

# 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 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].

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. Uma propriedade inerente das heteroestruturas construídas a partir desses materiais é que elas contém camadas tensionadas, com o parâmetro de rede fortemente dependente da concentração do íon magnético que modifica as discontinuidades das bandas nas interfaces. 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. Nas super-redes semicondutoras semimagnéticas, estes efeitos são evidenciados pela degenerescência do spin em sua célula unitária.

## 2 Metodologia

No estudo das super-redes 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 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.

---

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

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

Com a aplicação do campo magnético em super-redes de semicondutores magnéticos diluídos, utilizamos o modelo de Gaj que é 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 super-rede.

No sistema estudado,  $\text{Zn}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Se}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}/\text{Zn}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Se}$ , o parâmetro de rede  $a$  (em Å) das camadas variam com a concentração  $x$  (ou  $y$ ) tal que  $a = 5,6674 + 0,2375x$ . Como substrato, utilizamos arseneto de gálio, GaAs (parâmetro de rede 5,65325 Å), que possui uma diferença da ordem de  $10^{-2}$  em relação ao seleneto de zinco manganês. Para o cálculo da densidade de estados, as superfícies de energia constante podem ser escritas em coordenadas cilíndricas, no espaço recíproco. Ao escrevermos sua energia, bem como a diferencial de superfície, levamos em conta o fato de obtermos numericamente a energia em função do vetor de onda na direção  $k_z$ . Assim, a densidade de estados de uma super-rede que depende da interação dos poços acoplados em um potencial periódico é calculada como  $g(E) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2} k_z(E)$ .

### 3 Resultados e Discussão

Estudamos o efeito do campo magnético em superredes semicondutoras semimagnéticas do tipo  $\text{Zn}_{1-y}\text{Mn}_y\text{Se}/\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$  considerando a temperatura constante, 2,2 K, devido à curva de energia de gap pela concentração de manganês utilizada [2]. Com a aplicação de campo magnético na direção de crescimento da super-rede semimagnética, variamos parâmetros tais como temperatura, o próprio campo, concentração de Mn e largura da barreira e do poço, deixando a profundidade do poço e o parâmetro de rede em função da concentração de manganês. Calculamos, numericamente, os níveis de energia, as auto-funções, densidade de estados e a forma do potencial para campos variando de 0 à 10T, concentrações no poço e/ou barreira de até 10% e largura do poço dentro dos limites da célula unitária de 200 Å. Na figura abaixo, temos uma configuração com concentração de 4% nas camadas com 120 Å e 1% naquelas de largura 80 Å;  $B = 3\text{T}$  e submetido ao substrato de GaAs.

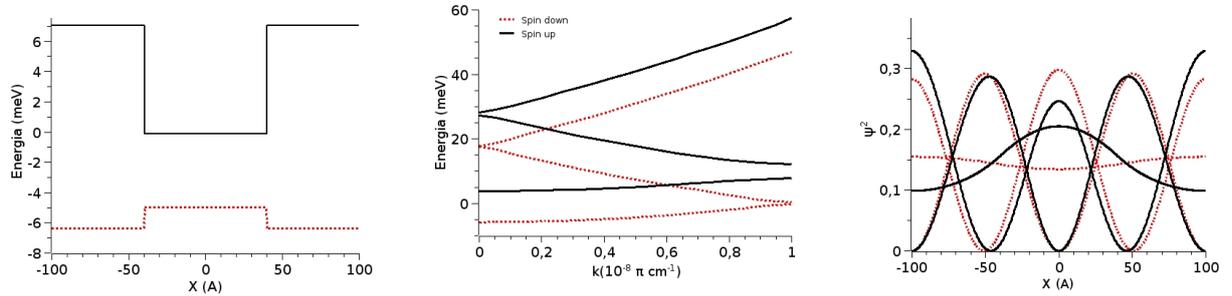


Figura 1: Perfil de potencial evidenciando estados de spin down praticamente livres, densidade de estados e funções de onda para spin up e down.

Na figura abaixo, mostramos o caso limite quando concentração e campo vão à zero (relação de dispersão parabólica) e o efeito da concentração de Mn em uma camada, fazendo surgir uma banda proibida de energia.

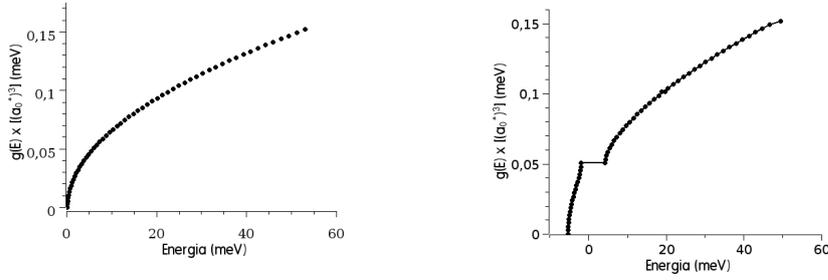


Figura 2: Densidade de estados para concentração nula e para concentrações de 6% na barreira (100 Å) e 1% no poço (100 Å);  $B = 0T$ .

## 4 Conclusão

Para a concentração de aproximadamente  $x = 4,3\%$  em uma camada e zero em outra, verificamos que o band offset da banda de condução é aproximadamente zero, como verificado na literatura [3, 4] para campo zero. Em torno desse valor de concentração, obtemos para campo  $B = 2T$ , a transição em que um o primeiro estado do portador está totalmente livre, e o outro portador, confinado, sem efeitos de tensão na heteroestrutura. Nos casos limites em que o campo vai à zero, a estrutura se reduz à de uma super-rede semicondutora o que vem à corroborar com os resultados da literatura.

Quando a diferença de concentrações entre as camadas estão entre 0 e 4%, verificamos que os portadores com spins diferentes se confinam em camadas diferentes, como visto nos gráficos da figura (1). Isso se deve principalmente à forma da curva característica da energia de gap pela concentração para o  $Zn_{1-x}Mn_xSe$  [2], que neste intervalo de concentrações, pode aumentar ou diminuir a energia de gap.

O efeito da tensão sobre as propriedades eletrônicas da superrede pode ser verificado pelos gráficos mostrados em (2). O potencial, na banda de condução, aumenta de aproximadamente 0.5 meV quando aplicada a tensão (que surge devido à presença de Mn, no segundo caso, que muda o parâmetro de rede), em relação ao primeiro gráfico, em que não tensionamos a amostra. Isto se deve ao fato de que o substrato utilizado, tem um parâmetro de rede menor ou igual à do sistema como um todo. O efeito de confinamento no segundo gráfico em (2), deve-se principalmente à diferença de concentração de Mn nas diferentes camadas, refletindo uma profundidade de 9meV em relação ao caso do bulk de ZnSe.

Foram estudadas então apenas propriedades dos elétrons na banda de condução. Interações entre elétrons e buracos da banda de valência podem ser considerados em outras configurações, para o estudo de transições entre bandas e propriedades de fotoluminescência utilizando os resultados já calculadas como densidade de estados e funções de onda.

## Referências

- [1] J. K. Furdyna. Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., **64**, R29, 1988.
- [2] Alizera Saffarzadeh. The effects of Mn concentration on spin-polarized transport through ZnSe/ZnMnSe/ZnSe heterostructures. Cond-mat, **1**, 2006.
- [3] J. K. Furdyna. Diluted Magnetic Semiconductors. J. Appl. Phys., **64**, R29–R64, 1988.
- [4] D. Yoder-Short R.b. Bylsma, E. M. Becker. Dependence of energy gap on  $x$  and  $T$  in  $Zn_{1-x}Mn_xSe$ : The role of exchange interaction. Physical Review B, **33**, 1986.