

# Cálculo da Estrutura Eletrônica de Super-redes de Spin

MENDES, Milrian da Silva<sup>1</sup> ; SOUZA, Márcio A. R.<sup>2</sup>

Palavras-Chaves: Semicondutores; Super-redes; Magnéticos

## 1 Introdução

Heteroestruturas semicondutoras obtidas pela junção de diferentes materiais têm sido intensamente investigadas devido às suas propriedades únicas que não são observadas em meios homogêneos. Foi possível criar artificialmente estruturas como os poços quânticos, fios quânticos, pontos quânticos e as super-redes, tendo um grande impacto tecnológico, com aplicações no desenvolvimento de novos dispositivos ópticos e eletrônicos. Heteroestruturas formadas por semicondutores do grupo II-VI têm sido bastante investigadas. Esses materiais apresentam gaps de energia que cobrem um intervalo extenso do espectro eletromagnético: do azul (o gap para o ZnS é de aproximadamente 3,8 eV) até o infravermelho distante. No domínio da pesquisa fundamental estes compostos abriram um novo campo de pesquisa, principalmente devido às suas propriedades magnéticas quando impurezas magnéticas, tais como  $Mn^{+2}$  e  $Fe^{+2}$ , são adicionadas aos compostos binários. Esses compostos são conhecidos como semicondutores magnéticos diluídos ou semicondutores semimagnéticos[1, 2].

O uso de materiais magnéticos do tipo  $A_{1-x}^{II}Mn_xB^{VI}$  são de grande interesse uma vez que sua natureza ternária permite ajustar os parâmetros de rede ao variar sua composição. O manganês é um metal de transição com elétrons de valência na camada 4s; possui camada 3d semipreenchida e pode substituir elementos do grupo II nas estruturas tetraédricas  $A^{II}B^{VI}$ , possuindo assim a mesma estrutura cristalina desta liga, conferindo um alto efeito de eletroluminescência, sendo importantes então na aplicação em estruturas ópticas. O efeito do orbital 3d é originar dois níveis de energia na estrutura de banda,  $e^{+\sigma}$  e  $e^{-\sigma}$  (hibridização do orbital). Nesses sistemas a interação de troca entre os íons magnéticos localizados e os portadores das bandas de condução e valência produz um efeito Zeeman extremamente grande quando comparado com os semicondutores convencionais [3, 4] Nas super-redes semicondutoras semimagnéticas, estes efeitos são evidenciados pela degenerescência do spin em sua célula unitária.

## 2 Metodologia

No estudo das superredes semicondutoras, calculamos sua relação de dispersão, aplicando o modelo de Kronig-Penney para o potencial periódico unidimensional (aproximação por poços retangulares). Os resultados são obtidos numericamente utilizando

---

<sup>1</sup>Bolsista de iniciação científica. Instituto de Física - Grupo de Semicondutores, milrian@hotmail.com

<sup>2</sup>Orientador/Instituto de Física/UFG, marcio@if.ufg.br

o método *split-operator*, que consiste em calcular a evolução temporal da função de onda que descreve o sistema, em tempo real e imaginário, obtendo no últimos caso, os auto-estados do sistema.

Com a aplicação do campo magnético em super-redes de semicondutores magnéticos diluídos, utilizamos o modelo de Gaj que propõe um modelo baseado na semelhança entre a magnetização observada experimentalmente e a função de Brillouin que descreve a magnetização no caso de momentos magnéticos não interagentes. Neste modelo, a componente da média térmica dos spins de Mn na direção do campo aplicado é descrita pela função de Brillouin ajustando o valor de saturação e introduzindo uma temperatura efetiva devida à média térmica dos operadores de spin. O hamiltoniano do sistema é então descrito por:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{x}) + \mathbf{H}_{ex} \quad \text{onde} \quad H_{ex} = \sum_{\vec{R}_i} J(\vec{r} - \vec{R}_i) \vec{S}_i \cdot \vec{\sigma}$$

onde no hamiltoniano de troca  $H_{ex}$ ,  $\vec{S}_i$  é o operador de spin do íon magnético localizado no sítio  $\vec{R}_i$  ( $S_i = 5/2$ ),  $\vec{\sigma}$  é o operador de spin dos portadores e  $J(\vec{r} - \vec{R}_i)$  é a integral de troca e o termo  $\frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{x})$ , descreve o potencial da superrede.

### 3 Resultados e Discussão

Estudamos o efeito do campo magnético em superredes semicondutoras semimagnéticas do tipo  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ . Com a aplicação de campo magnético na direção de crescimento da superrede semimagnética, variamos parâmetros tais como temperatura, o próprio campo, concentração de Mn e largura da barreira e do poço, deixando a profundidade do poço em função da concentração de manganês. Calculamos, numericamente, os níveis de energia, as auto-funções e a forma do potencial para campos variando de 0 à  $10T$ , concentrações no poço e/ou barreira de até 25% e largura do poço dentro dos limites da célula unitária de  $100\text{\AA}$ . A profundidade do poço é deixada como função da concentração. Na figura abaixo, mostramos um resultado para  $T = 0K$ , poço de  $40\text{\AA}$ , dopagem na barreira de 15% e no poço de 10% e campo de  $10T$ , onde é evidente a degenerescência dos spins. A função de onda nos mostra que o estado de spin up (linha contínua), está mais confinado que o spin down (pontilhado), verificado também na relação de dispersão. Quando aumentamos a temperatura, verificou-se que a degenerescência dos spins não é

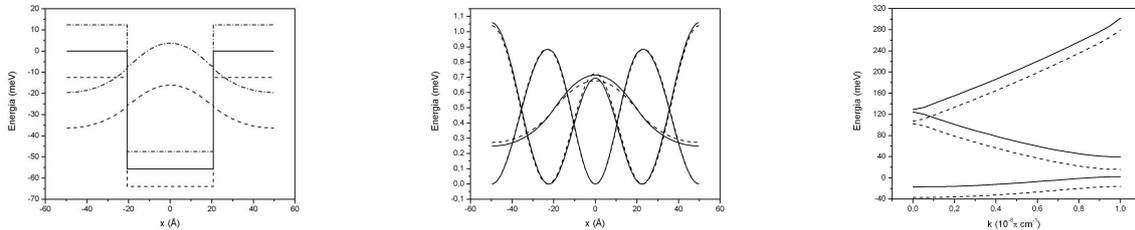


Figura 1: Perfil de potencial evidenciando o primeiro estado confinado, funções de onda para spin up e down e sua respectiva relação de dispersão

tão acentuada quanto para temperaturas em torno de  $0K$ . Para dopagem apenas na barreira e campos intermediários (5-7T), verificou-se que o segundo estado fica parcialmente

confinado, e quanto maior a largura do poço para este sistema, menos o segundo estado se confinava.

## 4 Conclusão

Aplicando o campo magnético na direção de crescimento da super-rede, verificamos que quanto maior a temperatura, menor a influência do campo para os spins. A variação da largura do poço também influencia no confinamento dos estados quânticos do sistema, uma vez que para poços largura aproximadamente igual à da barreira, consegue-se confinar dois estados para campos da ordem de  $10T$  e  $T = 300$ , embora a degenerescência do spin não seja tão evidente. Nos casos limites em que o campo vai à zero, a estrutura se reduz à de uma superrede semicondutora o que vem à corroborar com os resultados da literatura.

## Referências

- [1] J. K. Furdyna. Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., **64**, R29–R64, 1988.
- [2] W. Girit; J. K. Furdyna. Crystal Structure, Composition, and Materials Preparation of Diluted Magnetic Semiconductors. R. K. Willardson; A. C. Beer, editores, Diluted Magnetic Semiconductors, volume 25 de *Semiconductors and Semimetals*, página 1, New York, 1988. Academic Press.
- [3] G. Bastard; C. Riaux; Y. Guldner; J. Mycielski; A. Mycielski. Effect of Exchange on Interband Magneto-Absorption in Zero Gap  $Hg_{1-k}Mn_kTe$  Mixed Crystals. J. Physique, **39**, 87–98, 1978.
- [4] J. A. Gaj; J. Ginter; R. R. Galazka. Exchange Interaction of Manganese  $3d^5$  States with Band Electrons in  $Cd_{1-x}Mn_xTe$ . Phys. Stat. Sol. (b), **89**, 655–662, 1978.