energia devido a elétrons com spin* up *e spin* down *separam-se ao cruzar o nível de Fermi. O tamanho da separação diminui com a subbanda.*

eletrônica, mudando portanto o potencial efetivo do sistema. Enquanto as subbandas estão cruzando E_F, pode-se afirmar que o sistema encontra-se num estado ferromagnético[1], pois todos os spins eletrônicos, que ocupam as subbandas do nanofio tem a mesma orientação. Aumentando o potencial de *gate* as subbandas com spin *up* cruzam o nível de Fermi e o sistema torna-se paramagnético, ou seja, quando as densidade de spin *up* e *down* forem iguais, fato esse, que restaura a degenerescência de spin. Em nosso cálculo não há um mecanismo que quebre a degenerescência do momento angular orbital em $B = 0$ T.

O tamanho da separação entre as subbandas de spins opostos é maior para as primeiros subbandas, porque essa separação está relacionada com a densidade eletrônica de cada subbanda, e consequentemente, com a energia de troca, por exemplo: a primeira subbanda possui

[1]O termo ferromagnético refere-se ao sistema polarizado, enquanto que o termo paramagnético ao sistema não-polarizado.

uma população eletrônica maior do que a segunda subbanda, que por sua vez possui uma população eletrônica maior do que a terceira, e assim por diante.

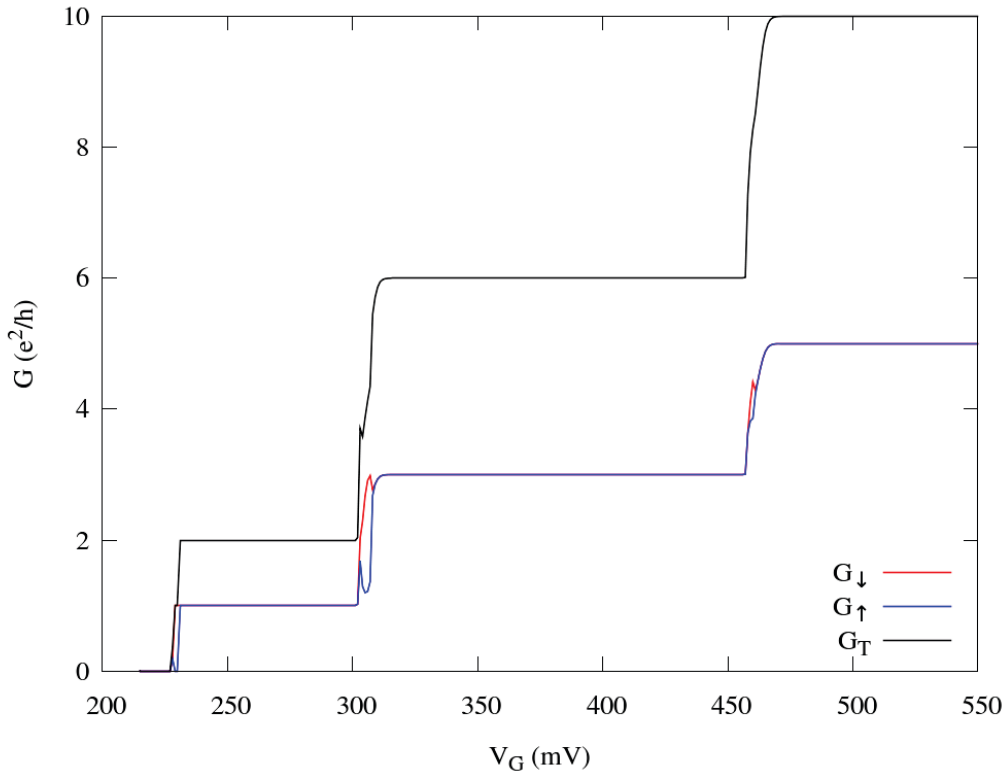


Figura 4.6: *Os gráficos ilustram o comportamento da condutância do nanofio em função do potencial de* gate. *(a) Condutância para $B = 0$ T, observa-se uma separação da condutância em duas componentes, uma para spin* up *e outra para spin* down. *As componentes z do momento angular não separadas.*

Na escala de cores da transcondutância, na Fig. 4.4, existem valores negativos, que são difíceis de serem vistos. Mas a Fig. 4.6 mostra com clareza onde isso ocorre: na mudança do primeiro para o segundo platô de G_T, vemos que a condutância decresce, e este decrescimento gera uma transcondutância negativa. O decréscimo de G_T é causado pelas diferenças entre G e G . A magnitude dessa diferença está intimamente relacionada com a energia de troca do sistema.

Nesta seção apresentamos os resultados que levam em conta no cálculo autoconsistente somente os potenciais de Hartree e de troca. Nossos resultados apresentaram uma polarização de spin eletrônico para $B = 0$ T, assim como os resultados experimentais de K. J. Thomas *et al.* para os fios quânticos como geometria de *gate*.[23] Essa quebra da degenerescência de spin

não ocorreu na aproximação de Hartree o que indica que os efeitos quânticos de muitos corpos são importantes nesse sistema. Com isso devemos incluir os efeitos de correlação eletrônica no cálculo autoconsistente.

4.3 Efeitos de Troca e Correlação

Na seção anterior mostramos que os efeitos de troca separam as componentes de spin em $B = 0$ T. Com o intuito de investigar mais detalhadamente essa separação incluímos os efeitos de correlação no cálculo autoconsistente. O cálculo da estrutura eletrônica que realizamos para levar em conta efeitos de troca e correlação no formalismo da SDFT, é similar ao realizado na Seção 4.2.

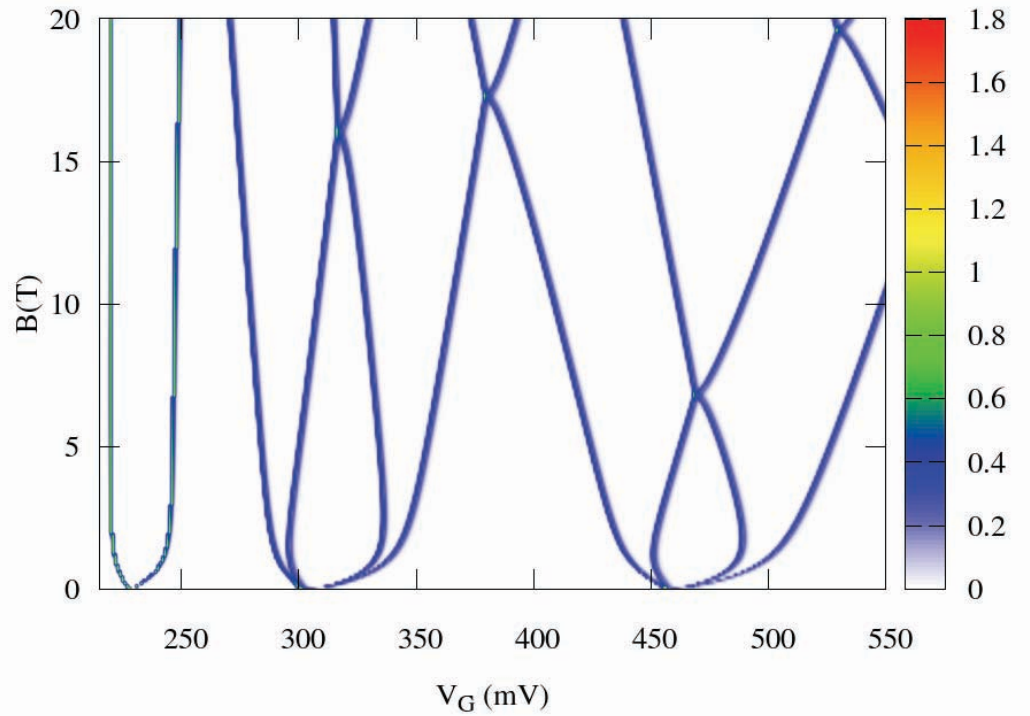


Figura 4.7: *Gráfico da transcondutância em função de B e V_G. O comportamento a campo finito é semelhante ao caso que só considera o potencial de Hartree. Vemos que em $B = 0$ T as curvas da transcondutância em torno de 300 mV e 460 mV estão abertas, enquanto a curva em 230 mV não apresenta abertura. Portanto, quando a primeira subbanda cruza o nível de Fermi o sistema permanece paramagnético, já quando as demais cruzam o nanofio sofre uma transição de fase do estado paramagnético para o ferromagnético.*

Assim como no caso em que só consideramos o potencial de troca, as componentes de spin do sistema para a segunda e terceira subbandas separam-se em $B = 0$ T, conforme mostra o gráfico da transcondutância (Fig. 4.7) as curvas não se encontram em $B = 0$ T. Entretanto,

para a primeira subbanda as curvas encontram-se em $B = 0$ T, diferentemente do que ocorre quando só há efeitos de troca, no qual todas as subbandas separam-se em $B = 0$ T. Quando a segunda e terceira subbandas cruzam o nível de Fermi, o fio quântico polariza-se, ou seja, o sistema sofre uma transição de fase, sai de um estado não-polarizado para um polarizado. Quando a primeira subbanda começa a conduzir não ocorre nenhuma transição, nesse caso o sistema ainda está no estado paramagnético. Para $B = 0$ T houve a quebra da degenerescência de spin da algumas subbandas, o mesmo não ocorre com as componentes do momento angular orbital que permanecem degeneradas.

A Fig. 4.8 ilustra o comportamento da condutância em função do potencial de *gate* para $B = 0$ T. As componentes de spin da condutância separam-se na mudança do primeiro para segundo, e do segundo para o terceiro platô. Essa separação é causada pelos efeitos de troca e correlação, e uma separação similar também foi observada na Fig. 4.6 quando só os efeitos de troca foram considerados. No entanto, neste caso a separação é menor pois os efeitos de correlação diminuem os efeitos devido a troca. Diferentemente das outras duas mudanças de platô, no surgimento do primeiro a condutância é degenerada em spin, ou seja, as subbandas de spin *up* e *down* começam a conduzir simultaneamente, diferentemente das demais subbandas.

A Fig. 4.9 mostra o comportamento das três primeiras subbandas como função do potencial de *gate* (V_G). Com o aumento de V_G diminui-se a distância em energia das subbandas com o nível de Fermi. A medida em que aumentamos V_G, o sistema apresenta uma mudança de comportamento em torno do ponto no qual a subbanda cruza o nível de Fermi (E_F). A primeira subbanda ao cruzar o nível de Fermi, tem um comportamento diferente das demais, pois sua degenerescência de spin não é quebrada ao cruzar E_F. Entretanto, as demais subbandas quando se aproximam do nível de Fermi, sofrem uma quebra de degenerescência devido ao spin, sendo que as subbandas com spin *down* cruzam o nível de Fermi antes daquelas com spin *up*. Logo após a subbanda de spin *down* cruzar o nível de Fermi, o nanofio encontra-se spin polarizado, ou seja, o nanofio tornou-se ferromagnético. Embora não esteja na figura, mas observamos que logo após a segunda subbanda cruzar o nível de Fermi, há também uma quebra da degenerescência

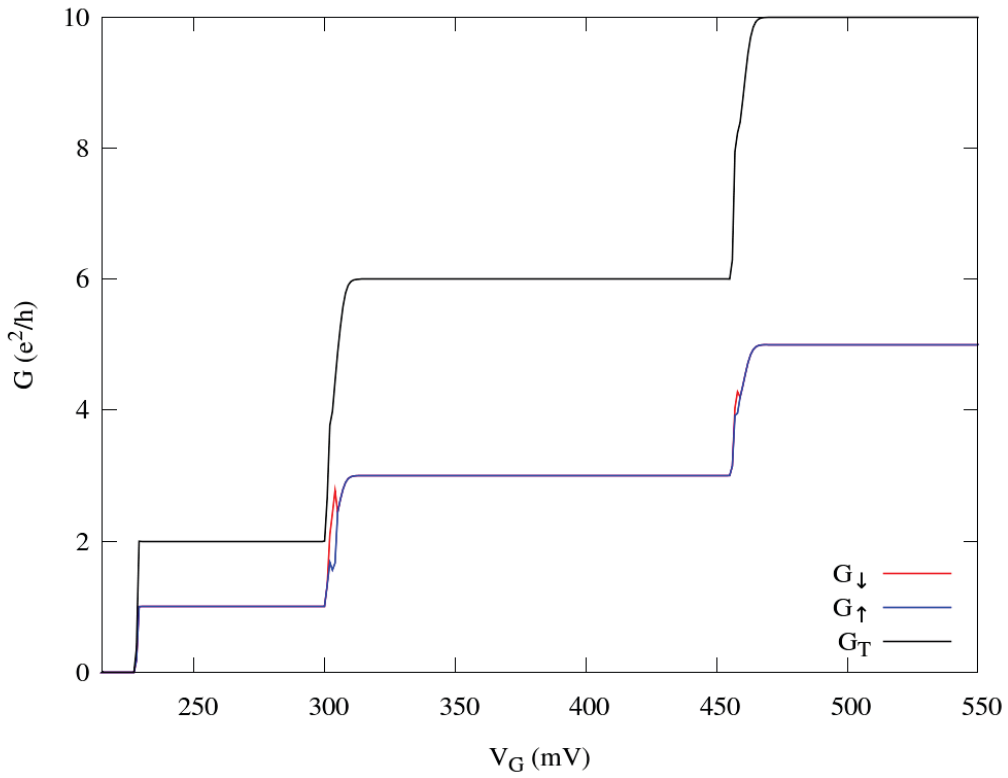


Figura 4.8: *Comportamento da condutância do nanofio em função do potencial de* gate. *Observa-se que na mudança do primeiro para o segundo platô e do segundo para o terceiro, a condutância para elétrons com spin* up *é diferente da condutância para aqueles com spin* down.

de spin da primeira subbanda, e o mesmo ocorre quando as demais subbandas cruzam o nível de Fermi.

É interessante sabermos porque a primeira subbanda ao cruzar E_F não sofre uma transição de fase semelhante à que ocorre nas outras. A princípio não existe razão para que a degenerescência de spin dessa subbanda não seja quebrada, pois quando consideramos somente efeitos devido a Hartree e de troca todos as subbandas tiveram as suas degenerescências quebradas, entretanto, conforme Starikov *et al.*[24] os efeitos devido a troca superestimam a separação de spin. A única característica que a primeira subbanda possui e que as outras não, é que o valor médio de L_z para essa subbanda é zero, enquanto que para as demais ele é diferente de zero.

Quando o valor médio de L_z é zero, isto significa que as subbandas associadas a este autovalor tem uma simetria cilíndrica, ou seja, seus autoestados possuem somente uma de-

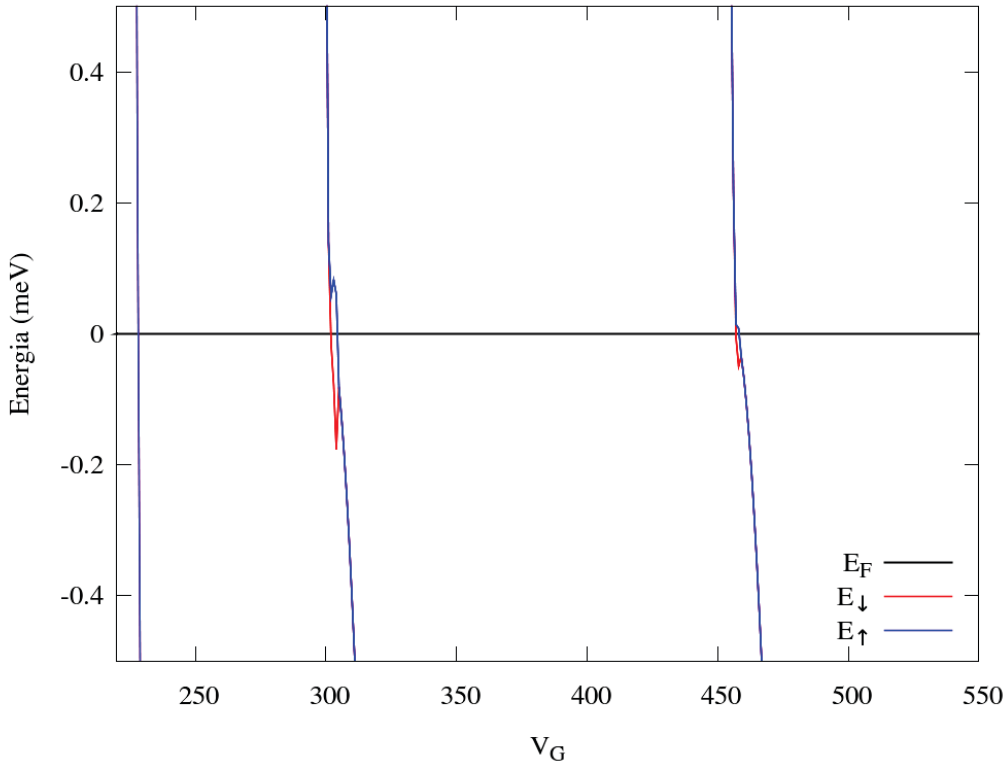


Figura 4.9: *O gráfico ilustra o comportamento das energias das subbandas em função do potencial de* gate *para $B = 0$ T. Nesse caso, a degenerescência do momento angular orbital não foi quebrada, portanto, no gráfico acima temos dez curvas, sendo cinco para cada spin: sendo uma para $l = 0$, duas para $l = \pm 1$ e outras duas para $l = \pm 2$. Note que em $l = 0$, assim como no gráfico da condutância, a degenerescência em spin não foi quebrada, enquanto que para $l = \pm 1, \pm 2, \ldots$ ela é quebrada.*

pendência radial. Quando o autovalor de L_z é diferente de zero, existe uma dependência tanto radial quanto axial (eixo z), portanto, o correspondente momento angular orbital irá interagir com o campo magnético B. Classicamente podemos interpretar essas duas situações da seguinte forma: Para um estado com $l = 0$, seria equivalente a termos um elétron "girando" em torno do eixo z em uma órbita no plano $z = 0$. Já para $l = 0$, seria equivalente a termos um elétron girando em torno do eixo z, em uma órbita cujo o plano forma um ângulo com o eixo z.

O fato da primeira subbanda não sofrer uma transição ferromagnética, está indicando que a origem da anomalia 0,7 talvez esteja relacionada com o valor não nulo do momento angular orbital, pois nos fios quânticos com geometria de *split-gate* o momento angular orbital das subbandas eletrônicas deve possuir um valor médio diferente de zero, por isso lá todas as subbandas se polarizam em $B = 0$ T. Enquanto que na geometria cilíndrica somente as subbandas que possuem valor médio de L_z diferente de zero, possuem uma polarização de spin

em $B = 0$ T.

Em 2003, foi proposto por Starikov *et al.*[24] que a origem da anomalia 0,7, nos fios quânticos com geometria de *split-gate*, estaria associada a existência de estados excitados na DFT. A existência de estados excitados na DFT foi demonstrada em 1985 por Perdew e Levy.[47] A partir do cálculo via formalismo de DFT, que é uma teoria para o estado fundamental, eles mostram que é possível obter estados excitados. Com o propósito de investigar se a origem da polarização de spin do nanofio está associada a existência de estados excitados no formalismo da DFT, calculamos a energia total do sistema para duas situações distintas:

(I) Fixamos o campo magnético $B = 0$ T e variamos o potencial de *gate*, dessa forma simulamos um nanofio que nunca tenha sido exposto a um campo magnético. Chamaremos a energia total e a condutância total obtida nesse procedimento de $E_T^{(I)}$ e $G_T^{(I)}$;

(II) Para cada voltagem de *gate*, calculamos a estrutura eletrônica, partindo de um campo magnético inicial de $B = 20$ T, e chegamos no campo $B = 0$ T, adiabaticamente, por meio de um decremento de 0,1 T no campo. Dessa forma simulamos um nanofio que já foi exposto a um campo magnético. Chamaremos a energia total e a condutância total obtida nesse procedimento de $E_T^{(II)}$ e $G_T^{(II)}$. Aqui vale dizer que campo o magnético inicial pode ser qualquer desde que seja diferente de zero.

A Fig. 4.10 (a) ilustra o comportamento da energia total em função do potencial de *gate* para $B = 0$ T. A linha preta representa o caso (I) enquanto a vermelha o caso (II). Em ambos os casos, com o aumento de V_G a energia total diminui, isso ocorre porque V_G aumenta a densidade eletrônica e número de subbandas abaixo do nível de Fermi, fazendo com que a energia total do sistema diminua. A energia total tem um comportamento linear em relação ao potencial de *gate*, mas existem pontos nos quais ocorre uma mudança na inclinação da energia total. Esses são os pontos em que ocorrem o cruzamento das subbandas com o nível de Fermi. Nas Figs. 4.10 (b), 4.10 (c) e 4.10 (d) ampliamos as regiões em que ocorrem as mudanças de comportamento na Fig. 4.10 (a). Essas três figuras mostram que a energia total das duas

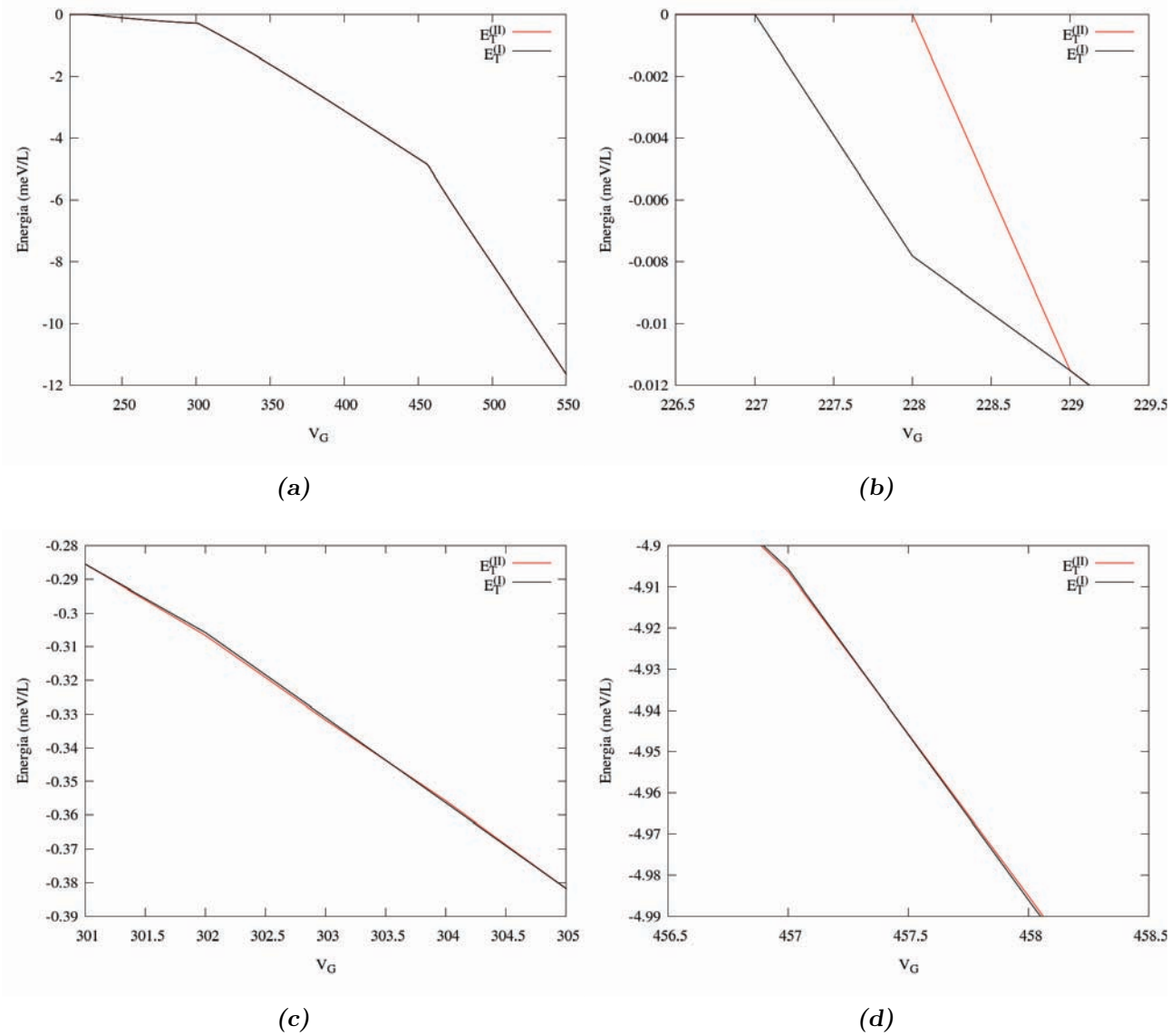


Figura 4.10: *Energia total do sistema em função do potencial de* gate *para dois tipos de cálculos, um com* $B \neq 0$ *T (linha preta) caso (II) e o outro com* $B = 0$ *T (linha vermelha) caso (I). Em (a) temos a energia total em função de* V_G*, enquanto nas figuras (b), (c) e (d) mostramos o comportamento da energia total nas regiões em que a sua inclinação muda. Em (b) o caso com* $B \neq 0$ *T possui energia total maior que o caso* $B = 0$ *T, enquanto que em (c) e (d) observamos um cruzamento das energias totais. Este cruzamento indica que o estado ferromagnético está perdendo sua polarização, pois o estado não polarizado para o caso* $B \neq 0$ *T possui energia total maior que o caso* $B = 0$ *T.*

situações são distintas para os três pontos onde ela muda sua inclinação.

Na Fig. 4.10 (b) vemos que a energia total da situação (I) é menor do que a da situação (II), essa região é aquela imediatamente após a primeira subbanda, com $l = 0$, ter cruzado o nível de Fermi. Essa subbanda não sofre uma transição ferromagnética (ver Fig.4.9), mantendo-se em ambos os casos paramagnética, apesar de suas energias totais serem diferentes. Esse,

resultado indica que a geometria do sistema também possui um papel importante na polarização de spin do nanofio.

As Figs. 4.10 (c) e 4.10 (d) são ampliações para energia total de ambos os casos na região onde ocorre uma mudança na inclinação da energia total. Esses pontos são os mesmos nos quais as subbandas de spin *down* cruzam o nível de Fermi, tornando o sistema imediatamente após o cruzamento spin-polarizado. Observamos que antes da segunda e terceira mudança de inclinação a energia total de ambos casos são iguais, mas com o aumento de V_G surge um pequeno intervalo no qual inicialmente a energia total do caso (II) passa a ser menor que a do caso (I) e ocorre um cruzamento a partir do qual a energia do caso (I) passa a ser menor do que a do caso (II), e em seguida elas encontram-se e passam a ser iguais novamente. Esses cruzamentos, indicam que há uma competição entre os estados ferromagnético e paramagnético. E que ora o estado ferromagnético é o estado fundamental e ora ele é o estado excitado.

A Fig. 4.11 mostra o comportamento da condutância total para os dois casos, e desta vê-se que somente nas mudanças de platô é que as condutâncias diferem de um caso para outro. A Fig. 4.11 (b) mostra que a condutância do caso (I) é maior que a do caso (II), porque a voltagem de *gate* necessária para popular a subbanda do caso (I) é menor que do que a do caso (II).

Na Fig. 4.11 (c) a condutância do caso (I) é maior que a do caso (II), porque no caso (I) há quatro subbandas degeneradas enquanto que no caso (II) devido a quebra da degenerescência de spin há somente duas subbandas degeneradas devido ao momento angular orbital. No caso (II), devido à quebra de degenerescência de spin as duas subbandas de spin *down* inicialmente contribuem primeiro e mais do que as de spin *up*, enquanto no caso (I) todas as quatro subbandas contribuem igualmente para a condutância total.

No Gráfico 4.11 (d) temos uma situação similar à descrita para a Fig. 4.11 (c), entretanto aqui ocorre um cruzamento das condutâncias, o qual deve-se a temperatura finita T_{SP} que foi introduzida no cálculo da condutância para simular o modelo *saddle-point*[46] da transmissão. Logo após o cruzamento das subbandas de spin *down* com o nível de Fermi, as subbandas

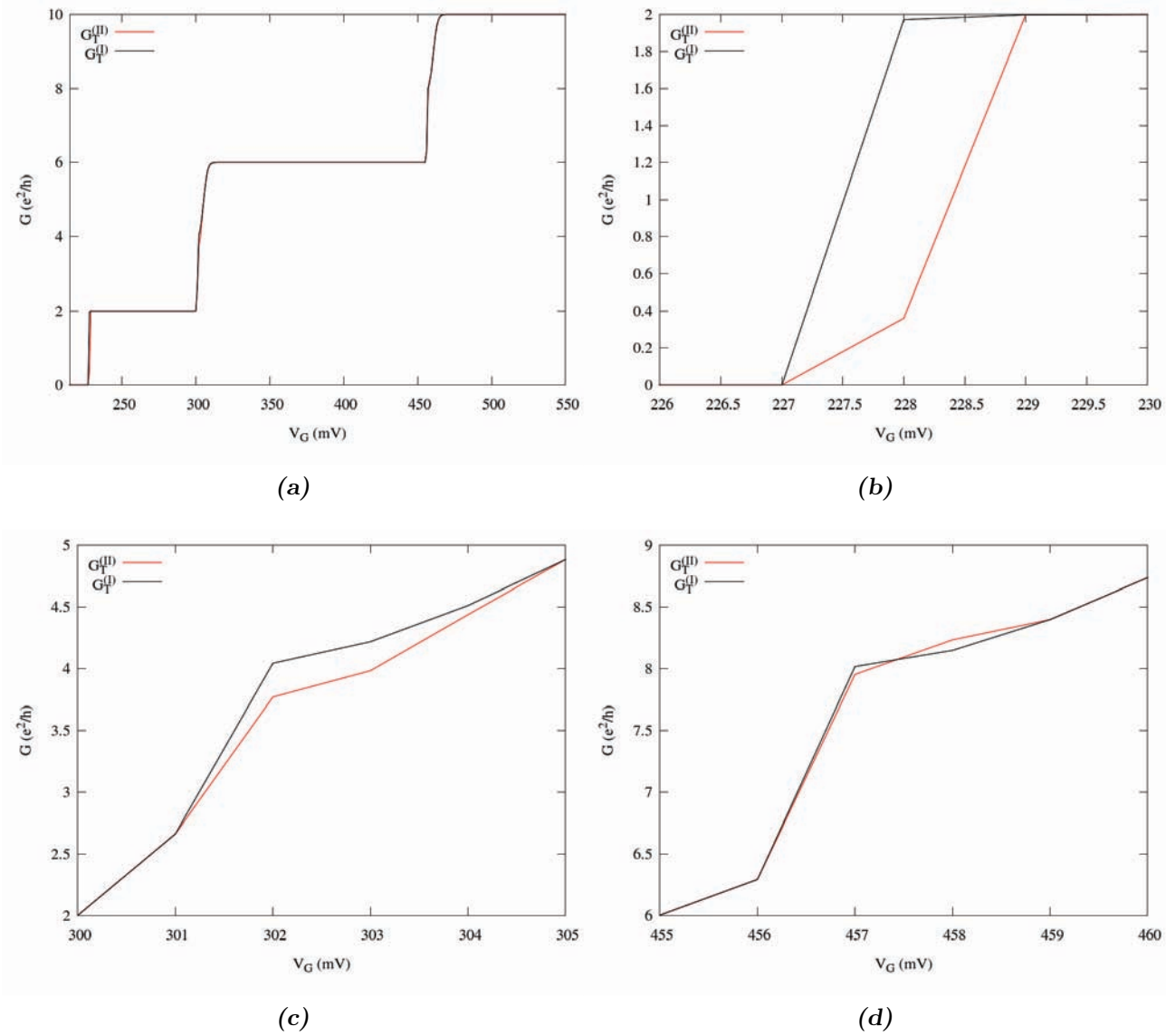


Figura 4.11: *Condutância total do sistema para os dois procedimentos autoconsistente feitos. A curva preta é para o caso (I) $B = 0$ T e a linha vermelha é para o caso (II) B 0. Nas Figs. (b), (c) e (d) temos ampliações das regiões onde ocorrem as mudanças de* platô *na figura (a). Em (b) e (c) a condutância do caso B 0 T é menor do que a do caso $B = 0$ T enquanto que em (c) temos um cruzamento das condutâncias.*

de spin *up* se encontram um pouco acima deste, entretanto, para uma temperatura finita elas também contribuem para a condutância total. Além disso, as quatro subbandas degeneradas do caso (I) não cruzam o nível de Fermi diretamente, ou seja, elas "caminham" sob ele, enquanto que as do caso (II) cruzam diretamente. Isso tudo faz com que a condutância do caso (II) fique maior do que a do caso (I) num pequeno intervalo de voltagem de *gate*.

No cálculo no qual os efeitos de troca e correlação são levados em conta, apareceram características que não foram observadas na geometria de *split-gate*, tanto nos resultados experimentais de K. J. Thomas *et al.*[23] quanto nos resultados teóricos de Filipe Sammarco,[48] e essas características devem-se à simetria cilíndrica do nanofio. O fato do primeiro nível com $l = 0$ não polarizar, indica uma possível origem para anomalia 0,7. Em nossos resultados para a energia total observamos que há uma competição entre os estados ferromagnético e paramagnético, ou seja, ora o estado ferromagnético é o estado fundamental e ora ele é o estado excitado do sistema.

Capítulo 5

Conclusões e Perspectivas

Nesta dissertação apresentamos nossos resultados para o cálculo autoconsistente da estrutura eletrônica, das subbandas de energia, da energia total, da condutância e da transcondutância de um nanofio de DMS do tipo caroço-casca com dopagem remota tipo-n sob as influências do potencial de *gate* e do campo magnético. Para compreendermos melhor as contribuições de muitos corpos, realizamos cálculos autoconsistentes tanto na aproximação de Hartree quanto usando a teoria do funcional da densidade dependente de spin (SDFT). Os cálculos usando o formalismo da SDFT foram realizados em duas partes: uma em que levamos em conta somente os efeitos da troca e a outra na qual, além dos efeitos de troca foram considerados os efeitos de correlação. O valor do campo magnético inicial influência os resultados, como por exemplo, a energia total em função do potencial de *gate* para um campo magnético nulo é diferente daquela obtida, em $B = 0$ T, quando o campo magnético possui um valor inicial finito que vai sendo adiabaticamente levado para zero. Vale ressaltar que até onde constatamos não há nenhum resultado experimental para esses nanofios, então nossos resultados podem indicar o que os experimentais devem observar.

Além da simetria cilíndrica possuir um espectro de energia mais rico que os fios quânticos com geometria de *split-gate*, o custo computacional é bem baixo devido a simetria, pois é possível separar todas as coordenadas do problema, restando apenas a direção radial para ser resolvida numericamente.

O modelo utilizado para obter a estrutura eletrônica e as propriedades físicas calculadas

para o nanofio é muito simples: consideramos que ele é infinito na direção z e a temperatura usada para o cálculo da estrutura eletrônica foi de $T = 0$ K. A interação entre os elétrons e os íons de Mn foram tratadas dentro da teoria de campo médio. O cálculo da condutância foi realizado no regime de respota linear ($I = GV_{SD}$), e usamos o coeficiente de transmissão do modelo de *saddle-point*, que tem uma forma similar à da função de distribuição de Fermi-Dirac. Embora, esse modelo seja simples, foi possível verificar que a simetria do problema contribui significativamente para o efeito denominado anomalia 0,7.

No modelo com troca e correlação, a subbanda que possui autovalor de L_z igual a zero não se polariza, indicando que uma possível origem da anomalia 0,7 está na simetria dessa subbanda. Já as subbandas que possuem $l = 0$ sofrem uma transição de fase ao cruzarem o nível de Fermi, passando do estado paramagnético para ferromagnético. No modelo no qual somente efeitos de troca foram considerados, todas as subbandas, independentemente de l, sofreram transição de fase. Quando os efeitos de correlação foram incluídos observamos que eles diminuíram os efeitos devido a troca, nas subbandas com $l = 0$, embora a separação dos spins ocorra do mesmo modo em ambos os casos. Já na subbanda com $l = 0$ os efeitos de correlação "cancelam" os efeitos devido a troca, a priori não há razão para isso ocorrer em nosso modelo de SDFT, e portanto, investigações mais detalhadas são necessárias para encontramos a origem desse "cancelamento".

No cálculo da energia total observamos que o estado ferromagnético ora é o estado fundamental, ora é o estado excitado. Portanto, existe uma competição entre os estados paramagnético e ferromagnético.

Como perspectivas de um próximo trabalho, devemos considerar o tamanho do nanofio na direção z finito e fazer um cálculo das propriedades de transporte fora do equilíbrio. O cálculo da condutância fora do equilíbrio deverá intensificar e/ou elucidar algum efeito que estaja mascarado no cálculo no regime de respota linear.

Apêndice A

Hamiltoniano do Sistema

Aqui iremos descrever uma partícula carregada na presença de uma campo magnético uniforme e estático. Somente o movimento orbital será considerado, e qualquer efeito devido ao spin ou ao momento magnético serão omitidos.

A.1 Campo magnético uniforme

Apesar de estarmos estudando um campo magnético de magnitude B uniforme e na direção z. Existem, de fato, muitos potenciais vetores diferentes que podem gerar este campo magnético. Alguns dos resultados a seguir irão depender somente do campo magnético, enquanto outros irão depender da escolha em particular do potencial vetor.

A forma genérica do hamiltoniano que descreve o acoplamento de uma partícula com o campo eletromagnético é dada por

$$H = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A})^2}{2m} + q\phi + V_{KS}(\mathbf{R}), \tag{A.1}$$

na qual m é a massa da partícula e q ($q > 0$, ou seja, para um elétron $q = -e$) é a carga da partícula, e $\mathbf{p}$ é o operador momentum da partícula. Os potenciais vetor $\mathbf{A}(\mathbf{R}, t)$, escalar $\phi(\mathbf{R}, t)$ e da estrutura $V_{KS}(\mathbf{R})$ são operadores porque eles são funções do operador posição $\mathbf{R}$. As dependências em t (se houver) corresponde a dependência intrínseca no tempo dos campos (estamos usando a representação de Schrödinger). Chamaremos $V_{efetivo}(\mathbf{R}) = +q\phi + V_{KS}(\mathbf{R})$, logo

O Hamiltoniano (A.1) pode ser escrita como

$$H = \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}}{2m} - \frac{q}{2m}\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p}\right) + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{A} + V_{efetivo}(\mathbf{R}). \tag{A.2}$$

A diferença entre $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}$ e $\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$ pode ser determinada pela ação destes operadores em uma função de onda arbitrária $\psi(\mathbf{r})$,

$$\left(\mathbf{p}\cdot\mathbf{A}\right)\psi(\mathbf{r}) = -i\hbar \quad \cdot(\mathbf{A}\psi) = -i\hbar\mathbf{A}\cdot \quad \psi - i\hbar\psi \quad \cdot\mathbf{A}.$$

Desde que $\psi(\mathbf{r})$ é uma função de onda arbitrária, a relação acima pode ser escrita como uma relação entre operadores:

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} - \mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = -i\hbar\left(\quad \cdot\mathbf{A}\right), \tag{A.3}$$

a qual é mantida em qualquer representação, e com isto temos que:

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = 2\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + i\hbar\left(\quad \cdot\mathbf{A}\right);$$

$$\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = 2\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} - i\hbar\left(\quad \cdot\mathbf{A}\right).$$

Note que é sempre possível escolher um potencial vetor $\mathbf{A}$ de tal modo que $\quad\cdot\mathbf{A} = 0$, e esta escolha de gauge é conhecida como gauge de Coulomb. Desse modo, usando o gauge de Coulomb, temos que $\mathbf{p}\cdot\mathbf{A} + \mathbf{A}\cdot\mathbf{p} = 2\mathbf{A}\cdot\mathbf{p}$, logo a forma geral do hamiltoniano na representação das coordenadas é

$$H = \frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{p}}{2m} - \frac{q}{m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{p} + \frac{q^2}{2m}\mathbf{A}\cdot\mathbf{A} + V_{efetivo}(\mathbf{R}), \tag{A.4}$$

ou na representação das coordenadas temos que:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \quad ^2 + i\frac{\hbar q}{m}\mathbf{A}\cdot \quad + \frac{q^2}{2m}A^2 + V_{efetivo}(\mathbf{R}). \tag{A.5}$$

Na interpretação desta expressão deveríamos lembrar que, apesar da aparente complexidade, a soma dos três primeiros termos é justamente a energia cinética, $MV^2/2$. Algumas vezes o primeiro termo é descrito como a energia cinética e os outros dois próximos termos são descritos como correções paramagnéticas e diamagnéticas. Isto não está certo, e de fato os termos individuais não tem um significado físico distinto porque separadamente eles não são invariantes sobre transformações de gauge.

Aqui iremos estudar o caso de um campo magnético uniforme na direção z, e para isso, usaremos o chamado gauge de simétrico, que em coordenadas cilíndricas é expresso por:

$$\mathbf{B} = B\,\hat{\mathbf{k}} \qquad \text{e} \qquad \mathbf{A} = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B} \tag{A.6}$$

Neste caso $\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A} = \boldsymbol{\nabla} \cdot (-\frac{1}{2}\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) = 0$, satisfazendo o gauge de Coulomb. Usando a seguinte propriedade da análise vetorial

$$(\mathbf{A} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{C} = (\mathbf{C} \times \mathbf{A}) \cdot \mathbf{B} = (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) \cdot \mathbf{A} \tag{A.7}$$

podemos escrever o segundo termo de (A.4), como

$$\frac{q}{m}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} = \frac{q}{2m}\,(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{p} = \frac{q}{2m}\,(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{p}) \cdot \mathbf{B} = \frac{q}{2m}\mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = -\frac{1}{2}\omega_c L_z. \tag{A.8}$$

Isso é verdade porque $[\mathbf{p}, \mathbf{B}] = 0$. Aqui $\mathbf{L}$ é o operador momentum angular, e

$$\omega_c = -\frac{qB}{m}, \tag{A.9}$$

é a frequência de ciclotônica (Note que, $q > 0$).

Já o terceiro termo de (A.4) possui o seguinte termo

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{4}\,(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \cdot (\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \tag{A.10}$$

que usando (A.7), pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \cdot \mathbf{A} =& \frac{1}{4}\,(\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) \cdot (\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{4}\,(\mathbf{B} \times (\boldsymbol{\rho} \times \mathbf{B})) \cdot \boldsymbol{\rho} \\ =& \frac{1}{4}\,(\boldsymbol{\rho}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{B}) - \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\rho})) \cdot \boldsymbol{\rho} = \frac{1}{4}\left[(\mathbf{B} \cdot \mathbf{B})(\boldsymbol{\rho} \cdot \boldsymbol{\rho}) - (\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{B})^2\right] \\ =& \frac{1}{4}B^2\rho^2 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Note que $\boldsymbol{\rho} \cdot \mathbf{B} = 0$. Com isso a Hamiltoniana (A.4), pode ser reescrita como:

$$H = \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{p}}{2m} + \frac{1}{2}\omega_c L_z + \frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2 + V_{efetivo}(\mathbf{R}). \tag{A.12}$$

Se o potencial efetivo $V_{efetivo}(\mathbf{R})$ for independente de z, ou seja, $V_{efetivo}(\mathbf{R}) = V_{efetivo}(\rho, z) = V_{efetivo}(\rho)$, então esse hamiltoniano pode ser dividido em duas componentes,

$$H = H \quad + H_z \tag{A.13}$$

na qual

$$H_z = \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}\omega_c L_z, \tag{A.14}$$

enquanto

$$H \ = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2 + V_{efetivo}(\rho). \tag{A.15}$$

Como

$$[H \ , H_z] = 0, \qquad [H, L_z] = 0,$$

então, podemos usar uma base de autovetores comuns a H (com autovalores E) e H_z (com autovalores E_z), os quais serão automaticamente autovetores de H com autovalores

$$E = E \ + E_z. \tag{A.16}$$

A.2 Autovalores de H_z

O hamiltoniano H_z, expresso na Eq. (A.14) é dado pela adição de dois termos, os quais comutam entre-si, ou seja,

$$\left[\frac{p_z^2}{2m}, \frac{1}{2}\omega_c L_z\right] = 0. \tag{A.17}$$

Portanto, os autovalores de H_z (E_z) são dados pela soma dos autovalores de cada termo de H_z, assim para o autoestado k_z, l , temos

$$\frac{p_z^2}{2m} \ k_z, l \ = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \ k_z, l \qquad \text{e} \qquad \frac{1}{2}\omega_c L_z \ k_z, l \ = \frac{1}{2}\hbar\omega_c l \ k_z, l \tag{A.18}$$

logo

$$H_z \ k_z, l \ = E_z \ k_z, l \ = \left(\frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c l\right) \ k_z, l \ . \tag{A.19}$$

O espectro de autovalores de L_z é $l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$. Portanto, os autovalores de H_z são

$$E_z = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{1}{2}\hbar\omega_c l, \qquad \text{com} \qquad l = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots. \tag{A.20}$$

Em coordenadas cilíndricas os operadores p_z e L_z são dados por

$$p_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial z} \qquad \text{e} \qquad L_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial \phi} \tag{A.21}$$

A.3 Hamiltoniano H em Coordenadas Cilíndricas

A componente radial do hamiltoniano total é dado pela Eq. (A.15), a qual, em coordenadas cilíndricas

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]+\frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2+V_{efetivo}(\rho), \tag{A.22}$$

esse hamiltoniano pode ser escrita em função de L_z, usando a relação (A.21) temos

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right]+\frac{L_z^2}{2m\rho^2}+\frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2+V_{efetivo}(\rho). \tag{A.23}$$

Sabemos que $L_z\ k_z,l\ = l\hbar\ k_z,l\ $, logo a Eq. (A.23) pode ser reescrito como

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right]+\frac{\hbar^2l^2}{2m\rho^2}+\frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2+V_{efetivo}(\rho) \tag{A.24}$$

redefinido o potencial efetivo como

$$V_{efetivo}(\rho)=\frac{\hbar^2l^2}{2m\rho^2}+\frac{1}{8}m\omega_c^2\rho^2+V_{efetivo}(\rho), \tag{A.25}$$

substituindo a eq. (A.25) na eq. (A.26) obtemos

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\right]+V_{efetivo}(\rho). \tag{A.26}$$

Apêndice B

Densidade de Estados

Agora vamos determinar a densidade de estados do nosso sistema, que é necessária para obter várias propriedades do sistema. De fato, sabe-se que o movimento dos portadores é tridimensional. Por isso, uma descrição mais realística desta estrutura unidimensional é fornecida pela solução da eq. de Schrödinger, que fornece as funções de onda

$$\psi(r,\phi,z) = \frac{e^{ik_z z}}{\overline{L_z}}\Psi(\rho,\phi) \tag{B.1}$$

e as energias de cada nível confinado

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_{n,\sigma_z} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m},$$

onde $\mathcal{E}_{n,\sigma_z}$ são os autovalores da equação de Schrödinger bidimensional para o problema de um gás de elétrons unidimensional. Pode-se associar cada subbanda unidimensional, que representa a energia cinética devido ao movimento dos portadores ao longo da direção z, com cada um dos níveis de energia ($\mathcal{E}_n$) confinados. A densidade de estados é definida como

$$g\left(\mathcal{E}\right) = \sum_{n,k_z,\sigma_z} \delta\left(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{n,\sigma_z} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}\right) \qquad \mathcal{E}_n < 0 \tag{B.2}$$

O tamanho L_z da amostra é por hipótese macroscópico. Aplicando as condições de contorno cíclicas para o movimento na direção z obtemos que

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z} n_z,$$

e o somatório em k_z pode ser convertido numa integral:

$$\sum_{k_z} a\left(k_z\right) - \quad \frac{L_z}{2\pi}\int dk_z a\left(k_z\right).$$

Portanto, podemos reescrever a eq. (B.2) da seguinte forma

$$g\left(\mathcal{E}\right)=\frac{L_z}{2\pi}\sum_{n,\sigma_z}\int_{-}\ dk_z\delta\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m^*}\right). \tag{B.3}$$

Para calcularmos a integral acima iremos usar as seguintes propriedades da função delta:

$$\delta\left(x\right)=\delta\left(-x\right);\qquad\delta\left(ax\right)=\frac{1}{a}\delta\left(x\right);$$

$$\delta\left(x^2-a^2\right)=\frac{1}{2a}\left[\delta\left(x-a\right)+\delta\left(x+a\right)\right].$$

Das propriedades acima, encontramos que:

$$\delta\left(c^2x^2-a^2\right)=\frac{1}{2ac}\left[\delta\left(x-\frac{a}{c}\right)+\delta\left(x+\frac{a}{c}\right)\right].$$

Usando a relação acima obtemos que

$$\begin{aligned}\delta\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}-\frac{\hbar^2k_z^2}{2m}\right)=\frac{1}{2\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}}\Bigg[&\delta\left(k_z-\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}\right)\\&+\delta\left(k_z+\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}\right)\Bigg].\end{aligned} \tag{B.4}$$

Substituindo (B.4) em (B.3), temos

$$\begin{aligned}g\left(\mathcal{E}\right)=\frac{L_z}{2\pi}\sum_{n,\sigma_z}\frac{1}{2\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}}\int_{-}\ dk_z\Bigg\{&\delta\left(k_z-\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}\right)\\&+\delta\left(k_z+\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m}\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)}\right)\Bigg\}.\end{aligned} \tag{B.5}$$

Antes de realizarmos a integração acima, vamos analisar o integrando fazendo as seguintes considerações:

1. $\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)<0$: Se isso ocorrer o vetor de onda será um número imaginário puro, o que não pode ocorrer primeiro porque o argumento da função delta não pode ser um número imaginário e segundo porque se k_z for um número imaginário isso significa que teremos uma energia cinética negativa, o que é fisicamente inadmissível, portanto deve-se ter: $g\left(\mathcal{E}\right)=0$, se $\left(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}\right)<0$.

2. Se $(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{n,\sigma_z}) \geq 0$ temos que $g(\mathcal{E}) = \frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n,\sigma_z}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_{n,\sigma_z}}}$.

A densidade de estados pode ser escrita na seguinte forma

$$g(\mathcal{E}) = \frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{n,\sigma_z}\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E} - \mathcal{E}_{n,\sigma_z}}}\theta\left(\mathcal{E} - \mathcal{E}_n(k_x)\right). \tag{B.6}$$

Apêndice C

Cálculo do Número de Portadores

Agora que obtemos a densidade de estados do sistema, vamos determinar o número de elétrons na i-ésima sub-banda por unidade de comprimento. É necessário determinar o número de elétrons do sistema, pois ele é usado no cálculo do potencial de Hartree. A ocupação de cada sub-banda é dada por

$$n_n(\mathcal{E}_{n,\sigma_z}, E_f, T) = \int_{\mathcal{E}_{n,\sigma_z}} d\mathcal{E}\, g\left(\mathcal{E}\right) f\left(\mathcal{E}\right),$$

sendo $\mathcal{E}_{n,\sigma_z}$ a energia no fundo da sub-banda, E_f a energia de Fermi, T a temperatura, e $f\left(\mathcal{E}\right)$ a função distribuição de Fermi-Dirac. Substituindo (B.6) na equação acima obtemos

$$n_n(\mathcal{E}_{n,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z}\int_{\mathcal{E}_{n,\sigma_z}} \frac{(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z})^{-1/2}}{1+e^{\beta(\mathcal{E}-E_f)}}d\mathcal{E}, \tag{C.1}$$

sendo $\beta = 1/k_BT$. Para simplificar a notação define-se as novas variáveis,

$$x = \beta(\mathcal{E}-\mathcal{E}_{n,\sigma_z}) = \quad d\mathcal{E} = \frac{dx}{\beta} \tag{C.2}$$

e

$$\eta_{n,\sigma_z} = \eta = \beta(E_F - \mathcal{E}_{n,\sigma_z}). \tag{C.3}$$

Fazendo $x-\eta$ obtemos $\beta(\mathcal{E}-E_F)$. Substituindo as relações acima em (C.1), temos

$$n_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2mK_BT}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z}\int_0 \frac{x^{-1/2}}{1+e^{x-\eta}}dx. \tag{C.4}$$

Definindo a integral acima como

$$F_{-1/2}(\eta) = \int_0 \frac{x^{-1/2}}{1+e^{x-\eta}}dx.$$

Logo, o número de portadores por unidade de comprimento é

$$N_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{n_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T)}{L_z} = \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2mK_BT}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z} F_{-1/2}(\eta). \tag{C.5}$$

Agora analisaremos o caso em que $T = 0$ K. Para isso, altera-se o limite superior da integral (C.1) de para E_F. Pois a essa temperatura não existem elétrons acima do nível de Fermi.

$$n_n(\mathcal{E}_{n,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{L_z}{2\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z}\int_{\mathcal{E}_{n,\sigma_z}}^{E_F}(\mathcal{E} - \mathcal{E}_{n,\sigma_z})^{-1/2} f(\mathcal{E})d\mathcal{E} \tag{C.6}$$

a $T = 0$K a função de Fermi-Dirac tem os seguintes valores

$$f(\mathcal{E}) = \begin{cases} 0 & \text{se } \mathcal{E} > E_F, \\ 1 & \text{se } \mathcal{E} \leq E_F. \end{cases} \tag{C.7}$$

Logo a solução de (C.6) é

$$n_n(\mathcal{E}_{n,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{L_z}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z}(E_F - \mathcal{E}_{n,\sigma_z})^{1/2} \tag{C.8}$$

Portanto, o número de elétrons é

$$N_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{n_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T)}{L_z} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{2mK_BT}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z} F_{-1/2}(\eta) & \text{se } T = 0\text{K}, \\ \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\sum_{l,\sigma_z}(E_F - \mathcal{E}_{n,\sigma_z})^{1/2} & \text{se } T = 0\text{K}, \end{cases} \tag{C.9}$$

sendo a função $F_{-1/2}(\eta)$ uma integral tabelada, cujo resultado é

$$F_{-1/2}(\eta) = \left(\frac{\overline{2}}{2\sqrt{b + \eta + (\ \eta - b\ ^c + a^c)^{1/c}}} + \frac{e^{-\eta}}{\overline{\pi}}\right)$$

sendo

$$a = 1,69742452;$$

$$b = 1,495;$$

$$c = 2,828427125.$$

Em unidades adimensionais, o número de elétrons é

$$N_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T) = \frac{n_n(\mathcal{E}_{l,\sigma_z}, E_f, T)}{L_z} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi a_0^*}\sqrt{\frac{K_BT}{R_y^*}}\sum_{l,\sigma_z} F_{-1/2}(\eta) & \text{se } T = 0\text{K} \\ \frac{1}{\pi a_0^*}\sum_{l,\sigma_z}(\tilde{E}_F - \tilde{\mathcal{E}}_{n,\sigma_z})^{1/2} & \text{se } T = 0\text{K} \end{cases} \tag{C.10}$$

Apêndice D

Parâmetros para CdMnTe

Tabela D.1: Parâmetros para o $Cd_{1-x}Mn_xTe$

Parâmetro	Unidade	$Cd_{1-x}Mn_xTe$
E_g	eV	$1,606 + 1,592x$
E_p	eV	$18,5$
$\delta E_c/\delta E_v$	%	$70/30$
γ_1	–	$1,27 - 0,75x$
γ_2	–	$-0,31 + 0,04x$
γ_3	–	$-0,09 - 0,10x$
F	–	$0,515 - 0,002x$
N_1	–	$1,23 - 0,96x$
q	–	$0,05$
κ	–	$-0,65 + 0,96x$
a_0	Å	$6,487 - 0,148x$
$N_0\alpha$	eV	$0,22$
Δ	eV	$0,927$
g_c^*	–	$-0,74$
m_e^*	m_0	$0,103 + 0,067x$
m_{lh}^*	m_0	$0,12 + 0,14x$
m_{hh}^*	m_0	$0,53 + 0,41x$
$m_{hh}^{*[111]}$	m_0	$0,69 + 0,41x$
m_{so}^*	m_0	$0,28 - 0,13x$
C_{44}	$(10^{10}Pa)$	$1,99 - 0,33x$
d	eV	$-2,8$
ϵ	–	$9,3$

Apêndice E

Aproximação para o Operador $\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right)$

Para calcularmos a evolução temporal de uma dada função de onda devemos resolver a eq. (3.34):

$$\eta(\rho,\phi,t+\Delta t)=\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right)\xi(\rho,\phi,t+\Delta t). \tag{E.1}$$

Para que esta operação possa ser realizada, o operador contendo a energia cinética T

$$U=\exp\left(-\frac{i\Delta t}{\hbar}T\right)$$

dever ser unitário, ($U\ U=UU^{\dagger}=1$), preservando a norma, ou seja,

$$U\Psi\ U\Psi^{\dagger}=\left\langle U\ \Psi\right|\left.U\ \Psi\right\rangle=1. \tag{E.2}$$

Portanto, devemos buscar um operador unitário $U\ U=UU^{\dagger}=1$, que satisfaça a seguinte relação $U^{\dagger}=U^{-1}$, e um operador que satisfaça esta relação pode ser escrito como:

$$U=\frac{A}{A},\qquad \text{pois,}\qquad UU^{\dagger}=\frac{A}{A}\cdot\frac{A}{A}=1,\qquad \text{logo}\qquad U^{-1}=U$$

Seja H um operador hermitiano, então o operador $U=e^{iH}$ é unitário, pois, $U^{\dagger}=e^{-iH}$ e $U^{-1}=U^{\dagger}=e^{-iH}$. Para aplicarmos numericamente o operador $U=e^{iH}$ devemos expandi-lo em série de Taylor, truncando a expansão na ordem necessária.

$$U=e^{iH}=1+iH-\frac{1}{2}H^2-\frac{1}{6}iH^3+\frac{1}{24}H^4+O\left(H^5\right).$$

Podemos escolher habilmente um operador A de tal modo que o mesmo mantenha para o operador U a mesma ordem em H, obtida pela expansão em série de Taylor. Assim, uma esolha padrão deve ser do tipo:

Ordem	Operador
$1^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\alpha H$
$2^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\alpha H$
$3^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\alpha H - \beta H^2$
$4^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\alpha H - \beta H^2$

Agora devemos encontrar os valores das constantes α e β, que forneça um operador U correto em até terceira ordem de H. Assim

$$U = \frac{A}{A} = \frac{1 + i\alpha H - \beta H^2}{1 - i\alpha H - \beta H^2} + O\left(H^4\right) = \frac{1 + i\alpha H - \beta H^2}{1 - (i\alpha H + \beta H^2)} + O\left(H^4\right)$$

Usando a expansão $(1-x)^{-1} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + O\left(x^5\right)$ em série de Taylor, para o denominador da expressão anterior, e mantendo somente os termos da expansão em até terceira ordem em H, podemos reescrever a expressão anterior como,

$$\begin{aligned}
U &= \frac{1 + i\alpha H - \beta H^2}{1 - (i\alpha H + \beta H^2)} \\
&= \left(1 + i\alpha H - \beta H^2\right)\left[1 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right) + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)^2 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)^3\right] + O\left(H^4\right) \\
&= \left(1 + i\alpha H - \beta H^2\right)\left\{1 + i\alpha H + \beta H^2 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)^2\left[1 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)\right]\right\} + O\left(H^4\right) \\
&= \left(1 + i\alpha H - \beta H^2\right)\left[1 + i\alpha H + \beta H^2 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)^2\left(1 + i\alpha H + \beta H^2\right)\right] + O\left(H^4\right) \\
&= \left(1 + i\alpha H - \beta H^2\right)\left(1 + i\alpha H + \beta H^2\right)\left[1 + \left(i\alpha H + \beta H^2\right)^2\right] + O\left(H^4\right) \\
&= \left(1 + 2i\alpha H - \alpha^2 H^2\right)\left(1 - \alpha^2 H^2 + 2i\alpha H^3\beta\right) + O\left(H^4\right) \\
&= 1 + 2i\alpha H - 2\alpha^2 H^2 - i\left(2\alpha^3 - 2\alpha\beta\right)H^3 + O\left(H^4\right)
\end{aligned}$$

Portanto, o operador U correto em até termos de $O\left(H^4\right)$ é dado por

$$U = 1 + 2i\alpha H - 2\alpha^2 H^2 - i\left(2\alpha^3 - 2\alpha\beta\right)H^3 + O\left(H^4\right)$$

Comparando cada termo da expressão acima, com a expansão em série de Taylor do operador

$U = e^{iH}$ encontra-se que:

$$\begin{aligned} 2\alpha &= 1 & \alpha &= \frac{1}{2} \\ 2\alpha^2 &= \frac{1}{2} & \alpha &= \pm\frac{1}{2} \\ 2\alpha^3 - 2\alpha\beta &= \frac{1}{6} & \alpha &= \frac{1}{2}; \quad \beta = \frac{1}{12} \end{aligned}$$

Portanto, o operador

$$A = 1 + i\frac{1}{2}H - \frac{1}{12}H^2$$

e

$$U = \frac{1 + i\frac{1}{2}H - \frac{1}{12}H^2}{1 - i\frac{1}{2}H - \frac{1}{12}H^2}$$

O operador A pode ser escrito, nas diversas ordens como:

Ordem	Operador
$1^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\frac{1}{2}H$
$2^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\frac{1}{2}H$
$3^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\frac{1}{2}H - \frac{1}{12}\beta H^2$
$4^{\underline{a}}$	$A = 1 + i\frac{1}{2}H - \frac{1}{12}H^2$

$$U = \exp\left(-i\frac{\Delta t}{\hbar}\frac{P_i^2}{2m}\right) = \exp\left(-i\frac{T_i}{\hbar}\Delta t\right) = \exp\ (\kappa_i \Delta t)$$

Lenvando em conta somente os termos da ordem de Δt^2, o operador $U = \exp\ (\kappa_i \Delta t)$, pode ser escrito como:

$$U = \exp\ (\kappa_i \Delta t) = \left(1 - \frac{\kappa_i \Delta t}{2}\right)^{-1} \cdot \left(1 + \frac{\kappa_i \Delta t}{2}\right) + O(\Delta t^3),$$

desta forma ele continua sendo unitário.

Apêndice F

Evolução da Função de Onda em Tempo Imaginário

Agora vamos mostrar que uma função de onda qualquer evolui para o estado fundamental de um sistema descrito por um hamiltoniano H independente do tempo, quando a propagação é feita no domínio e tempos imaginários.

Considere que os autoestados do hamiltoniano sejam ϕ_n com autovalores ε_n, tal que, $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 < \cdots < \varepsilon_n$. Assim, uma função de onda qualquer $\Psi(t)$ pode ser expandida na base desse Hamiltoniano, sendo dada por:

$$\Psi(t) \ = \sum_n a_n \exp\left(-i\frac{\varepsilon_n t}{\hbar}\right) \ \phi_n \ . \tag{F.1}$$

Fazendo a seguinte substituição, t por $-i\tau$, temos que:

$$\Psi(\tau) \ = \sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \ \phi_n \ . \tag{F.2}$$

A norma da equação acima é:

$$\Psi(t) \ \ \Psi(t) \ = \int \ \Psi(\vec{r},\tau)\ ^2 d^3r = \sum_n \ a_n\ ^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right) \equiv \frac{1}{N^2}, \tag{F.3}$$

logo, a função de onda não permanece normalizada, tendo um decaimento exponencial, ou seja, a função de onda depende de τ. Normalizando a função de onda temos:

$$\Psi(\tau)^{\,norm} = \frac{\sum_n a_n \exp\left(-\frac{\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)\ \phi_n}{\sqrt{\sum_n\ a_n\ ^2 \exp\left(-\frac{2\varepsilon_n \tau}{\hbar}\right)}}. \tag{F.4}$$

Abrindo a soma acima e colocando o prineiro termo dela em evidência obtemos

$$\Psi(\tau)^{\,norm} = \frac{\phi_0\ + \sum_{i>0} \frac{a_i}{a_0} \exp\left(\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)\ \phi_i}{\sqrt{1 + \sum_{i>0}\ \frac{a_i}{a_0}\ ^2 \exp\left(\frac{(\varepsilon_0 - \varepsilon_i)\tau}{\hbar}\right)}}, \tag{F.5}$$

logo o limite de τ tendendo a infinito é

$$\lim_{\tau}\ \ \Psi(\tau)^{\,norm} = \ \phi_0\ . \tag{F.6}$$

Uma vez obtido o estado fundamental, pode-se encontrar os outros auto-estados utilizando a ortonormalização de Gram-Schmidt. Por exemplo, o primeiro estado excitado é obtido impondo que ele seja ortonormal ao estado fundamental em todos os instantes τ, isto é,

$$\begin{aligned} \Psi_1(\tau)\ &=\ \varphi_1(\tau)\ -\ \Psi_0(\tau)\,\varphi_1(\tau)\ \ \Psi_0(\tau) \\ &= \sum_n\ b_n\, e^{-\varepsilon_n \tau/\hbar}\ \ \phi_n\ . \end{aligned} \tag{F.7}$$

Normalizando $\Psi_1(\tau)$, obtemos

$$\Psi_1(\tau)^{\,norm} = \frac{\sum_{n>0}\ b_n\, e^{-\varepsilon_n \tau/\hbar}\ \ \phi_n}{\sqrt{\sum_{n>0}\ \ b_n\ ^2\, e^{-2\varepsilon_n \tau/\hbar}}}. \tag{F.8}$$

Repetindo o procedimento anterior, conforme a eq.(F.5), encontramos,

$$\lim_{\tau}\ \ \Psi_1(\tau)\ \ =\ \phi_1\ . \tag{F.9}$$

Esse processo é repetido em ordem crescente de energia para todas as auto-funções.

Bibliografia

[1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. Von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, e D. M. Treger. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future. Science, **294**, 1488, 2001.

[2] D. D. Awschalom e M. E. Flatté. Challenges for semiconductor spintronics. Nature Physics, **3**, 153–159, 2007.

[3] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, e D. D. Awschalom. Observation of the Spin Hall Effect in Semiconductors. Science, **304**, 1910, 2004.

[4] W. P. McCray. MBE deserves a place in the history books. Nature Nanotechnology, **2**, 259, 2007.

[5] T. Dieti, D. D. Awschalom, M. Kaminska, e H. Ohno. Spintronics and Semimetals. Elsevier, 2008.

[6] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, e J. Chazelas. Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. Phys. Rev. Lett., **61**, 2472, 1988.

[7] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, e W. Zinn. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. Phys. Rev. B, **39**, 4828, 1989.

[8] W. P. McCray. How spintronics went from the lab to the iPod. Nature Nanotechology, **4**, 2, 2009.

[9] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, e T. Enoki. Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ Heterostructure. Phys. Rev. Lett, **78**, 1335, 1997.

[10] S. Datta e B. Das. Eletronic analog of the electro-optic modulator. Appl. Phys. Lett., **56**, 665, 1990.

[11] Hyun Cheol Koo, Jae Hyun Kwon, Jonghwa Eom, Joonyeon Chang, Suk Hee Han, e Mark Johnson. Control of Spin Precession in a Spin-Injected Field Effect Transistor. Science, **325**, 1515, 2009.

[12] D. Chiba, M. Sawicki, Y. Nishitani, Y. Nakatani, F. Matsukura, e H. Ohno. Magnetization vector manipulation by electric fields. Nature, **455**, 515, 2008.

[13] J. K. Furdyna. Diluted magnetic semiconductors. J. Appl. Phys., **64**, R29, 1988.

[14] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, e D. Ferrand. Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors. Science, **287**, 1019, 2000.

[15] M. Goryca, D. Ferrand, P. Kossacki, M. Nawrocki, W. Pacuski, W. Maślana, J. A. Gaj, S. Tatarenko, J. Cibert, T. Wojtowicz, e G. Karczewski. Magnetization Dynamics Down to a Zero Field in Dilute (Cd,Mn)Te QuantumWells. Phys. Rev. Lett., **102**, 046408, 2009.

[16] C. Gould, A. Slobodskyy, D. Supp, T. Slobodskyy, P. Grabs, P. Hawrylak, F. Qu, G. Schmidt, e L.W. Molenkamp. Remanent Zero Field Spin Splitting of Self-Assembled Quantum Dots in a Paramagnetic Host. Phys. Rev. Lett., **97**, 017202, 2006.

[17] R. M. Abolfath, P. Hawrylak, e I. Zutić. Tailoring Magnetism in Quantum Dots. Phys. Rev. Lett., **98**, 207203, 2007.

[18] W. Zaleszczyk, E. Janik, A. Presz, P. Dtuźewski, S. Kret, W. Szuszkiewicz, J. F. Morhange, E. Dynowska, H. Kirmse, W. Neumann, A. Petroutchik, L. T. Baczewski, G. Karczewski, e T. Wojtowicz. $Zn_{1-x}Mn_xTe$ Diluted Magnetic Semiconductor Nanowires Grown by Molecular Beam Epitaxy. Nano Lett., **8**, 4061, 2008.

[19] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, e C. T. Foxon. Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. Phys. Rev. Lett, **60**, 848, 1988.

[20] D A Wharam, T J Thornton, R Newbury, M Pepper, H Ahmed, J E F Frost, D G Hasko, D C Peacock, D A Ritchie, e G A C Jones. One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance. J. Phsy. C, **21**, L209, 1988.

[21] I. A. Shelykh, M. Rosenau da Costa, e A. C. Seridonio. Fractional quantization of ballistic conductance in 1D electron and hole systems. J. Phys.: Condens. Matter, **20**, 164214, 2008.

[22] T. P. Martin, A. Szorkovszky, A. P. Micolich, A. R. Hamilton, C. A. Marlow, R. P. Taylor, H. Linke, e H. Q. Xu. Field-orientation dependence of the Zeeman spin splitting in (In,Ga)As quantum point contacts. Phys. Rev. B, **81**, 041303(R), 2010.

[23] K. J. Thomas, J. T. Nicholls, M. Y. Simmons, M. Pepper, D. R. Mace, e D. A. Ritchie. Possible Spin Polarization in a One-Dimensional Electron Gas. Phys. Rev. Lett., **77**, 135, 1996.

[24] A. A. Starikov, I. I. Yakimenko, e K. F. Berggren. Scenario for the 0.7-conductance anomaly in quantum point contacts. Phys. Rev. B, **67**, 235319, 2003.

[25] G. A. Fiete. Colloquium: The spin-incoherent Luttinger liquid. Rev. Mod. Phys., **79**, 801, 2007.

[26] Supriyo Datta. Eletronic Transport in Mesoscopic Systems. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 1995.

[27] J. D. M. Vianna, A. Fazzio, e S. Canuto. Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional. Editora da Livraria da Física, 2004.

[28] P. Hohenberg e W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. Phys. Rev., **136**, 864, 1964.

[29] W. Kohn e L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. Phys. Rev., **140**, 1133, 1965.

[30] J. A. Gaj, R. Planel, e F. Fishman. Relation of magneto-optical properties of free excitons to spin alignment of Mn^{2+} ions in $Cd_{1-x}Mn_xTe$. Solid State Commun., **29**, 435, 1979.

[31] J. A. Gaj, W. Grieshaber, C. Bodin-Deshayes, J. Cibert, G. Feuillet, Y. Merle d'Aubigné, e A. Wasiela. Magneto-Optical study of interface mixing in the CdTe-(Cd,Mn)Te system. Phys. Rev. B, **50**, 5512, 1994.

[32] W. Grieshaber, A. Haury, J. Cibert, Y. Merle d'Aubigné, e A. Wasiela. Magneto-optic study of the interface in semimagnetic semiconductor heterostructures: Intrinsic effect and interface profile in CdTe-$Cd_{1-x}Mn_xTe$. Phys. Rev. B, **53**, 4891, 1996.

[33] P. Kossacki, H. Boukari, M. Bertolini, D. Ferrand, J. Cibert, S. Tatarenko, J. A. Gaj, B. Deveaud, V. Ciulin, e M. Potemski. Photoluminescence of p-doped quantum wells with strong spin splitting. Phys. Rev. B, **70**, 195337, 2004.

[34] D. K. Ferry e S. M. Goodnick. Transport in Nanostructures. Cambridge Studies in Semiconductor Physics and Microelectronic Engineering. Cambridge University Press, 2000.

[35] X. Aymerich-Humet, F. Serra-Mestres, e J. Millán. A generalized approximation of the Fermi-Dirac Integrals. J. Appl. Phys., **4**, 2850, 1983.

[36] M. Goano. Series expansion of the Fermi-Dirac Integral $F_j(x)$ over the entire domain of real j and x. Solid-State Electronics, **36**, 217, 1993.

[37] H. S. Vosko, L. Wilk, e M. Nusair. Acurrate spin-dependent electron liquid correlation energies for local spin density calculations: a critical analysis. Can. J. Phys., **58**, 1200–1211, 1980.

[38] Philip L. Taylor e Olle Heinonen. A Quantum Approach to Condensed Matter Physics. CambridgeUniversity Press, 2002.

[39] D. Kosloff e R. Kosloff. A Fourier method solution for the time dependent Schrödinger equation as a tool in molecular dynamics. J. Phys. Chem., **52**, 35, 1983.

[40] R. Kosloff. Time-dependent quantum-mechanical methods for molecular dynamics. J. Phys. Chem., **92**, 2087, 1988.

[41] M. H. Degani e J. P. Leburton. Single-electron states and conductance in lateral-surface superlattices. Phys. Rev. B, **44**, 10901, 1991.

[42] M. H. Degani. Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices. Appl. Phys. Lett., **59**, 57, 1991.

[43] M. H. Degani. Electron energy levels in a δ-doped layers in GaAs. Phys. Rev. B, **44**, 5580, 1991.

[44] M. H. Degani. Electronic properties of multiple Si δ-doping in GaAs. J. Appl. Phys., **70**, 4362, 1991.

[45] P. L. DeVries. A First Course in Computational Physics. Wiley, New York, 1993.

[46] M. Büttiker. Quantized transmission of a saddle-point constriction. Phsy.Rev. B, **41**, 7906, 1990.

[47] J. P. Perdew e Mel Levy. Extrema of the functional for the energy: Excited states form ground-state theory. Phys. Rev. B, **31**, 6264, 1985.

[48] Filipe Sammarco. Magnetocondutância de fios quânticos interagentes. Dissertação de Mestrado, Instituto de Física de São Carlos - USP, 2009.