

Lucas Rangel Thomas

**Transições de fase metal-isolante em um fio
quântico submetido a uma interação spin-órbita
e a um potencial químico modulados.**

Brasília

8 de setembro de 2015

Lucas Rangel Thomas

Transições de fase metal-isolante em um fio quântico submetido a uma interação spin-órbita e a um potencial químico modulados.

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciência de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais da Faculdade UnB Planaltina da Universidade de Brasília.

Universidade de Brasília

Faculdade UnB Planaltina

Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais

Orientador: Mariana Malard

Coorientador: Paulo Eduardo de Brito

Brasília

8 de setembro de 2015

Lucas Rangel Thomas

Transições de fase metal-isolante em um fio quântico submetido a uma interação spin-órbita e a um potencial químico modulados./ Lucas Rangel Thomas. – Brasília, 8 de setembro de 2015-
77 p. : il.) ; 30 cm.

Orientador: Mariana Malard

Dissertação (mestrado) – Universidade de Brasília

Faculdade UnB Planaltina

Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais , 8 de setembro de 2015.

1. Transições de fase. 2. Spin-órbita. 3. Fio Quântico. 4. Rashba. 5. Borboleta de Hofstadter I. Mariana Malard. II. Universidade de Brasília. III. Faculdade UnB Planaltina. IV. Transições de fase metal-isolante em um fio quântico submetido a uma interação spin-órbita e a um potencial químico modulados.

CDU 02:141:005.7

Lucas Rangel Thomas

Transições de fase metal-isolante em um fio quântico submetido a uma interação spin-órbita e a um potencial químico modulados.

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Ciência de Materiais pelo Programa de Pós-Graduação em Ciência de Materiais da Faculdade UnB Planaltina da Universidade de Brasília.

Trabalho aprovado. Brasília, 8 de setembro de 2015:

Profa. Dra. Mariana Malard
FUP/UnB

Prof. Dr. Hugo Nicolas Nazareno
CIFMC/UnB

Prof. Dr. Marco Aurélio Alves Barbosa
FUP/UnB

Brasília
8 de setembro de 2015

*Dedico este trabalho à minha família,
amigos e orientadores por todo apoio ao longo
desta jornada.*

Agradecimentos

Ao meu pai José Altair pela compreensão e apoio incondicional em todas as minhas escolhas.

À minha querida orientadora Dra. Mariana Malard pelas incontáveis horas de dedicação, compreensão e apoio. Pelos inúmeros conselhos que levarei comigo para a vida. Um exemplo de profissional, apaixonada e dedicada pelo que faz.

Ao meu coorientador Prof. Dr. Paulo Eduardo de Brito pela paciência e dedicação em todas as reuniões e colaborações para que este trabalho fosse possível.

À Coordenação do Curso de Mestrado Ciência de Materiais, Prof. Dr. Alex Fabiano e Profa. Dra. Renata Aquino.

Aos professores do curso de Ciência de Materiais que contribuíram para minha formação.

À CAPES pelo apoio financeiro.

“Tenho a impressão de ter sido uma criança brincando à beira-mar divertindo-me em descobrir uma pedrinha mais lisa ou uma concha mais bonita que as outras, enquanto o imenso oceano da verdade continua misterioso diante de meus olhos”.

Isaac Newton (1642–1727)

Resumo

O objetivo deste trabalho é estudar as transições de fase metal-isolante geradas pela interação spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados por um campo elétrico externo aplicado a um fio quântico. Utilizamos de métodos numéricos de diagonalização de matrizes para obter as autoenergias e autoestados que descrevem o sistema. Analisando o espectro de energias, observamos o aparecimento de gaps estruturais nas fronteiras das zonas de Brillouin reduzidas do sistema. Através do controle do preenchimento da rede, é possível promover transições de fase metal-isolante percorrendo as bandas de energia e, com isso, produzir uma chave de corrente baseada no grau de liberdade de spin dos elétrons. A análise dos autoestados mostrou a presença de ondas de densidade de carga e a inversão de spin, consistentes com a fenomenologia inferida a partir do estudo das autoenergias. A investigação do efeito do número de onda da modulação externa sobre o espectro de energias revelou a formação de padrões fractais conhecidos como borboletas de Hofstadter. Realizamos um estudo de caso com dados experimentais para um fio formado em um poço quântico de InAs a fim de verificar a viabilidade prática do dispositivo proposto.

Palavras-chaves: Transição de fase. Fios Quânticos. Spin-órbita. Rashba. Borboleta de Hofstadter.

Abstract

The goal of the present work is to study the metal-insulator phase transition in a quantum wire driven by a Rashba spin-orbit interaction and a chemical potential, when both are modulated by an external electric array. We use numerical methods to diagonalize the Hamiltonian matrix in order to obtain the eigenenergies and eigenvalues of our system. From analyzing the energy spectrum we observe that multiple structural gaps arise at the borders of the system's reduced Brillouin zones. Through an external control of the band filling, the system can be carried along the energy bands, undergoing a metal-insulator phase transition across the gaps. Since this transition relies on the presence of the Rashba spin-orbit interaction, it can be viewed as a current switch based on the electron spin degree of freedom. The analysis of the eigenstates reveals charge density waves and spin flip, in agreement with the phenomenology inferred from the spectrum. An investigation of the effect of the external modulation wave number on the eigenenergies spectrum uncovers fractal patterns known as Hofstadter butterflies. We present a case study with experimental data for a wire structured in an InAs quantum well in order to verify the practical viability of the proposed device.

Keywords: Phase transition. Quantum wire. spin-orbit. Rashba. Hofstadter butterfly.

Sumário

	Introdução	10
1	TEORIA GERAL DE 2ª QUANTIZAÇÃO	12
1.1	Partículas livres	12
1.2	Partículas em um potencial cristalino	16
1.3	Interação partícula-partícula	19
1.4	Hamiltoniano total	23
1.5	Hamiltoniano total no espaço das posições	23
1.6	Teoria geral da interação spin-órbita	27
1.6.1	Abordagem semi-clássica	28
1.6.2	Abordagem de 2ª quantização	31
2	MODELO TEÓRICO DE UM TRANSISTOR DE SPIN	32
2.1	Descrição do modelo	32
2.2	Tratamento analítico	37
2.2.1	Mudança de base no espaço de spin	37
2.2.2	Solução exata do hamiltoniano de elétrons não interagentes e sem modulação	44
2.3	Tratamento computacional	46
3	RESULTADOS	50
3.1	Análise das autoenergias - Estrutura de bandas	50
3.1.1	Hamiltoniano de elétrons livres	50
3.1.2	Hamiltoniano de spin-órbita uniforme	52
3.1.3	Hamiltoniano modulado - transição de fase metal-isolante	53
3.1.4	Dependência do gap dos parâmetros modulados	59
3.1.5	Borboletas de Hofstadter	63
3.2	Análise dos autoestados - Ondas de densidade de carga	67
3.3	Estudo de Caso	71
	Conclusão	73
	Referências	75

Introdução

A partir da invenção do transistor em 1947 pelos físicos John Bardeen, Warden Brattain e William Shockley [1], houve praticamente uma reinvenção da eletrônica, possibilitando a construção de componentes cada vez menores e mais eficientes. A invenção do transistor marca o nascimento da microeletrônica.

O transistor é um dispositivo semicondutor usado para amplificar e mudar sinais eletrônicos e corrente elétrica, sendo o componente básico dos equipamentos eletrônicos modernos. As múltiplas funções do transistor são, essencialmente, controladas pela carga elétrica dos elétrons que participam dos processos no dispositivo.

O próximo avanço científico nessa área seria o controle do transporte não somente da carga do elétron, mas também da sua outra propriedade intrínseca - o spin - abrindo possibilidades para o desenvolvimento de um transistor de spin. O transistor de spin acarretaria incríveis impactos tecnológicos e econômicos, proporcionando melhorias no armazenamento e processamento de informações digitais, gravação e leituras magnéticas e, possivelmente, também em computação quântica [2].

O marco inicial dessa tecnologia emergente batizada de spintrônica é o trabalho teórico dos físicos Supriyo Datta e Biswajit Das [3]. Neste trabalho os autores propõem um modelo onde elétrons com spin polarizados são injetados a partir de um emissor ferromagnético dentro de um fio quântico e recebidos em um coletor também ferromagnético. O fio quântico está inserido no poço quântico de uma heteroestrutura semicondutora e está sujeito à uma voltagem externa.

A interação spin-órbita de Rashba [4,5], intrínseca à essa estrutura semicondutora causa a troca de spin dos elétrons de acordo com a voltagem externa. Assim, ao entrar em contato com o coletor ferromagnético, os elétrons serão aceitos ou rejeitados de acordo com a sua orientação de spin.

Entretanto, as técnicas atuais para injetar elétrons com spin polarizados são ineficientes [6]. Essa entre outras dificuldades impediram a construção do transistor proposto por Datta e Das. Por isso, diferentes modelos para transistores de spin que não necessitam da injeção de elétrons com spin polarizados tem sido propostos e estudados [7–11].

Em um trabalho recente proposto por Malard et. al. [12] mostrou-se que o acoplamento spin-órbita de Rashba modulado periodicamente em um fio quântico gera uma transição de fase metal-isolante quando o comprimento de onda da modulação se torna comensurável com o comprimento de onda de Fermi no fio. Nesse modelo, seria

possível controlar essa transição de fase através da modulação externa, produzindo, assim, uma chave de corrente baseada no spin do elétron - um transistor de spin - sem a necessidade de polarização dos spins.

Na presente dissertação, temos como objetivo estender o estudo analítico e os resultados obtidos em [12] através de uma combinação de métodos analíticos e computacionais de física da matéria condensada e de ciência de materiais para entender os efeitos da interação Rashba e de um potencial químico modulados sobre a dinâmica de carga e de spin em um fio quântico.

Através destes métodos verificamos os achados analíticos apresentados por Malard et. al. [12] mas também obtivemos novos resultados que levaram ao aprofundamento do entendimento dos efeitos da interação spin-órbita de Rashba e do potencial químico modulados assim como o entendimento da transição de fase. Analisamos também os autoestados a fim de compreender melhor a estrutura dos estados metálicos e isolantes.

A presente dissertação está organizada da seguinte forma: No Capítulo 1 apresentamos o formalismo geral de 2^a quantização e interação spin-órbita necessários para o entendimento do estudo realizado. No capítulo 2 apresentamos o modelo proposto e os métodos utilizados para a obtenção dos resultados. No capítulo 3 analisamos e discutimos os resultados obtidos. Finalmente apresentamos as nossas conclusões e projeções de pesquisas futuras.

1 Teoria geral de 2ª quantização

Neste capítulo iremos desenvolver a teoria de 2ª quantização para um sistema de partículas interagentes em uma rede cristalina. Posteriormente, iremos aplicar o formalismo geral desenvolvido neste capítulo no contexto do sistema de interesse neste trabalho. Neste capítulo iremos seguir as referências [13,14,16]

O primeiro formalismo da mecânica quântica desenvolvido para descrever partículas isoladas tem como base a identificação das observáveis físicas com operadores matemáticos [13], como por exemplo:

$$\begin{aligned} x &\longrightarrow \hat{x} \\ \mathbf{p} &\longrightarrow -i\hbar\vec{\nabla} \\ E &\longrightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t} \end{aligned} \tag{1.1}$$

Já o formalismo de 2ª quantização é utilizado para descrever e analisar sistemas quânticos de muitos corpos. Foi introduzido originalmente por Dirac para dar a base de mecânica quântica para partículas idênticas. Neste formalismo, o objetivo é escrever as funções de onda da partícula em termos de operadores criação e destruição [14].

1.1 Partículas livres

O hamiltoniano H_0 para N_p partículas livres é dado por:

$$H_0 = \sum_{n=1}^{N_p} \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} = \sum_{n=1}^{N_p} \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla_n^2 \tag{1.2}$$

onde \mathbf{p}_n é o momento da n -ésima partícula, m a massa e onde utilizamos a relação de primeira quantização dada pela eq. (1.1).

As autofunções do hamiltoniano

$$H_n = \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n^2$$

da n -ésima partícula livre são:

$$\phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \tag{1.3}$$

onde \mathbf{r}_n é a posição da n -ésima partícula do sistema, \mathbf{k} seu número de onda e σ seu spin.

As autofunções gozam da propriedade da ortonormalidade, isto é:

$$\int d^3r_n \phi_{k,\sigma}^*(\mathbf{r}_n) \phi_{k',\sigma'}(\mathbf{r}_n) = \delta_{kk'} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (1.4)$$

Através da atuação do operador H_n nas autofunções da partícula livre obtemos as autoenergias do sistema:

$$\begin{aligned} H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) &= \frac{\mathbf{p}_n^2}{2m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \\ H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_n^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \\ H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_n} \end{aligned} \quad (1.5)$$

Substituindo a eq. (1.3) na eq. (1.5):

$$H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) \quad (1.6)$$

Por outro lado,

$$H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) = \varepsilon_k \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) \quad (1.7)$$

onde ε_k são as auto-energias do sistema. Comparando as eqs. (1.6) e (1.7) podemos concluir que:

$$\varepsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (1.8)$$

Agora podemos escrever a função de onda ψ de uma partícula livre como uma combinação linear das autofunções normalizadas por coeficientes $c_{k,\sigma}(t)$:

$$\psi(\mathbf{r}_n; t) = \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}(t) \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) \quad (1.9)$$

com:

$$c_{k,\sigma}(t) = c_{k,\sigma} e^{-i\varepsilon_k t/\hbar} \quad (1.10)$$

onde a dependência temporal da função de onda ψ proveniente da resolução da equação de Schrodinger dependente do tempo está contida em $c_{k,\sigma}(t)$.

O complexo conjugado ψ^\dagger da função de onda é dada por:

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}_n; t) = \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger(t) \phi_{k,\sigma}^*(\mathbf{r}_n) \quad (1.11)$$

com:

$$c_{k,\sigma}^\dagger(t) = c_{k,\sigma}^\dagger e^{i\varepsilon_k t/\hbar} \quad (1.12)$$

A função de onda deve ser normalizada, isto é:

$$\int d^3r_n \psi^\dagger(\mathbf{r}_n; t) \psi(\mathbf{r}_n; t) = 1 \quad (1.13)$$

Segundo o teorema de Bloch, a função de onda Ψ para o sistema de N_p partículas livres é dada pelo produto das funções de onda ψ de uma partícula:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) = \prod_{n=1}^{N_p} \psi(\mathbf{r}_n; t) \quad (1.14)$$

Vamos computar a atuação do hamiltoniano H_0 dado pela eq. (1.2) sobre a função de onda da eq. (1.14):

$$H_0 \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) = \prod_{n=1}^{N_p} \left[\sum_{n'=1}^{N_p} H_{n'} \right] \psi(\mathbf{r}_n; t) = \prod_{n=1}^{N_p} H_n \psi(\mathbf{r}_n; t) \quad (1.15)$$

Substituindo as eqs. (1.9) e (1.7) na eq. (1.15):

$$\begin{aligned} H_0 \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) &= \prod_{n=1}^{N_p} \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}(t) H_n \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) \\ H_0 \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) &= \prod_{n=1}^{N_p} \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}(t) \phi_{k,\sigma}(\mathbf{r}_n) \end{aligned} \quad (1.16)$$

Agora, queremos obter o valor esperado do operador H_0 no estado Ψ de todas as N_p partículas livres:

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle_\Psi &\equiv \langle \Psi | H_0 | \Psi \rangle = \\ &= \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) H_0 \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) \end{aligned}$$

Substituindo Ψ^\dagger através da eq. (1.14) onde ψ^\dagger é dado pela eq. (1.11) e $H_0\Psi$ dado na eq. (1.16):

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle_\Psi &= \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \prod_{n=1}^{N_p} \sum_{k,\sigma} c_{k,\sigma}^\dagger(t) \phi_{k,\sigma}^*(\mathbf{r}_n) \times \\ &\quad \times \prod_{n=1}^{N_p} \sum_{k',\sigma'} \varepsilon_{k'} c_{k',\sigma'}(t) \phi_{k',\sigma'}(\mathbf{r}_n) \end{aligned}$$

Rearranjando:

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle_\Psi &= \prod_{n=1}^{N_p} \int d^3r_n \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} c_{k,\sigma}^\dagger(t) \phi_{k,\sigma}^*(\mathbf{r}_n) \varepsilon_{k'} c_{k',\sigma'}(t) \phi_{k',\sigma'}(\mathbf{r}_n) \\ \langle H_0 \rangle_\Psi &= \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} \varepsilon_{k'} c_{k,\sigma}^\dagger(t) c_{k',\sigma'}(t) \prod_{n=1}^{N_p} \int d^3r_n \phi_{k,\sigma}^*(\mathbf{r}_n) \phi_{k',\sigma'}(\mathbf{r}_n) \end{aligned}$$

Usando a eq. (1.4):

$$\begin{aligned} \langle H_0 \rangle_\Psi &= \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} \varepsilon_{k'} c_{k,\sigma}^\dagger(t) c_{k',\sigma'}(t) \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \\ \langle H_0 \rangle_\Psi &= \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger(t) c_{k,\sigma}(t) \end{aligned}$$

Usando as eqs. (1.10) e (1.12) obtemos:

$$\langle H_0 \rangle_\Psi = \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \quad (1.17)$$

onde ε_k é dado pela eq. (1.8).

Dizemos que a eq. (1.17) é a forma "2ª quantizada" do hamiltoniano de partículas livres dado na eq. (1.2). Na teoria de 2ª quantização, mostra-se também que $c_{k,\sigma}$ e $c_{k,\sigma}^\dagger$ deixam de ser os coeficientes numéricos da eq. (1.9) e se transformam em operadores destruição e criação, respectivamente, isto é, $c_{k,\sigma}$ ($c_{k,\sigma}^\dagger$) destrói (cria) uma partícula de energia ε_k e spin σ . O hamiltoniano $\langle H_0 \rangle_\Psi$ dado pela eq. (1.17) é bilinear nos operadores criação e destruição.

Os operadores têm diversas propriedades e aplicações. Por exemplo, o operador número:

$$n_{k,\sigma} \equiv c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} \quad (1.18)$$

"conta" o número de excitações com energia ϵ_k e spin σ em um dado estado quântico. Podemos interpretar a eq. (1.17) assim: a energia total H_0 do sistema é igual ao número $c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$ de excitações com energia ϵ_k vezes o valor ϵ_k , somado sobre todos os possíveis k 's.

$$\langle H \rangle_0 = \sum \hat{n}_k \epsilon_k \tag{1.19}$$

1.2 Partículas em um potencial cristalino

Consideremos agora que cada uma das partículas antes livres está sentindo um potencial de rede gerado por íons localizados do tipo:

$$U_n = \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_i) \tag{1.20}$$

onde \mathbf{r}_n é a posição da n -ésima partícula do sistema, \mathbf{R}_i é a posição do íon no i -ésimo sítio da rede e N o número de íons contidos na rede.

A Fig. (1) ilustra a n -ésima partícula (um elétron, por exemplo) vagando "sobre" uma rede de íons positivos (os átomos do cristal com elétrons a menos - no nosso caso de interesse) localizados nos sítios indexados por i .

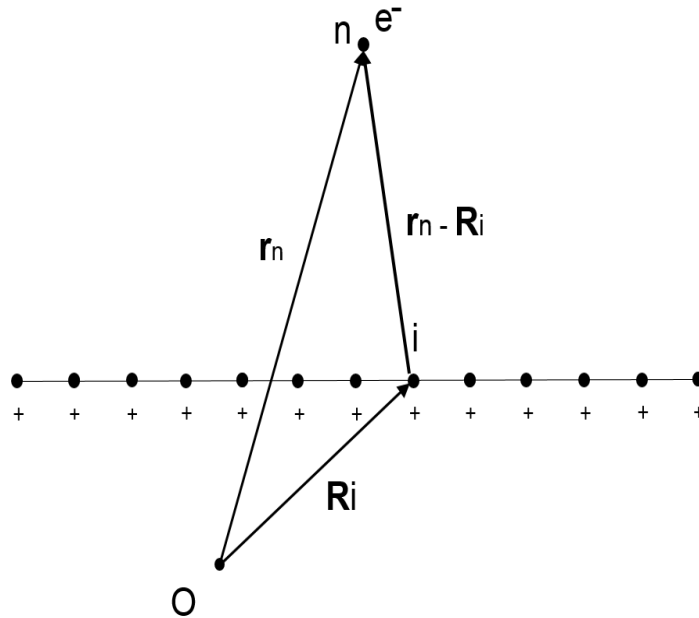


Figura 1 – Um elétron “vagando” sobre uma rede unidimensional de íons positivos

Somando para todas as N_p partículas temos a energia total U de interação entre as partículas e a rede:

$$U = \sum_{n=1}^{N_p} U_n = \sum_{n=1}^{N_p} \sum_{i=1}^N U(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_i) \quad (1.21)$$

Queremos calcular o valor esperado de U na função de onda Ψ do sistema das N_p partículas livres:

$$\langle U \rangle_{\Psi} \equiv \langle \Psi | U | \Psi \rangle$$

$$\langle U \rangle_{\Psi} = \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \Psi^\dagger(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) U \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t)$$

Substituindo as eqs. (1.14) e (1.21):

$$\begin{aligned} \langle U \rangle_{\Psi} = & \sum_{i=1}^N \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \psi^\dagger(\mathbf{r}_{N_p}; t) \dots \psi^\dagger(\mathbf{r}_2; t) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1; t) [(U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i) + \\ & + U(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_i) + \dots + U(\mathbf{r}_{N_p} - \mathbf{R}_i)] \psi(\mathbf{r}_1; t) \psi(\mathbf{r}_2; t) \dots \psi(\mathbf{r}_{N_p}; t) \end{aligned}$$

Como

$$\begin{aligned} & \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \psi^\dagger(\mathbf{r}_{N_p}; t) \dots \psi^\dagger(\mathbf{r}_2; t) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1; t) U(\mathbf{r}_n - \mathbf{R}_i) \psi(\mathbf{r}_1; t) \times \\ & \times \psi(\mathbf{r}_2; t) \dots \psi(\mathbf{r}_{N_p}; t) = \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}; t) U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \psi(\mathbf{r}; t) \quad \forall \quad n = 1, 2, \dots, N_p \end{aligned}$$

em virtude da normalização da eq. (1.13), temos:

$$\langle U \rangle_{\Psi} = N_p \sum_{i=1}^N \int d^3r \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (1.22)$$

Fazendo a transformada de Fourier para $U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$:

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \sum_q U_q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)} \quad (1.23)$$

E substituindo as eqs.(1.9), (1.11), (1.23) e (1.3) na eq. (1.22) obtemos:

$$\langle U \rangle_{\Psi} = N_p \sum_{i=1}^N \sum_{q, k_s, \sigma_s} c_{k_1 \sigma_1}^\dagger(t) U_q e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} c_{k_2 \sigma_2}(t) \int d^3r e^{i(-\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}}$$

Utilizando a seguinte propriedade de ortogonalidade da exponencial imaginária:

$$\int \frac{d^3r}{(2\pi)^3} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = \delta_{\mathbf{k},0} \quad (1.24)$$

Podemos escrever:

$$\langle U \rangle_{\Psi} = \sum_{q,k_s,\sigma_s} U'_q c_{k_1,\sigma_1}^{\dagger}(t) c_{k_2,\sigma_2}(t) \delta_{k_1,k_2+q}$$

onde:

$$U'_q = (2\pi)^3 N_p U_q \sum_{i=1}^N e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_i}$$

Realizando a soma em k_1 e mudando a nomenclatura de k_2 para k e como o potencial U'_q não afeta o spin, ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$), reescrevemos:

$$\langle U \rangle_{\Psi} = \sum_{q,k,\sigma} U'_q c_{k+q,\sigma}^{\dagger}(t) c_{k,\sigma}(t) \quad (1.25)$$

É possível mostrar que a dependência temporal da eq. (1.25) pode ser removida (conforme argumentaremos adiante), de forma que:

$$\langle U \rangle_{\Psi} = \sum_{q,k,\sigma} U'_q c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} \quad (1.26)$$

A eq. (1.26) é a forma "2ª quantizada" do potencial de interação com a rede. Note que $\langle U \rangle_{\Psi}$ é bilinear nos operadores criação e destruição.

Podemos representar a interação descrita pela eq. (1.26) através da Fig. (2). A interação com o íon no sítio i destrói um elétron com momento \mathbf{k} e spin σ e cria um elétron com momento $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ e mesmo spin σ . Dizemos que o elétron foi espalhado pela rede, sendo U'_q a intensidade deste espalhamento. Por conservação do momento linear, o sítio i sofre um recuo de $-\mathbf{q}$. Como a massa do íon é muito maior do que a do elétron, o momento $-\mathbf{q}$ do recuo do íon é insignificante. É isso que permite remover a dependência temporal da eq. (1.25).

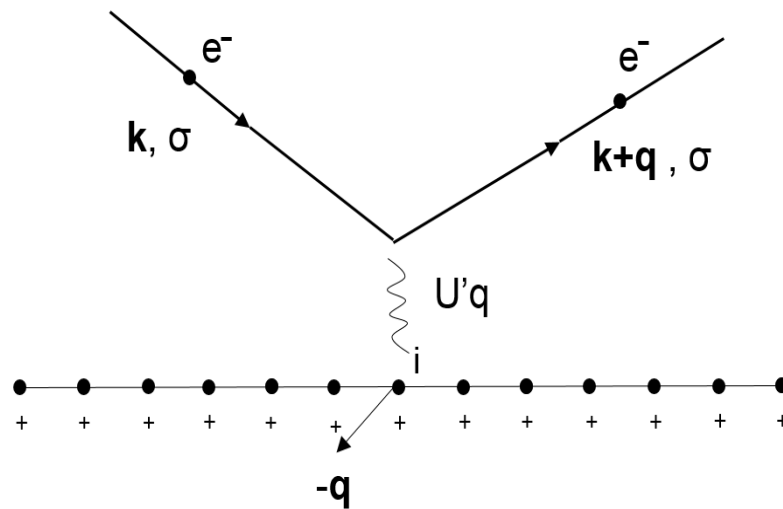


Figura 2 – Espalhamento de um elétron em virtude de sua interação com a rede cristalina.

1.3 Interação partícula-partícula

Consideremos agora que temos uma interação entre as partículas no sistema do tipo:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m}^{N_p} V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \quad (1.27)$$

onde, como antes, N_p representa o número de partículas presentes no sistema, \mathbf{r}_n e \mathbf{r}_m são as posições da n -ésima e m -ésima partículas, respectivamente, e V um potencial de interação entre as partículas (potencial coulombiano entre elétrons, por exemplo).

A Fig. (3) ilustra um sistema de partículas (elétrons), onde a n -ésima e a m -ésima partícula interagem entre si, para todo $n \neq m$.

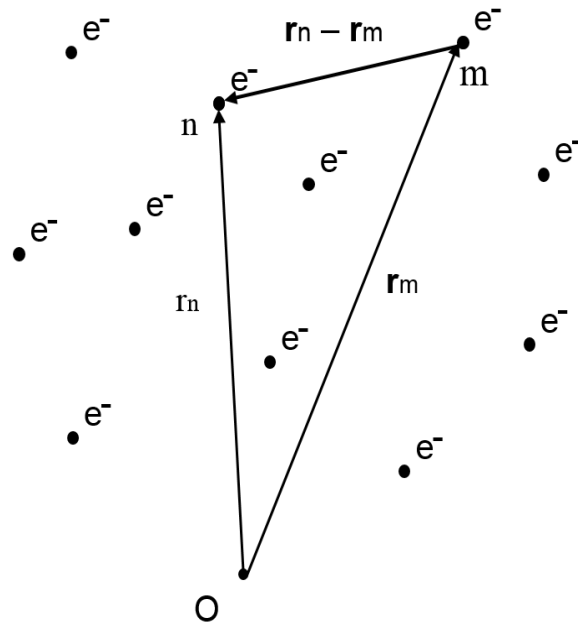


Figura 3 – Sistema de elétrons interagentes entre si.

Queremos agora calcular o valor esperado de V na função de onda Ψ do sistema das N_p partículas livres:

$$\langle V \rangle_{\Psi} = \langle \Psi | V | \Psi \rangle$$

$$\langle V \rangle_{\Psi} = \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \Psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t) V \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_{N_p}; t)$$

Substituindo as eqs. (1.14) e (1.27):

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_{\Psi} = & \frac{1}{2} \int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_{N_p}; t) \dots \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_2; t) \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1; t) \times \\ & \times [V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) + \dots + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_{N_p}) + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1) + \dots + \\ & + V(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_{N_p}) + \dots + V(\mathbf{r}_{N_p-1} - \mathbf{r}_1) + \dots + V(\mathbf{r}_{N_p-1} - \mathbf{r}_{N_p})] \times \\ & \psi(\mathbf{r}_1; t) \psi(\mathbf{r}_2; t) \dots \psi(\mathbf{r}_{N_p}; t) \end{aligned} \quad (1.28)$$

Note que há $(N_p - 1)^2$ potenciais de interação dentro do colchete da eq. (1.28).

Como

$$\int d^3r_1 d^3r_2 \dots d^3r_{N_p} \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_{N_p}; t) \dots \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_2; t) \psi^{\dagger}(\mathbf{r}_1; t) V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \times$$

$$\begin{aligned} \times \psi(\mathbf{r}_1; t) \psi(\mathbf{r}_2; t) \dots \psi(\mathbf{r}_{N_p}; t) &= \int d^3 r_n d^3 r_m \psi^\dagger(\mathbf{r}_m; t) \psi^\dagger(\mathbf{r}_n; t) \times \\ &\times V(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_m) \psi(\mathbf{r}_n; t) \psi(\mathbf{r}_m; t) \end{aligned}$$

em virtude da eq. (1.13), temos:

$$\langle V \rangle_\Psi = (N_p - 1)^2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \psi^\dagger(\mathbf{r}_2; t) \psi^\dagger(\mathbf{r}_1; t) V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \psi(\mathbf{r}_1; t) \psi(\mathbf{r}_2; t) \quad (1.29)$$

Realizando a transformada de Fourier inversa para $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$:

$$V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) = \sum_q V_q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \quad (1.30)$$

E substituindo as eqs.(1.9), (1.11), (1.30) e (1.3) na eq. (1.29) obtemos:

$$\langle V \rangle_\Psi = (N_p - 1)^2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \sum_{q, k_s, \sigma_s} c_{k_2, \sigma_2}^\dagger(t) e^{-i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} c_{k_1, \sigma_1}^\dagger(t) e^{-i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} \times$$

$$\times V_q e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} c_{k_3, \sigma_3}(t) e^{i\mathbf{k}_3 \cdot \mathbf{r}_1} c_{k_4, \sigma_4}(t) e^{i\mathbf{k}_4 \cdot \mathbf{r}_2}$$

$$\langle V \rangle_\Psi = (N_p - 1)^2 \int d^3 r_1 d^3 r_2 \sum_{q, k_s, \sigma_s} V_q c_{k_2, \sigma_2}^\dagger(t) c_{k_1, \sigma_1}^\dagger(t) \times$$

$$\times c_{k_3, \sigma_3}(t) c_{k_4, \sigma_4}(t) e^{i(-\mathbf{k}_1 + \mathbf{q} + \mathbf{k}_3) \cdot \mathbf{r}_1} e^{i(-\mathbf{k}_2 - \mathbf{q} + \mathbf{k}_4) \cdot \mathbf{r}_2}$$

Utilizando a eq. (1.24):

$$\begin{aligned} \langle V \rangle_\Psi &= (N_p - 1)^2 \sum_{q, k_s, \sigma_s} V_q c_{k_1, \sigma_1}^\dagger(t) c_{k_2, \sigma_2}^\dagger(t) c_{k_3, \sigma_3}(t) c_{k_4, \sigma_4}(t) \times \\ &\times (2\pi)^3 \delta_{k_1, k_3 + q} (2\pi)^3 \delta_{k_2, k_4 - q} \end{aligned}$$

Realizando as somas em k_1 e k_2 e absorvendo $(2\pi)^6 (N_p - 1)^2 / 2$ em V_q temos:

$$\langle V \rangle_\Psi = \sum_{q, k_s, \sigma_s} V_q c_{k_3 + q, \sigma_1}^\dagger(t) c_{k_4 - q, \sigma_2}^\dagger(t) c_{k_3, \sigma_3}(t) c_{k_4, \sigma_4}(t)$$

Mudando a nomenclatura de k_3 para k e k_4 para k' e como a interação V_q não interfere no spin, ($\sigma_1 = \sigma_3 = \sigma$ e $\sigma_2 = \sigma_4 = \sigma'$), reescrevemos:

$$\langle V \rangle_\Psi = \sum_{q, k, k', \sigma, \sigma'} V_q c_{k+q, \sigma}^\dagger(t) c_{k'-q, \sigma'}^\dagger(t) c_{k, \sigma}(t) c_{k', \sigma'}(t) \quad (1.31)$$

Considerando que a interação entre os elétrons é elástica, a dependência temporal da eq. (1.31) pode ser removida e obtemos:

$$\langle V \rangle_{\Psi} = \sum_{q, k, k', \sigma, \sigma'} V_q c_{k+q, \sigma}^{\dagger} c_{k'-q, \sigma'}^{\dagger} c_{k, \sigma} c_{k', \sigma'} \quad (1.32)$$

A eq. (1.32) é a forma "2ª quantizada" do potencial de interação entre partículas. Note que $\langle V \rangle_{\Psi}$ é biquadrática nos operadores criação e destruição.

Podemos representar a interação descrita pela eq. (1.32) através da Fig. (4). A interação ou espalhamento de intensidade V_q entre elétrons com momentos \mathbf{k} e \mathbf{k}' destrói ambos e cria um novo par de elétrons com momentos $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ e $\mathbf{k}' - \mathbf{q}$. Note que este espalhamento não altera os spins dos elétrons interagentes e que o processo conserva o momento linear.

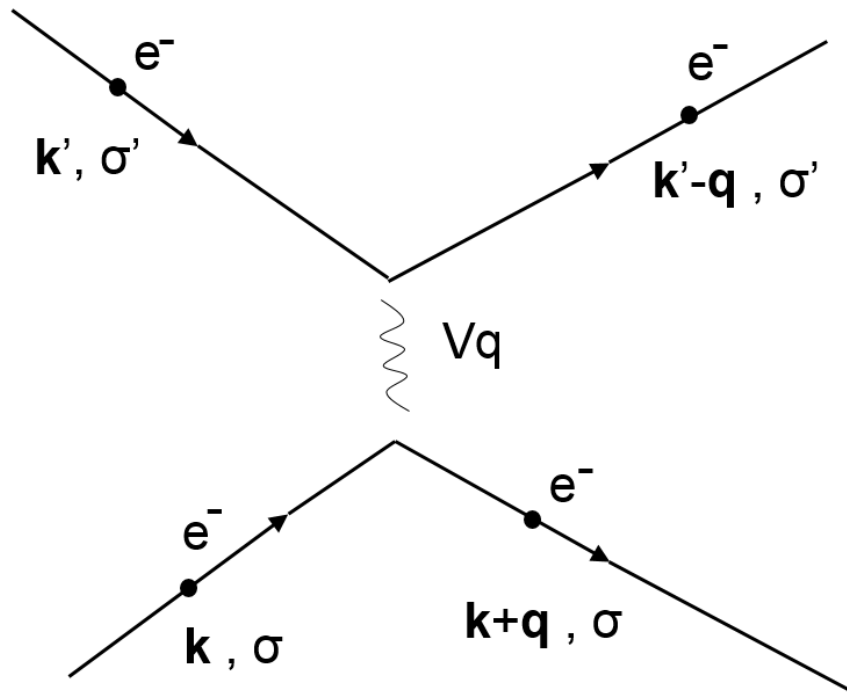


Figura 4 – Espalhamento entre dois elétrons interagentes entre si.

1.4 Hamiltoniano total

Agora podemos escrever o valor esperado do Hamiltoniano total de um sistema de partículas interagentes em uma rede cristalina:

$$\langle H \rangle_{\Psi} = \langle H_0 \rangle_{\Psi} + \langle U \rangle_{\Psi} + \langle V \rangle_{\Psi}$$

onde os termos do lado direito são dados pelas eqs. (1.17), (1.26) e (1.32), que representam os termos cinético, interação com a rede e interação elétron-elétron, respectivamente. Logo:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle_{\Psi} = & \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k,\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} + \sum_{q,k,\sigma} U'_q c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k,\sigma} + \\ & \sum_{q,k,k',\sigma,\sigma'} V_q c_{k+q,\sigma}^{\dagger} c_{k'-q,\sigma'}^{\dagger} c_{k,\sigma} c_{k',\sigma'} \end{aligned} \quad (1.33)$$

1.5 Hamiltoniano total no espaço das posições

Queremos agora escrever o hamiltoniano (1.33) no espaço das posições. Adiante iremos aplicar o resultado desta análise para nosso sistema de interesse, um fio quântico 1D.

A transformação entre o espaço dos momentos k (espaço recíproco) e o espaço das posições n (espaço direto) é realizada aplicando as transformadas de Fourier sobre os operadores destruição e criação:

$$c_{k,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N c_{n,\sigma} e^{ikna} \quad (1.34)$$

$$c_{k,\sigma}^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N c_{n,\sigma}^{\dagger} e^{-ikna} \quad (1.35)$$

onde N é o número de sítios da rede e a o parâmetro de rede.

Realizando a transformada primeiramente para o hamiltoniano de partícula livre (1.17), para ε_k

$$\varepsilon_k = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N \varepsilon_n e^{ikna}$$

obtemos:

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N \varepsilon_n e^{ikna} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n'=1}^N c_{n',\sigma}^\dagger e^{-ikn'a} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n''=1}^N c_{n'',\sigma} e^{ikn''a}$$

$$H_0 = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n,n',n'',\sigma} \varepsilon_n c_{n',\sigma}^\dagger c_{n'',\sigma} \times \frac{1}{Na} \sum_k e^{ik(n-n'+n'')a}$$

Onde, por simplicidade de notação, fizemos $\langle H_0 \rangle_\Psi \rightarrow H_0$. Aplicando

$$\frac{1}{Na} \sum_k e^{ikna} = \delta_{n,0} \quad (1.36)$$

temos:

$$H_0 = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n,n',n'',\sigma} \varepsilon_n c_{n',\sigma}^\dagger c_{n'',\sigma} \delta_{n-n'+n'',0}$$

$$H_0 = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n',n'',\sigma} \varepsilon_{n'-n''} c_{n',\sigma}^\dagger c_{n'',\sigma} \quad (1.37)$$

A eq. (1.37) dá a energia cinética H_0 do sistema em termos da destruição de um elétron no sítio n'' e a criação do mesmo elétron no sítio n' , ou seja, através de um "pulo" do elétron entre estes sítios onde $\varepsilon_{n'-n''}$ é a energia do pulo. Em uma primeira aproximação, consideremos apenas pulos entre sítios vizinhos e tomamos $n' \rightarrow n$ e $n'' \rightarrow n+1$ na eq. (1.37). Assim:

$$H_0 = -t \sum_{n,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + H.c. \quad (1.38)$$

onde $-t = \frac{1}{\sqrt{Na}} \varepsilon_{-1}$ e $H.c.$ é o termo hermitiano conjugado que deve ser adicionado para manter a hermiticidade do hamiltoniano "perdida" na aproximação de primeiros vizinhos.

Agora realizando as transformadas (1.34) e (1.35) para o termo de interação com a rede (1.26); com

$$U'_q = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N U'_n e^{iqna}$$

obtemos:

$$U = \sum_{q,k,\sigma} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N U'_n e^{iqna} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n'=1}^N c_{n',\sigma}^\dagger e^{-i(k+q)n'a} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n''=1}^N c_{n'',\sigma} e^{ikn''a}$$

$$U = \sqrt{Na} \sum_{n,n',n'',\sigma} U'_n c_{n',\sigma}^\dagger c_{n'',\sigma} \times \frac{1}{Na} \sum_q e^{iq(n-n')a} \times \frac{1}{Na} \sum_k e^{ik(-n'+n'')a}$$

onde por simplicidade de notação fizemos $\langle U \rangle_\Psi \rightarrow U$.

Aplicando a eq. (1.36):

$$U = \sqrt{Na} \sum_{n,n',n'',\sigma} U'_n c_{n',\sigma}^\dagger c_{n'',\sigma} \delta_{n''-n',0} \delta_{n-n',0}$$

$$U = \sqrt{Na} \sum_{n,n',\sigma} U'_n c_{n',\sigma}^\dagger c_{n',\sigma} \delta_{n-n',0}$$

$$U = \sqrt{Na} \sum_{n,\sigma} U'_n c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma}$$

Em um sistema homogêneo a energia de sítio U'_n não depende da posição n do sítio. Logo, podemos fazer $\sqrt{Na} U'_n = -\mu$ e:

$$U = -\mu \sum_{n,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \quad (1.39)$$

A eq. (1.39) nos dá a energia de interação de um elétron com a rede em termos da destruição e posterior criação deste elétron no sítio n com spin σ a um custo energético de $-\mu$, ou seja, a equação dá a energia de sítio somada para todos os sítios e spins. O fator μ é chamado de potencial químico.

Agora vamos fazer as transformadas de Fourier (1.34) e (1.35) para o termo de interação partícula-partícula (1.32), onde:

$$V_q = \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N V_n e^{iqna}$$

Aplicando as transformações e fazendo $\langle V \rangle_\Psi \rightarrow V$ obtemos:

$$V = \sum_{q,k,k',\sigma,\sigma'} \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n=1}^N V_n e^{iqna} \times \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n_1=1}^N c_{n_1,\sigma}^\dagger e^{-i(k+q)n_1a} \times$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n_2=1}^N c_{n_2,\sigma'}^\dagger e^{-i(k'-q)n_2a} \times \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n_3=1}^N c_{n_3,\sigma} e^{ikn_3a} \times \frac{1}{\sqrt{Na}} \sum_{n_4=1}^N c_{n_4,\sigma'} e^{ik'n_4a}$$

$$V = \sqrt{Na} \sum_{n',s,\sigma,\sigma'} V_n c_{n_1,\sigma}^\dagger c_{n_2,\sigma'}^\dagger c_{n_3,\sigma} c_{n_4,\sigma'}$$

$$\times \frac{1}{Na} \sum_q e^{iq(n-n_1+n_2)a} \times \frac{1}{Na} \sum_k e^{ik(n_3-n_1)a} \times \frac{1}{Na} \sum_{k'} e^{ik'(n_4-n_2)a}$$

Aplicando a eq. (2.35):

$$V = \sqrt{Na} \sum_{n',\sigma,\sigma'}^N V_n c_{n_1,\sigma}^\dagger c_{n_2,\sigma'}^\dagger c_{n_3,\sigma} c_{n_4,\sigma'} \times \\ \times \delta_{n_4-n_2,0} \delta_{n_3-n_1,0} \delta_{n-n_1+n_2,0}$$

Chamando $n_1 = n$ e $n_2 = n'$

$$V = \sum_{n,n',\sigma,\sigma'}^N V_{n-n'} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n',\sigma'}^\dagger c_{n,\sigma} c_{n',\sigma'} \quad (1.40)$$

onde $V_{n-n'} \rightarrow \sqrt{Na} V_{n-n'}$.

A eq. (1.40) nos dá a energia de interação entre um elétron no sítio n com spin σ e um elétron no sítio n' com spin σ' , sendo $V_{n-n'}$ a intensidade desta interação. A energia total de interação elétron-elétron é obtida somando-se sobre todos os pares n e n' de sítios com $n \neq n'$.

Finalmente, somando todas as interações presentes nas eqs. (1.38), (1.39) e (1.40) obtemos o hamiltoniano total H no espaço das posições:

$$H = -t \sum_{n,\sigma}^N c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + H.c. - \mu \sum_{n,\sigma}^N c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + \sum_{n,n',\sigma,\sigma'}^N V_{n-n'} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n',\sigma'}^\dagger c_{n,\sigma} c_{n',\sigma'} \quad (1.41)$$

O hamiltoniano acima também é encontrado a partir de um formalismo diferente do que utilizamos - chamado *tight binding* - que é um método para calcular a estrutura eletrônica de bandas de um cristal a partir da superposição das funções de onda dos orbitais dos átomos localizados em cada sítio, chamadas funções de Wannier.

1.6 Teoria geral da interação spin-órbita

A interação spin-órbita (SO) é um efeito de acoplamento do momento angular intrínseco do elétron, chamado spin, com o seu momento angular orbital. Esta interação é responsável por uma variedade de fenômenos físicos, desde a estrutura fina do espectro atômico ao efeito spin-Hall quântico e fases topológicas da matéria. Estritamente, este acoplamento é um efeito relativístico, mas ele pode ser obtido de uma forma mais simples através de uma abordagem semi-clássica. Se utilizarmos como exemplo o átomo de hidrogênio, tomando o referencial no elétron, podemos imaginar o próton circulando ao seu redor, como mostrado na Fig. 5.

A carga positiva do próton em movimento gera um campo magnético \mathbf{B} na posição do elétron, como mostrado na Fig. 5. O momento de dipolo magnético de *spin* μ_s , por minimização de energia, se alinha na direção do campo magnético \mathbf{B} do próton. A energia desta interação é dada por [13]:

$$H_{SO} = -\mu_s \cdot \mathbf{B} \quad (1.42)$$

Queremos determinar o campo magnético do próton \mathbf{B} e o momento de dipolo magnético de spin do elétron μ_s , em termos dos respectivos momentos angulares.

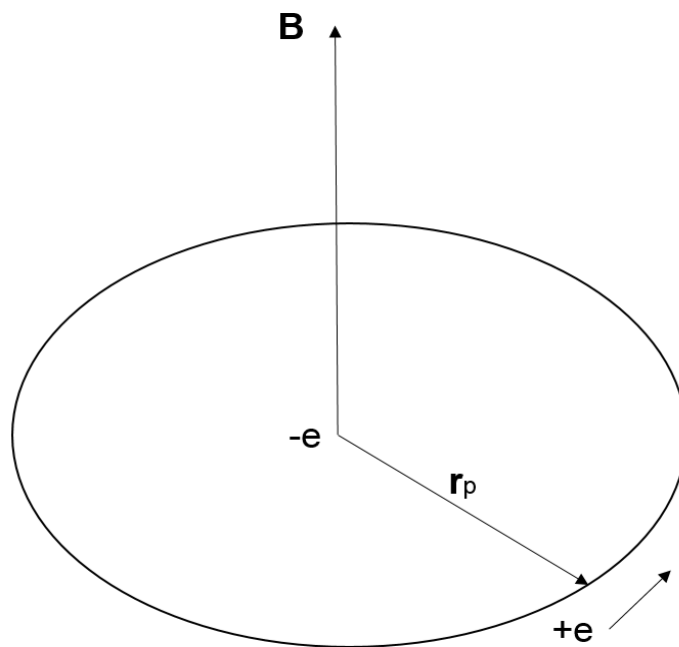


Figura 5 – Átomo de Hidrogênio, a partir do referencial do elétron. Onde r_p é o vetor que representa o raio da órbita do próton e \mathbf{B} é o campo magnético do próton, na posição do elétron.

1.6.1 Abordagem semi-clássica

No referencial do elétron, podemos considerar classicamente que o próton está realizando uma órbita circular e contínua em torno do elétron. O módulo do campo magnético gerado pelo próton em movimento pode ser calculado através da lei de Biot-Savart [15]:

$$B = \frac{\mu_0 e}{2r_p T} \quad (1.43)$$

onde μ_0 é a constante de permeabilidade do vácuo, r_p o raio da órbita do próton e e/T a corrente associada a esta órbita, onde e é a carga do próton e T o período da órbita.

O momento angular do próton no referencial do elétron é dado por [13]:

$$\mathbf{L}_p = \mathbf{r}_p \times \mathbf{p}_p$$

onde \mathbf{p}_p é o momento linear do próton. Usando que $p_p = m_p v_p = \frac{m_p 2\pi r_p}{T}$, com m_p a massa do próton, vem que:

$$L_p = r_p p_p \sin 90^\circ$$

$$L_p = \frac{2\pi m_p r_p^2}{T} \quad (1.44)$$

Como, pela regra da mão direita, \mathbf{B} e \mathbf{L}_p estão na mesma direção, podemos escrever utilizando as equações (1.43) e (1.44):

$$\mathbf{B} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{m_p c^2 r_p^3} \mathbf{L}_p \quad (1.45)$$

onde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ é a velocidade da luz no vácuo.

Podemos reescrever a eq. (1.45) em termos do momento angular \mathbf{L}_e do elétron no referencial do próton e da massa m_e do elétron. Sabendo que

$$\mathbf{L}_e = \mathbf{r}_e \times \mathbf{p}_e \quad (1.46)$$

onde \mathbf{r}_e é a posição do elétron em relação ao próton e \mathbf{p}_e é o momento linear do elétron. O módulo de \mathbf{L}_e é:

$$L_e = r_e p_e \sin 90^\circ = r_e m_e v_e$$

onde v_e é a velocidade do elétron. Logo:

$$\frac{L_e}{m_e} = r_e v_e \quad (1.47)$$

De forma análoga, escrevemos para o próton no referencial do elétron:

$$\frac{L_p}{m_p} = r_p v_p \quad (1.48)$$

Sabemos que $r_e = r_p$ e que $v_p = v_e$, podemos igualar (1.48) e (1.47):

$$\frac{L_e}{m_e} = \frac{L_p}{m_p} \quad (1.49)$$

e reescrever o campo magnético gerado pelo próton no referencial do elétron dado na eq. (1.45) em termos da massa e do momento angular do elétron:

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e}{m_e c^2 r_e^3} \mathbf{L}_e \quad (1.50)$$

onde o sinal negativo se deve ao fato de que trocando de referencial o momento angular inverte o sentido.

Agora vamos determinar o momento de dipolo magnético μ_s de spin do elétron.

Considere inicialmente o problema de uma carga q girando ao longo de uma circunferência de raio r , com período T . O momento de dipolo magnético associado a esta circulação de carga é dado pela corrente (q/T) vezes a área inscrita pela mesma (πr^2) [13]:

$$\mu = \frac{q\pi r^2}{T} \quad (1.51)$$

Por outro lado, o momento angular da carga q é dado, como vimos na equação (1.44) para um próton, por:

$$L = \frac{2\pi m r^2}{T} \quad (1.52)$$

Como pela regra da mão direita μ e \mathbf{L} têm a mesma direção, podemos escrever, utilizando as equações (1.51) e (1.52):

$$\mu = \frac{q}{2m} \mathbf{L} \quad (1.53)$$

Ou seja, o momento de dipolo magnético de uma carga q em uma órbita circular é proporcional ao momento angular da carga. A constante de proporcionalidade $q/2m$ é chamada de razão giromagnética.

Guiados pela equação (1.53), somos levados a escrever a relação

$$\boldsymbol{\mu}_s = \frac{-e}{2m_e} \mathbf{S} \quad (1.54)$$

entre o momento de dipolo magnético de spin $\boldsymbol{\mu}_s$ e o momento angular de spin \mathbf{S} do elétron, onde $-e$ é a carga do elétron.

Porém, os experimentos mostram que o momento de dipolo magnético de spin do elétron é duas vezes o valor calculado classicamente [13]:

$$\boldsymbol{\mu}_s = \frac{-e}{m_e} \mathbf{S} \quad (1.55)$$

sendo que o fator extra de 2 foi explicado por Dirac em sua teoria relativística do elétron [13].

Obtemos o hamiltoniano da interação spin-órbita em termos do momento angular de spins e do momento angular orbital \mathbf{L} do elétron substituindo as equações (1.50) e (1.55) na equação (1.42):

$$H_{SO} = - \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (1.56)$$

onde, por simplicidade de notação, trocamos m_e por m , r_e por r e \mathbf{L}_e por \mathbf{L} , sabendo que estas grandezas referem-se ao elétron. Experimentalmente, observa-se que a magnitude da energia associada à interação spin-órbita em átomos isolados é menor do que o previsto pela eq. (1.56) por um fator de 2. Este novo fator de 2 é explicado pela chamada precessão de Thomas [16]. Finalmente, escrevemos para o hamiltoniano de interação spin-órbita:

$$H_{SO} = - \left(\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \right) \frac{1}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (1.57)$$

1.6.2 Abordagem de 2ª quantização

Apesar do formalismo que leva à eq. (1.57) nos fornecer intuições físicas sobre a origem da interação spin-órbita e uma forma de estimar a energia desta interação, precisaremos agora escrever a eq. (1.57) na linguagem de 2ª quantização para adicioná-la ao hamiltoniano (1.41). Para isso, vamos voltar à eq. (1.42) e escrever o campo magnético, tomando o referencial do próton, como [16]:

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}$$

onde c é a velocidade da luz, \mathbf{v} é a velocidade de rotação do elétron em torno do próton e \mathbf{E} é o campo elétrico gerado pelo próton sobre o elétron. Com μ_s dado por (1.55), podemos reescrever (1.42):

$$H_{SO} = -\frac{e}{m} \mathbf{S} \cdot \left(\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} \right)$$

substituindo $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m}$, temos

$$H_{SO} = -\frac{e}{m^2 c} (\mathbf{p} \times \mathbf{E}) \cdot \mathbf{S}$$

$$H_{SO} = -\frac{\hbar^2 e}{2m^2 c} (\mathbf{k} \times \mathbf{E}) \cdot \sigma$$

onde usamos que $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ e $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \sigma$ e σ são as matrizes de Pauli. Sabendo que $\mathbf{E} = -\nabla V$, onde V é o potencial eletrostático temos:

$$H_{SO} = \frac{\hbar^2 e}{2m^2 c} (\mathbf{k} \times \nabla V) \cdot \sigma \quad (1.58)$$

A interação spin-órbita na forma da eq. (1.58) está pronta para receber o procedimento de 2ª quantização. Aqui, omitiremos este procedimento por estar fora do escopo deste texto e apresentaremos apenas o resultado final [17]:

$$H_{SO} = c \sum_{n,\sigma,\sigma'} c_{n,\sigma}^\dagger \sigma_\sigma c_{n+1,\sigma'} \quad (1.59)$$

onde o parâmetro c depende do potencial eletrostático V .

2 Modelo teórico de um transistor de spin

2.1 Descrição do modelo

Como já comentado na introdução, a fabricação de um transistor de spin se baseia no controle do transporte eletrônico através dos graus de liberdade de spin. O uso do spin no contexto da eletrônica foi originado pela descoberta da magnetorresistência gigante. Quando uma corrente elétrica flui de um material magnetizado, como um emissor ferromagnético, a carga que carrega esse fluxo se mantém, em condições ideais, polarizada com os spins dos elétrons orientados predominantemente em uma direção [18,19].

O trabalho mais relevante proposto utilizando este conhecimento foi o dispositivo Datta-Das, no qual os autores propõem um modelo onde elétrons com spin polarizados são injetados a partir de um emissor ferromagnético dentro de um fio quântico e recebidos em um coletor também ferromagnético. O fio quântico está inserido no poço quântico de uma heteroestrutura semicondutora e está sujeito à uma voltagem externa [3].

A Fig. 6 mostra a o dispositivo Datta-Das para um transistor de spin.

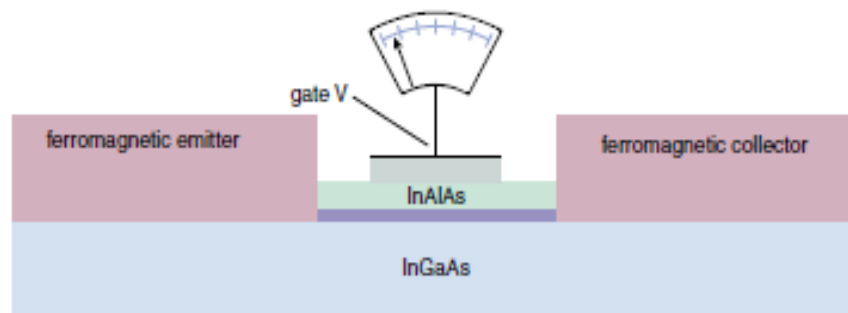


Figura 6 – Transistor de spin Datta-Das.

A interação spin-órbita de Rashba intrínseca à essa estrutura semicondutora causa a inversão de spin dos elétrons de acordo com a voltagem externa, pois é sensível ao campo elétrico aplicado [4,5]. Assim, ao entrar em contato com o coletor ferromagnético, os elétrons serão aceitos ou rejeitados de acordo com a sua orientação de spin, como mostra a Fig. 7.

Entretanto, as técnicas atuais para injetar elétrons com spin polarizados são ineficientes e, na prática, os spins são despolarizados já na interface entre o emissor ferromagnético e a estrutura semicondutora. Essa, entre outras dificuldades, impediram

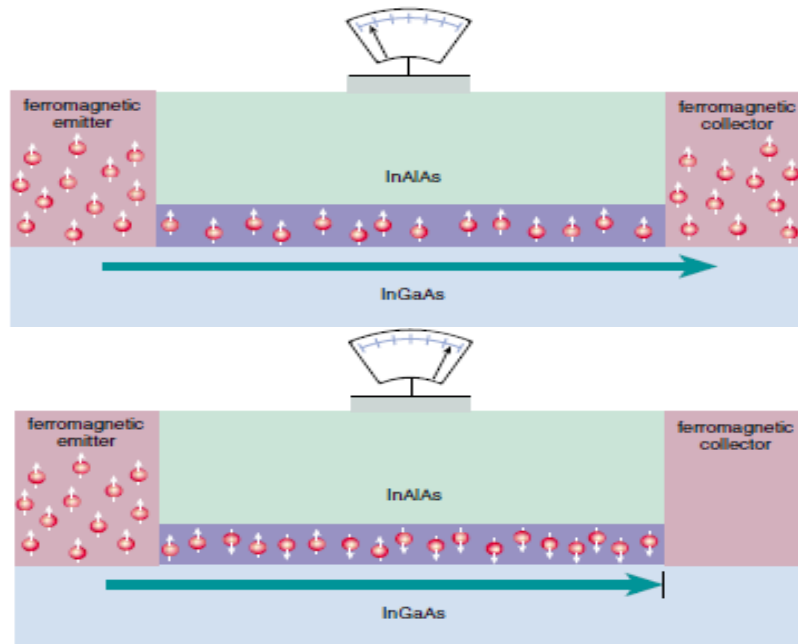


Figura 7 – **Acima:** Quando a voltagem externa é nula, elétrons com orientação de spin aceita pelo coletor ferromagnético são absorvidos pelo coletor. **Abaixo:** Elétrons após inversão de spin induzidos pela voltagem externa, rejeitados pelo coletor ferromagnético.

a realização do transistor proposto por Datta e Das. Para superar essas dificuldades experimentais Malard et. al. [12] propuseram um dispositivo que dispensa a injeção de elétrons com spin polarizados na geração de uma transição de fase metal-isolante a partir do controle do spin dos elétrons.

Assim como na proposta de Datta e Das, o transistor de spin proposto por Malard et. al. [12] é formado em um poço quântico na interface de uma heteroestrutura semicondutora, como mostrado na Fig. (8). Um capacitor de voltagem uniforme (não mostrado na figura) é aplicado lateralmente ao poço quântico para confinar os elétrons em canais de transporte unidimensionais, chamados fios quânticos. Para uma voltagem de confinamento suficientemente forte, pode-se desconsiderar a interação entre fios quânticos vizinhos e tomar cada fio como um canal de condução unidimensional ideal. A Fig. (8) mostra apenas um destes fios independentes. A inovação da proposta de Malard et. al. em relação ao dispositivo de Datta e Das é que o fio agora está submetido a um campo elétrico modulado espacialmente através da deposição de nanocapacitores igualmente distribuídos periodicamente, separados com uma distância d igual ao seu comprimento d na direção do fio, conforme ilustrado na Fig. (8). Curiosamente, a modulação no campo elétrico produz uma chave de corrente através de uma transição de fase metal-isolante sem necessidade de polarização dos spins.

Neste trabalho, revisitamos a proposta de Malard et. al. utilizando de uma abordagem computacional. Como veremos adiante, reproduzimos os resultados analíticos

obtidos pelos autores, mas também ampliamos o entendimento do sistema através de resultados que não poderiam ser encontrados analiticamente.

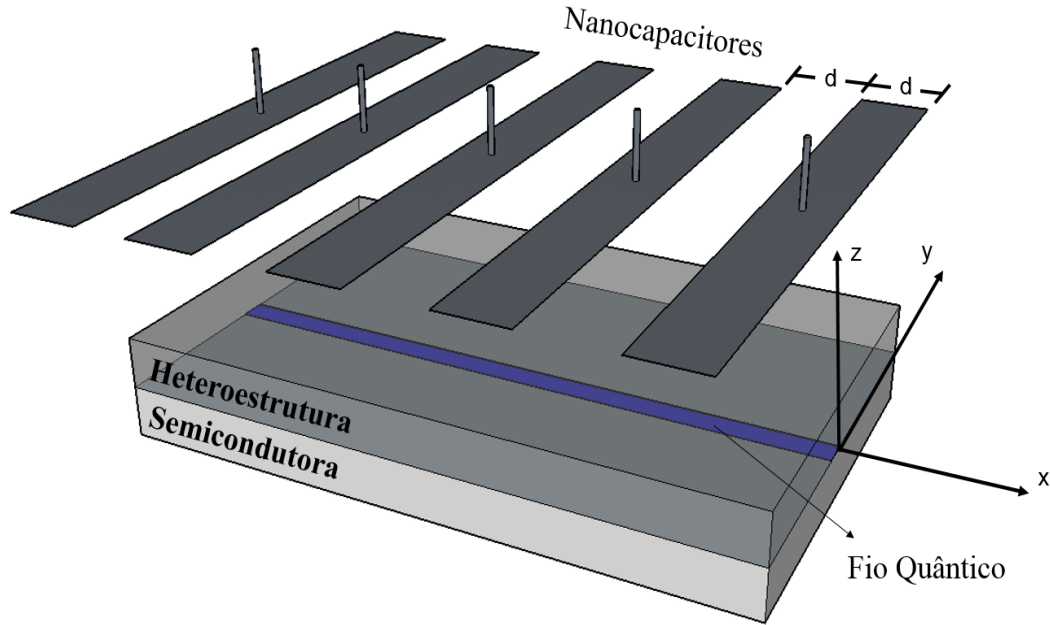


Figura 8 – Capacitores aplicados periodicamente sobre um fio quântico formado em um poço quântico semiconductor.

O hamiltoniano que descreve um sistema de elétrons em 1D é dado pela eq. (1.41):

$$H = -t \sum_{n,\sigma}^N c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + H.c. - \mu \sum_{n,\sigma}^N c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} + \sum_{n,n',\sigma,\sigma'}^N V_{n-n'} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n',\sigma'}^\dagger c_{n,\sigma} c_{n',\sigma'} \quad (2.1)$$

onde n e $n' = 1, 2, \dots, N$ indexam os sítios na rede, σ e $\sigma' = \uparrow, \downarrow$ indexa a orientação do spin ao longo de z , μ é o potencial químico uniforme, t é a amplitude de *hopping* e $V_{n-n'}$ é a intensidade da repulsão entre elétrons em n e n' .

No presente trabalho iremos desconsiderar as interações elétron-elétron descritas pelo último termo na equação acima pois, como mostrado por Malard et. al. [12], estas interações, por si só, não provocam uma transição de fase metal-isolante no sistema considerado. Em particular, Malard et. al. mostraram que a transição metal-isolante gerada pelos potenciais modulados não só é robusta sob interações elétron-elétron como, na verdade, estas interações potencializam o efeito dos potenciais modulados.

Além da repulsão coulombiana, os elétrons no fio quântico do dispositivo da Fig. (8) estão submetidos a dois tipos de interação spin-órbita: a de Dresselhaus e a de Rashba. A interação de Dresselhaus vem da falta da simetria de inversão intrínseca

ao próprio material semiconductor [20]. Já a interação de Rashba é originada pela assimetria de inversão na direção z (ver Fig. 8) causada pelo campo elétrico que aparece na interface dos dois semicondutores [4], [5]. Estas interações podem ser descritas pelas equações [12]:

$$H_D = \beta(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y), \quad (2.2)$$

$$H_R = \alpha(k_x \sigma_y - k_y \sigma_x), \quad (2.3)$$

onde α é a intensidade da interação de Rashba, β a intensidade da interação de Dresselhaus, $k_{x(y)}$ é o momento dos elétrons na direção $x(y)$ e $\sigma_{x(y)}$ é a matriz de Pauli para a direção $x(y)$.

Como o momento dos elétrons se encontra apenas na direção do fio, apenas os termos proporcionais a k_x contribuem para as interações spin-órbita. Fazendo a 2ª quantização para as eqs. (2.2) e (2.3) obtemos

$$H_{DR} = -i \sum_{n,\sigma,\sigma'} c_{n,\sigma}^\dagger [\gamma_D \sigma_{\sigma\sigma'}^x + \gamma_R \sigma_{\sigma\sigma'}^y] c_{n+1,\sigma'} + H.c. \quad (2.4)$$

onde γ_D e γ_R representam a intensidade das interações spin-órbita Dresselhaus e Rashba, respectivamente.

O efeito do campo elétrico modulado é produzir uma modulação equivalente na interação de Rashba (pois esta interação é sensível à campo externo) junto com uma modulação no potencial químico local. Uma boa aproximação é representar a modulação por um harmônico simples e desta forma escrever:

$$H_{mod} = -i \sum_{n,\sigma,\sigma'} \gamma_R(n) c_{n,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^y c_{n+1,\sigma'} + H.c. - \sum_{n,\sigma} \mu(n) c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \quad (2.5)$$

onde $\gamma_R(n) = \gamma'_R \cos(Qna)$, $\mu(n) = \mu' \cos(Qna)$, $\gamma'_R(\mu')$ é a amplitude da interação Rashba modulada (potencial químico modulado) e $Q = \pi/d$ é o número de onda da modulação externa. As amplitudes γ'_R e μ' variam linearmente com a amplitude do campo elétrico aplicado [12].

Há duas possibilidades para os potenciais modulados que aparecem na eq. (2.5): Ou o potencial de Rashba modulado e o potencial químico modulado estão em fase (γ'_R e μ' têm o mesmo sinal) ou fora de fase (γ'_R e μ' têm sinais opostos). O sinal de γ'_R , bem como o seu valor, é uma característica intrínseca do material. A Fig. 9 ilustra as duas possibilidades descritas.

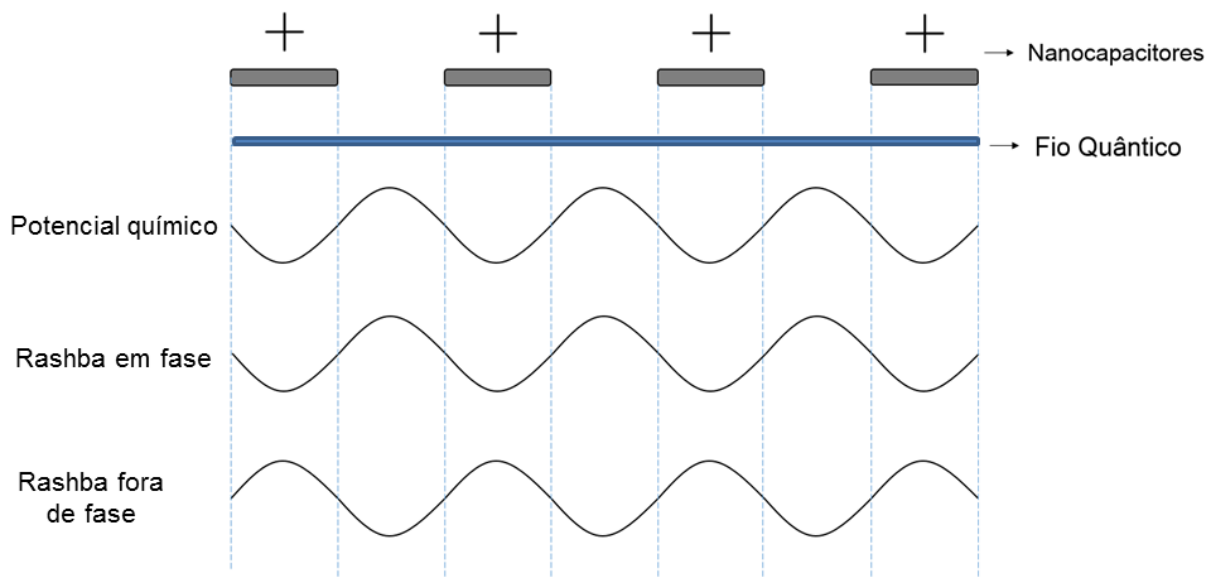


Figura 9 – Interação spin-órbita de Rashba modulada em fase e fora de fase com o potencial químico modulado.

Na Fig. 9, tomamos os capacitores como positivamente carregados. Isso faz com que os mínimos do potencial químico se localizem abaixo dos capacitores. Quando em fase, a interação spin-órbita de Rashba modulada atua em conjunto com o potencial químico modulado. Quando fora de fase, a interação de Rashba compete com o potencial químico e isso gera um efeito interessante que será abordado na seção 3.1.4.

2.2 Tratamento analítico

2.2.1 Mudança de base no espaço de spin

Nessa seção iremos reescrever o hamiltoniano apresentado na seção anterior a fim de deixá-lo em uma forma que trataremos computacionalmente. Para tal vamos realizar uma mudança nas eqs. (2.1), (2.4) e (2.5) (tomando $V_{n-n'} = 0$) com o objetivo de diagonalizá-las no espaço de spin.

Hamiltoniano das Interações spin-órbita de Dresselhaus e de Rashba

O hamiltoniano H_{DR} dado pela eq. (2.4) pode ser diagonalizado no espaço de spin através da seguinte mudança de base [12]:

$$\begin{cases} c_{n\uparrow} = \frac{e^{i\theta}}{\sqrt{2}}(d_{n+} + id_{n-}); \\ c_{n\downarrow} = \frac{e^{-i\theta}}{\sqrt{2}}(id_{n+} + d_{n-}) \end{cases} \quad (2.6)$$

onde θ será fixado pela condição de diagonalização e os índices $+$ e $-$ representam a orientação dos spins ao longo da direção de quantização na nova base. Para facilitar a troca de base, é conveniente separar H_{DR} da seguinte forma

$$H_{DR} = H_D + H_R \quad (2.7)$$

onde

$$H_D = -i\gamma_D \sum_{n,\sigma,\sigma'} c_{n,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^x c_{n+1,\sigma'} + H.c. \quad (2.8)$$

e

$$H_R = -i\gamma_R \sum_{n,\sigma,\sigma'} c_{n,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^y c_{n+1,\sigma'} + H.c. \quad (2.9)$$

Podemos representar as somas sobre σ e σ' na eq. (2.8) em forma matricial:

$$H_D = -i\gamma_D \sum_n \begin{pmatrix} c_{n\uparrow}^\dagger & c_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n+1\uparrow} \\ c_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} + H.c.$$

Realizando esta operação, obtemos:

$$H_D = -i\gamma_D \sum_n [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\uparrow}] + H.c.$$

Fazendo a mudança de base dada pela eq. (2.6), temos:

$$H_D = -i\gamma_D \sum_n \left[\frac{e^{-i2\theta}}{2} (d_{n+}^\dagger - id_{n-}^\dagger)(id_{n+1+} + d_{n+1-}) + \frac{e^{i2\theta}}{2} (-id_{n+}^\dagger + d_{n-}^\dagger)(d_{n+1+} + id_{n+1-}) \right] + H.c.$$

Após uma pequena álgebra, obtemos:

$$H_D = -i\frac{\gamma_D}{2} \sum_n [i(e^{-i2\theta} - e^{i2\theta})d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - i(e^{-i2\theta} - e^{i2\theta})d_{n-}^\dagger d_{n+1-} + (e^{-i2\theta} + e^{i2\theta})d_{n+}^\dagger d_{n+1-} + (e^{-i2\theta} + e^{i2\theta})d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c.$$

$$H_D = -i\gamma_D \sum_n [\sin 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - \sin 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1-} + \cos 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1-} + \cos 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c. \quad (2.10)$$

Reescrevendo a eq. (2.9) matricialmente:

$$H_R = -i\gamma_R \sum_n \begin{pmatrix} c_{n\uparrow}^\dagger & c_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n+1\uparrow} \\ c_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} + H.c.$$

E fazendo esta operação obtemos:

$$H_R = \gamma_R \sum_n (-c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\uparrow}) + H.c. \quad (2.11)$$

Fazendo a mudança de base dada pelas eqs. (2.6), temos:

$$H_R = \gamma_R \sum_n \left[-\frac{e^{-i2\theta}}{2} (d_{n+}^\dagger - id_{n-}^\dagger)(id_{n+1+} + d_{n+1-}) + \frac{e^{i2\theta}}{2} (-id_{n+}^\dagger + d_{n-}^\dagger)(d_{n+1+} + id_{n+1-}) \right] + H.c.$$

Rearranjando os termos:

$$H_R = \frac{\gamma_R}{2} \sum_n [-i(e^{-i2\theta} + e^{i2\theta})d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + i(e^{-i2\theta} + e^{i2\theta})d_{n-}^\dagger d_{n+1-} -$$

$$-(e^{-i2\theta} - e^{i2\theta})d_{n+}^\dagger d_{n+1-} - (e^{-i2\theta} - e^{i2\theta})d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c.$$

$$H_R = -i\gamma_R \sum_n [\cos 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - \cos 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1-} - \sin 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1-} - \sin 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c.$$

Agora podemos substituir as eqs. (2.10) e (2.2.1) na eq. (2.7) para obter o Hamiltoniano das interações spin-órbita de Dresselhaus e de Rashba:

$$H_{DR} = -i\gamma_D \sum_n [\sin 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - \sin 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1-} + \cos 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1-} + \cos 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] - i\gamma_R \sum_n [\cos 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - \cos 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1-} - \sin 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1-} - \sin 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c.$$

Rearranjando:

$$H_{DR} = \sum_n [(-i\gamma_D \sin 2\theta - i\gamma_R \cos 2\theta) d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + (i\gamma_D \sin 2\theta + i\gamma_R \cos 2\theta) d_{n-}^\dagger d_{n+1-} + (-i\gamma_D \cos 2\theta + i\gamma_R \sin 2\theta) d_{n+}^\dagger d_{n+1-} + (-i\gamma_D \cos 2\theta + i\gamma_R \sin 2\theta) d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c. \quad (2.12)$$

Podemos anular os termos não diagonais nos índices de spin tomando θ tal que:

$$-i\gamma_D \cos 2\theta + i\gamma_R \sin 2\theta = 0$$

E com isso obtemos que:

$$2\theta = \arctan \left(\frac{\gamma_D}{\gamma_R} \right) \quad (2.13)$$

Com isso podemos escrever:

$$\sin 2\theta = \left(\frac{\gamma_D}{\gamma_{eff}} \right); \quad (2.14)$$

$$\cos 2\theta = \left(\frac{\gamma_R}{\gamma_{eff}} \right) \quad (2.15)$$

com:

$$\gamma_{eff} = \sqrt{\gamma_D^2 + \gamma_R^2} \quad (2.16)$$

Substituindo essas relações na eq. (2.12), temos:

$$H_{DR} = \sum_n \left[\left(\frac{-i\gamma_D^2 - i\gamma_R^2}{\gamma_{eff}} \right) d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + \left(\frac{i\gamma_D^2 + i\gamma_R^2}{\gamma_{eff}} \right) d_{n-}^\dagger d_{n+1-} \right] + H.c.$$

$$H_{DR} = -i\gamma_{eff} \sum_{n,\tau} \tau d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + H.c. \quad (2.17)$$

onde $\tau = \pm$. Note que este hamiltoniano agora é diagonal no espaço de spin como desejado.

Agora vamos aplicar a troca de base dada pela eq. (2.6) para o hamiltoniano de elétrons livres H_0 . Para facilitar a troca de base é conveniente separar H_0 da seguinte forma:

$$H_0 = H_0^t + H_0^\mu \quad (2.18)$$

onde

$$H_0^t = -t \sum_{n,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n+1,\sigma} + H.c \quad (2.19)$$

$$H_0^\mu = -\mu \sum_{n,\sigma} c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \quad (2.20)$$

Realizando a soma em σ na eq. (2.19), temos:

$$H_0^t = -t \sum_n [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow}] + H.c.$$

Fazendo a mudança de base dada pelas eqs. (2.6), temos:

$$H_0^t = -t \sum_n \left[\frac{1}{2} (d_{n+}^\dagger - id_{n-}^\dagger) (d_{n+1+} + id_{n+1-}) + \frac{1}{2} (-id_{n+}^\dagger + d_{n-}^\dagger) (id_{n+1+} + d_{n+1-}) \right] + H.c. \quad (2.21)$$

$$H_0^t = -t \sum_n \left[\frac{1}{2} (d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + d_{n-}^\dagger d_{n+1-} + id_{n+}^\dagger d_{n+1-} - id_{n-}^\dagger d_{n+1+}) + \frac{1}{2} (d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + d_{n-}^\dagger d_{n+1-} - id_{n+}^\dagger d_{n+1-} + id_{n-}^\dagger d_{n+1+}) \right] + H.c.$$

$$H_0^t = -t \sum_n [d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + d_{n-}^\dagger d_{n+1-}] + H.c.$$

$$H_0^t = -t \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + H.c. \quad (2.22)$$

onde $\tau = +, -$ é o índice de spin na nova base.

Realizando a soma em σ da eq. (2.20):

$$H_0^\mu = -\mu \sum_n [c_{n\uparrow}^\dagger c_{n\uparrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n\downarrow}]$$

Fazendo a mudança de base dada pelas eqs. (2.6), temos:

$$H_0^\mu = -\mu \sum_n \left[\frac{1}{2} (d_{n+}^\dagger - id_{n-}^\dagger) (d_{n+} + id_{n-}) + \frac{1}{2} (-id_{n+}^\dagger + d_{n-}^\dagger) (id_{n+} + d_{n-}) \right]$$

Comparando com a eq. (2.21) podemos adaptar a eq. (2.22) para H_0^μ e escrever:

$$H_0^\mu = -\mu \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} \quad (2.23)$$

Substituindo as eqs. (2.22) e (2.23) na eq. (2.18):

$$H_0 = -t \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + H.c. - \mu \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} \quad (2.24)$$

Note que este hamiltoniano permanece diagonal no espaço de spin.

Hamiltoniano de interação spin-órbita de Rashba modulada

Vamos agora aplicar a mudança de base (2.6) ao hamiltoniano modulado H_{mod} dado pela eq. (2.5).

Para facilitar a troca de base, é conveniente separar H_{mod} da seguinte forma:

$$H_{mod} = H^\gamma + H^\mu \quad (2.25)$$

onde

$$H^\gamma = -i \sum_{n,\sigma,\sigma'} \gamma_R(n) c_{n,\sigma}^\dagger \sigma_{\sigma\sigma'}^y c_{n+1,\sigma'} + H.c. \quad (2.26)$$

$$H^\mu = - \sum_{n,\sigma} \mu(n) c_{n,\sigma}^\dagger c_{n,\sigma} \quad (2.27)$$

Reescrevendo a eq. (2.26) matricialmente

$$H^\gamma = -i \sum_n \gamma_R(n) \begin{pmatrix} c_{n\uparrow}^\dagger & c_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n+1\uparrow} \\ c_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} + H.c.$$

e fazendo esta operação obtemos:

$$H^\gamma = \sum_n \gamma_R(n) (-c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\uparrow}) + H.c.$$

Fazendo a mudança de base dada pela eq. (2.6), temos:

$$H^\gamma = \sum_n \left[-\gamma_R(n) \frac{e^{-i2\theta}}{2} (d_{n+}^\dagger - id_{n-}^\dagger) (id_{n+1+} + d_{n+1-}) + \gamma_R(n) \frac{e^{i2\theta}}{2} (-id_{n+}^\dagger + d_{n-}^\dagger) (d_{n+1+} + id_{n+1-}) \right] + H.c.$$

Após uma pequena álgebra:

$$H^\gamma = \frac{1}{2} \sum_n \left[-i\gamma_R(n) (e^{-i2\theta} + e^{i2\theta}) d_{n+}^\dagger d_{n+1+} + i\gamma_R(n) (e^{-i2\theta} + e^{i2\theta}) d_{n-}^\dagger d_{n+1-} - \gamma_R(n) (e^{-i2\theta} - e^{i2\theta}) d_{n+}^\dagger d_{n+1-} - \gamma_R(n) (e^{-i2\theta} - e^{i2\theta}) d_{n-}^\dagger d_{n+1+} \right] + H.c.$$

$$H^\gamma = -i \sum_n \left[\gamma_R(n) \cos 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1+} - \gamma_R(n) \cos 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1-} - \right]$$

$$-\gamma_R(n) \sin 2\theta d_{n+}^\dagger d_{n+1-} - \gamma_R(n) \sin 2\theta d_{n-}^\dagger d_{n+1+}] + H.c.$$

$$\begin{aligned} H^\gamma &= -i \sum_{n,\tau} \gamma_R(n) \cos 2\theta \tau d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + \\ &+ i \sum_{n,\tau} \gamma_R(n) \sin 2\theta d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,-\tau} + H.c. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Comparando as eqs.(2.27) e (2.20), podemos adaptar a eq. (2.23) e escrever H^μ diretamente como:

$$H^\mu = - \sum_{n,\tau} \mu(n) d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} \quad (2.29)$$

Substituindo as eqs. (2.28) e (2.29) na eq. (2.25), temos:

$$\begin{aligned} H_{mod} &= -i \sum_n \gamma_R(n) \cos 2\theta \tau d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + \\ &+ i \sum_n \gamma_R(n) \sin 2\theta d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,-\tau} - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{n,\tau} \mu(n) d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} + H.c. \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde usamos que $(H^\mu)^\dagger = H^\mu$ para escrever o hermitiano conjugado $H.c.$ no final da equação.

O hamiltoniano da eq. (2.30) é quase diagonal no espaço de spin exceto pelo termo multiplicado por $\sin 2\theta$. O termo não-diagonal traz uma consequência muito importante: a inversão de spin. O efeito deste termo ficará mais claro adiante na análise dos autoestados.

Recombinando as eqs. (2.24), (2.17) e (2.30) podemos escrever o hamiltoniano total na nova base de spins da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} - \frac{\mu}{2} \sum_{n,\tau} d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} - i\gamma_{eff} \sum_{n,\tau} \tau d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} - \\ &- i \sum_n \gamma_R(n) \cos 2\theta \tau d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + i \sum_n \gamma_R(n) \sin 2\theta d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,-\tau} - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{n,\tau} \mu(n) d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} + H.c. \end{aligned} \quad (2.31)$$

2.2.2 Solução exata do hamiltoniano de elétrons não interagentes e sem modulação

Desconsiderando as interações elétron-elétron e assumindo que não há um campo elétrico modulado presente, podemos resolver exatamente a teoria

$$H_0 + H_{DR} = \sum_{n,\tau} [(-t - i\tau\gamma_{eff})d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} - \frac{\mu}{2}d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} + H.c.]$$

passando do espaço direto para o espaço recíproco.

Para solucionar esta equação, é conveniente separá-la da seguinte forma $H_0 + H_{DR} = H_\gamma + H_\mu$, onde:

$$H_\gamma = \sum_{n,\tau} [(-t - i\tau\gamma_{eff})d_{n,\tau}^\dagger d_{n+1,\tau} + H.c.] \quad (2.32)$$

e

$$H_\mu = -\frac{\mu}{2}d_{n,\tau}^\dagger d_{n,\tau} + H.c. \quad (2.33)$$

Vamos aplicar a seguinte transformada de Fourier sobre os operadores $d_{n,\tau}$:

$$d_{n,\tau} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k d_{k,\tau} e^{ikna} \quad (2.34)$$

Com isso, obtemos:

$$H_\gamma = \sum_{n,\tau} (-t - i\tau\gamma_{eff}) \times \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k d_{k,\tau}^\dagger e^{-ikna} \times \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} d_{k',\tau} e^{ik'na} e^{ik'a} + H.c.$$

$$H_\gamma = \sum_{n,\tau} (-t - i\tau\gamma_{eff}) \times \frac{1}{N} \sum_{k,k'} d_{k,\tau}^\dagger d_{k',\tau} e^{ik'a} e^{i(k'-k)na} + H.c.$$

Podemos agora aplicar a relação válida para a delta de Kronecker:

$$\frac{1}{N} \sum_n e^{i(k'-k)na} = \delta_{k'-k,0} \quad (2.35)$$

e obter:

$$H_\gamma = \sum_\tau (-t - i\tau\gamma_{eff}) \sum_{k,k'} d_{k,\tau}^\dagger d_{k',\tau} e^{ik'a} \delta_{k'-k,0} + H.c.$$

Realizando a soma em k' e explicitando o Hermitiano conjugado:

$$H_\gamma = \sum_{k,\tau} (-t - i\tau\gamma_{eff}) d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau} e^{ika} + (-t + i\tau\gamma_{eff}) d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau} e^{-ika}$$

$$H_\gamma = 2 \sum_{k,\tau} (t \cos(ka) - \tau\gamma_{eff} \sin(ka)) d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau}$$

Agora fazendo a transformada de Fourier (2.34) para (2.33):

$$H_\mu = -\frac{\mu}{N} \sum_{n,\tau} \sum_{k,k'} d_{k,\tau}^\dagger e^{-ikna} d_{k',\tau} e^{ik'na}$$

Separando os termos que dependem de n :

$$H_\mu = -\mu \sum_{k,k',\tau} d_{k,\tau}^\dagger d_{k',\tau} \times \frac{1}{N} \sum_n e^{i(k'-k)na}$$

Aplicando a eq. (2.35) e realizando a soma em k' :

$$H_\mu = -\mu \sum_{k,\tau} d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau} \quad (2.36)$$

Finalmente obtemos:

$$H_0 + H_{DR} = 2 \sum_{k,\tau} (t \cos(ka) - \tau\gamma_{eff} \sin(ka)) d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau} - \mu \sum_{k,\tau} d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau}$$

Podemos reescrever a equação acima da seguinte forma

$$H_0 + H_{DR} = \sum_{k,\tau} E_\tau(k) d_{k,\tau}^\dagger d_{k,\tau},$$

onde

$$E_\tau(k) = -2\tilde{t} \cos[(k + \tau q_0)a] - \mu \quad (2.37)$$

com $\tilde{t} = \sqrt{t^2 + \gamma_{eff}^2}$ e $q_0 a = \arctan(\gamma_{eff}/t)$.

A eq. (2.37) dá as autoenergias do hamiltoniano $H_0 + H_{DR}$ em função do numero de onda k e para cada orientação de spin τ .

Na ausência das interações spin-órbita de Rashba e de Dresselhaus, ou seja, tomando $\gamma_{eff} = 0$ na eq. (2.37), obtemos:

$$E(k) = -2t \cos(ka) - \mu \quad (2.38)$$

A equação acima fornece as autoenergias do hamiltoniano H_0 que são degeneradas na variável de spin. Percebemos então que o efeito das interações spin-órbita uniformes é de levantar a degenerescência de spin, deslocando a banda de energia de spin *up* ($\tau = +$) para a esquerda e a banda de energia de spin *down* ($\tau = -$) para a direita em relação à banda degenerada para elétrons livres. A Fig. 10 ilustra esse processo. Na figura, E_F é a energia de Fermi correspondente ao último nível energético ocupado quando o sistema é preenchido a uma densidade $N_e/2N$, onde N_e é o número de elétrons no fio, e $k_f = \pi N_e/(2Na)$ é o número de onda de Fermi.

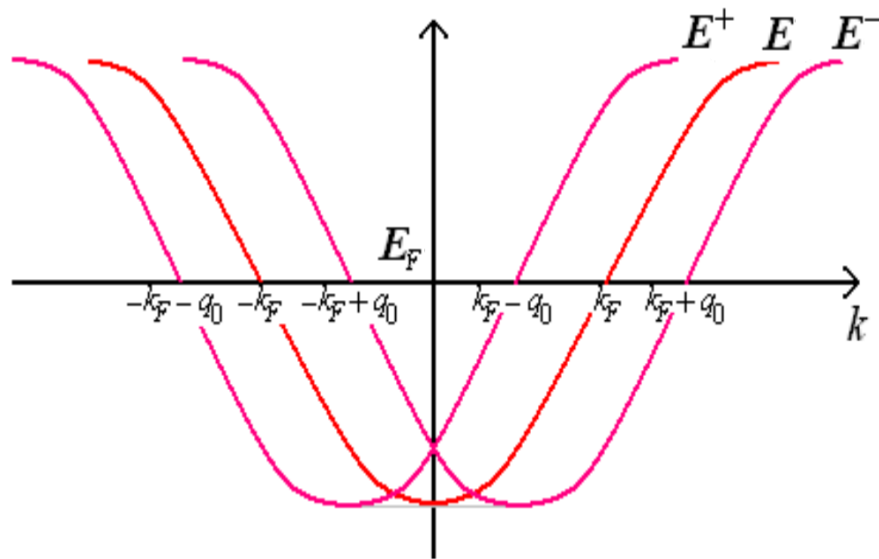


Figura 10 – A curva vermelha E representa a banda de energia degenerada em spin para elétrons livres. As curvas rosas E^- e E^+ são as bandas de energia na presença das interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus uniformes para as duas orientações de spin.

2.3 Tratamento computacional

Com o progresso das capacidades computacionais a partir da segunda metade do século passado, os métodos numéricos ganharam destaque no tratamento de problemas físicos pois são capazes de solucionar com certa precisão o que analiticamente seria inviável. Neste trabalho, utilizamos a linguagem de programação C que, apesar de criada em 1972 por Dennis Ritchie [21], ainda é uma das mais utilizadas para diagonalização de matrizes. Para otimizar a performance de nosso código, utilizamos rotinas de cálculos numéricos fornecidos pela *Intel Math Kernel Library* (MKL) [22].

O primeiro passo para resolução numérica que iremos desenvolver é escrever o hamiltoniano da eq. (2.31) na forma matricial:

$$\mathbf{H} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc|cccc} & 1 & 2 & \dots & N & 1 & 2 & \dots & N \\ \hline & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ \hline & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \\ & & & & & & & & \end{array} \\ \begin{array}{l} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ N \\ 1 \\ 2 \\ \vdots \\ N \end{array} \end{array} \begin{array}{l} \mathbf{H}^{++} \\ \mathbf{H}^{+-} \\ \mathbf{H}^{-+} \\ \mathbf{H}^{--} \end{array}$$

onde

$$\mathbf{H}^{++} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc|cccc} CP & SO_S^{++} & & & & & & & \\ SO_I^{++} & \ddots & \ddots & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & SO_I^{++} & CP & SO_S^{++} & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & & SO_S^{++} & \\ & & & & & & & SO_I^{++} & CP \end{array} \\ \begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array} \end{array}$$

$$\mathbf{H}^{--} = \begin{array}{c} \begin{array}{cccc|cccc} CP & SO_S^{--} & & & & & & & \\ SO_I^{--} & \ddots & \ddots & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & SO_I^{--} & CP & SO_S^{--} & & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & & & & SO_S^{--} & \\ & & & & & & & SO_I^{--} & CP \end{array} \\ \begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array} \end{array}$$

- Coleta dos autovalores e autovetores, resultados da diagonalização e armazenamento dos dados obtidos para serem interpretados.

A partir deste ponto, utilizamos o programa *Gnuplot* para traçar os gráficos a partir dos dados obtidos e assim poder analisá-los.

3 Resultados

Através dos métodos computacionais descritos anteriormente diagonalizamos a matriz hamiltoniana que descreve o sistema estudado, obtendo os correspondentes autovalores (autoenergias) e autovetores (autoestados). A análise das autoenergias nos permite construir a estrutura de bandas do sistema, entender o processo de abertura de gaps e como o mesmo é afetado pela intensidade e pela periodicidade da modulação externa. A estrutura dos autoestados reflete, através da formação de ondas de densidade de carga (*charge density waves*), as transições metal-isolante observadas no espectro de autoenergias. Realizamos um estudo de caso utilizando dados experimentais publicados na literatura a fim de testar a viabilidade de realização do dispositivo proposto.

3.1 Análise das autoenergias - Estrutura de bandas

3.1.1 Hamiltoniano de elétrons livres

Como um primeiro teste sobre a validade do código numérico, analisamos o sistema 1D de elétrons livres cuja solução exata é conhecida: um espectro de energias cossenoidal e sem gaps dado pela eq. (2.38). O hamiltoniano de entrada para o programa é dado pela eq. (2.31) tomando todos os parâmetros iguais a zero exceto o *hopping* t e o potencial químico μ .

Diagonalizando numericamente este hamiltoniano, obtemos suas autoenergias e correspondentes autoestados. O primeiro gráfico da Fig. 11 mostra as autoenergias distribuídas em ordem crescente.

De acordo com o esperado para um sistema 1D de elétrons livres, obtemos na Fig. 11 uma banda de energia contínua e com perfil cossenoidal. Porém, diferente de um gráfico de lei de dispersão usual que mostra energia *versus* número de onda k , aqui o eixo das abscissas indexa os autoestados quânticos correspondentes a cada autoenergia. Cada autoestado na Fig. 11 é descrito por um valor de k e de spin, de modo que este gráfico corresponde à lei de dispersão usual com a metade negativa do eixo k dobrada sobre a metade positiva.

O segundo gráfico da Fig. 11 mostra um zoom centrado no milésimo estado do gráfico acima. Vemos a esperada quádrupla degenerescência na energia que corresponde à simetria do hamiltoniano de elétrons livres em relação à inversão na direção do movimento ($k \rightarrow -k$) e na orientação do spin ($s \rightarrow -s$).

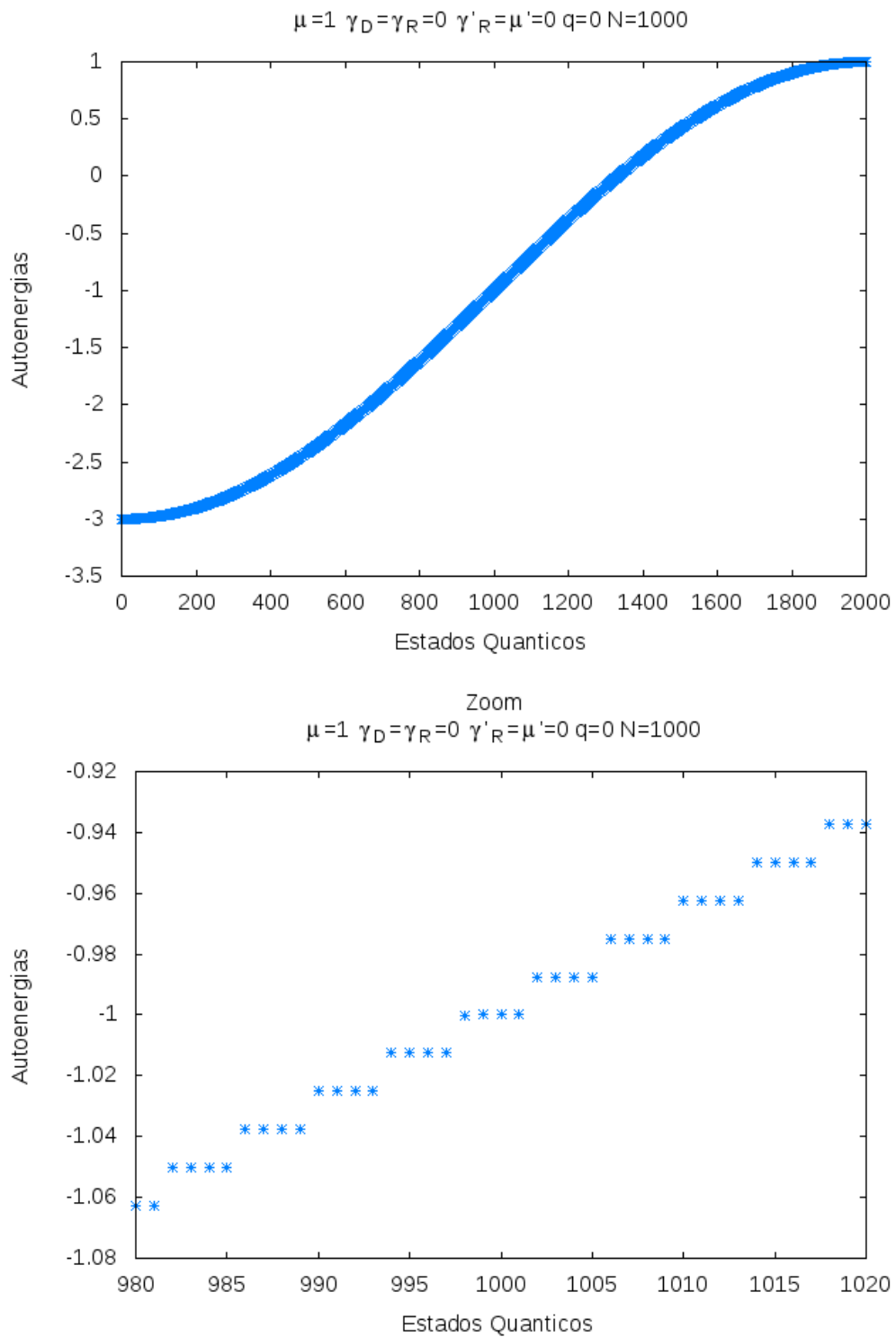


Figura 11 – **Acima:** Estrutura de bandas de um sistema 1D de elétrons livres, ou seja, sem modulação externa, acoplamento spin-órbita e interação entre elétrons. **Abaixo:** Zoom em torno no milésimo estado evidenciando a quádrupla degenerescência das autoenergias.

3.1.2 Hamiltoniano de spin-órbita uniforme

Agora consideraremos a eq. (2.31) tomando $\gamma_r(n) = \mu(n) = 0$ a fim de analisar o efeito das interações spin-órbita uniformes. A solução exata deste hamiltoniano também é conhecida e é dada pela eq. (2.37). A Fig. 12 mostra nossa solução numérica para este caso.

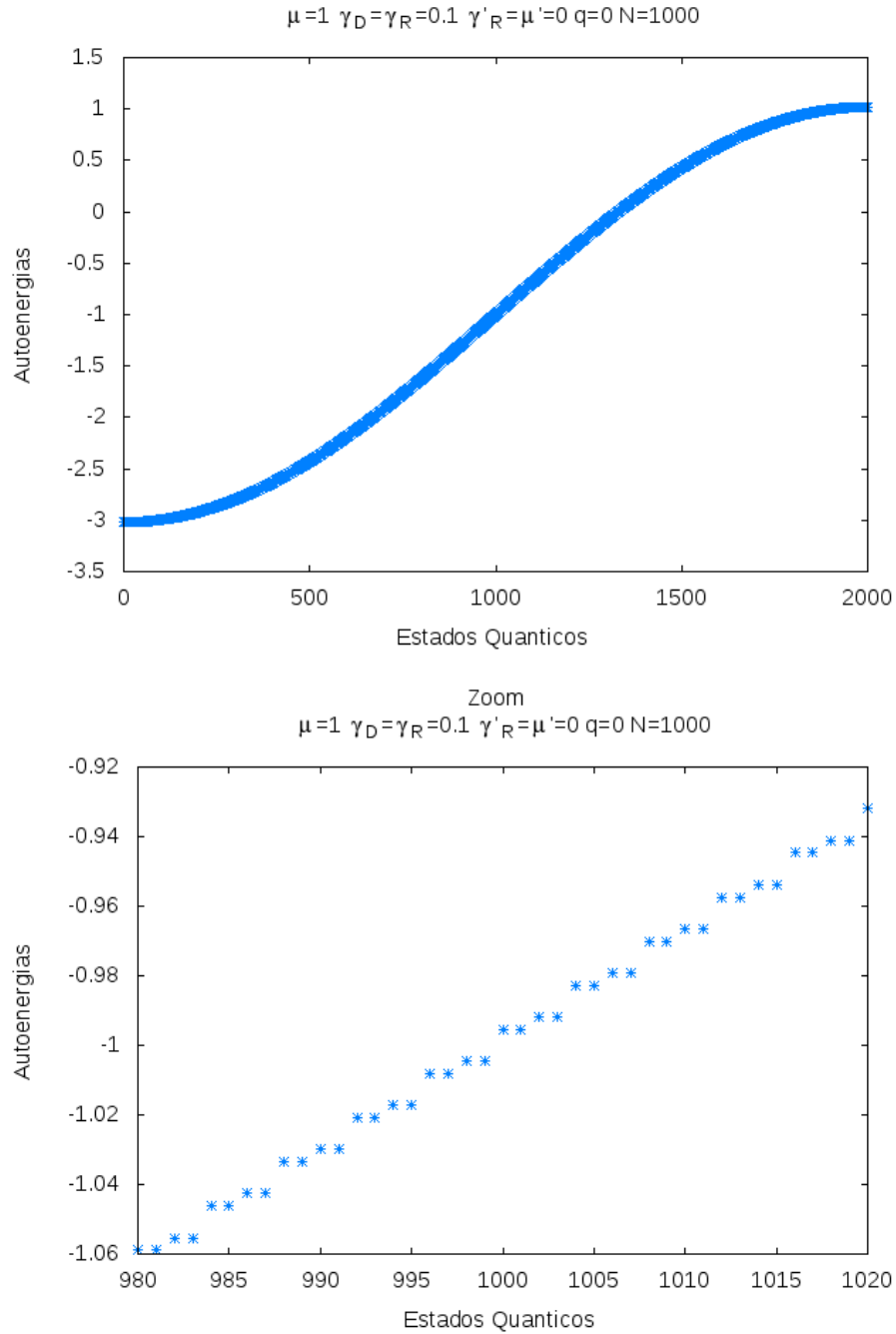


Figura 12 – **Acima:** Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e Dresselhaus uniformes. **Abaixo:** Zoom em torno no milésimo estado mostrando a quebra da quádrupla em dupla degenerescência.

Em concordância com o resultado exato da eq. (2.37), podemos ver um perfil de banda cossenoidal e uma banda contínua de energia, ou seja, sem gaps. E , como mostrado na Fig. 12, agora temos estados duplamente degenerados na energia, ao invés da quádrupla degenerescência para elétrons livres (Seção 3.1.1). Para compreender melhor a quebra da degenerescência, voltemos às eqs. (2.38) e (2.37) que descrevem o espectro para elétrons livres e sob interações spin-órbita uniformes, respectivamente. A origem da quebra da degenerescência está no argumento do cosseno na eq. (2.37) que, devido às interações spin-órbita, se torna dependente do spin. A Fig 13 ilustra este processo da quebra da degenerescência da energia de quádrupla em dupla.

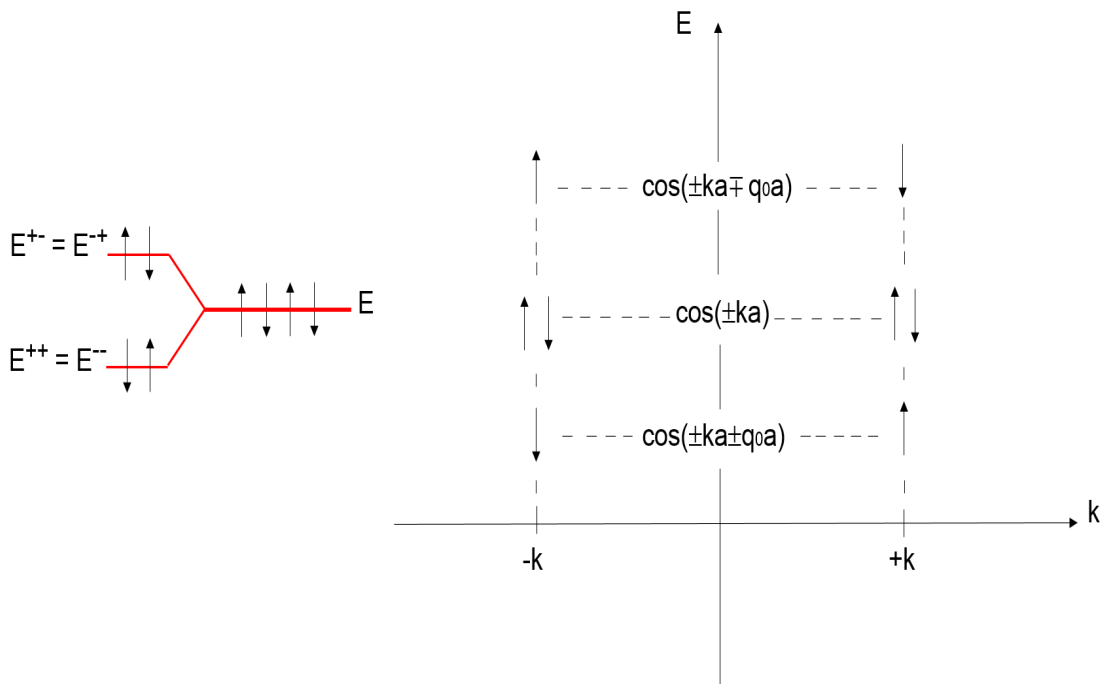


Figura 13 – Quebra da degenerescência devido às interações spin-órbita uniformes.

3.1.3 Hamiltoniano modulado - transição de fase metal-isolante

Agora vamos investigar numericamente o hamiltoniano completo dado pela eq. (2.31). Malard et. al. [12] mostraram que, na presença da interação spin-órbita de Rashba e do potencial químico modulados, acontece uma transição de fase metal-isolante manifestada pela abertura de um gap na estrutura de bandas quando o número de onda da modulação externa e o número de onda de Fermi no fio satisfazem $Q = 2k_F$, onde $k_F = \pi N_e / (2Na)$ e $N_e / 2N$ é a densidade de elétrons no fio.

Investigaremos a abertura de gaps na estrutura de bandas para os seguintes valores do número de onda da modulação externa $q = 0.1, 0.2, \dots, 0.9$ onde $q = (a/2\pi)Q$. Não consideramos $q = 1$ pois este caso equivale a ausência de modulação como pode ser visto tomando $Q = 2\pi/a$ em $\cos(Qna)$ que modula os parâmetros da eq. (2.31).

Dos valores considerados, apenas os valores de $q \leq 0.5$ representam sistemas físicos. Observando que o comprimento de onda da modulação externa $\lambda = 2\pi/Q$ e que $\lambda = 2d$, temos que $d/a = 1/(2q)$. Tomando $q = 0.5$, obtemos $d = a$, ou seja, o tamanho dos capacitores está em escala atômica. Para $q > 0.5$, os capacitores seriam subatômicos. Apesar de não representarem sistemas físicos, os valores de $q > 0.5$ apresentam uma interessante simetria matemática com os valores físicos $q < 0.5$ e por isso apresentaremos os pares simétricos adiante.

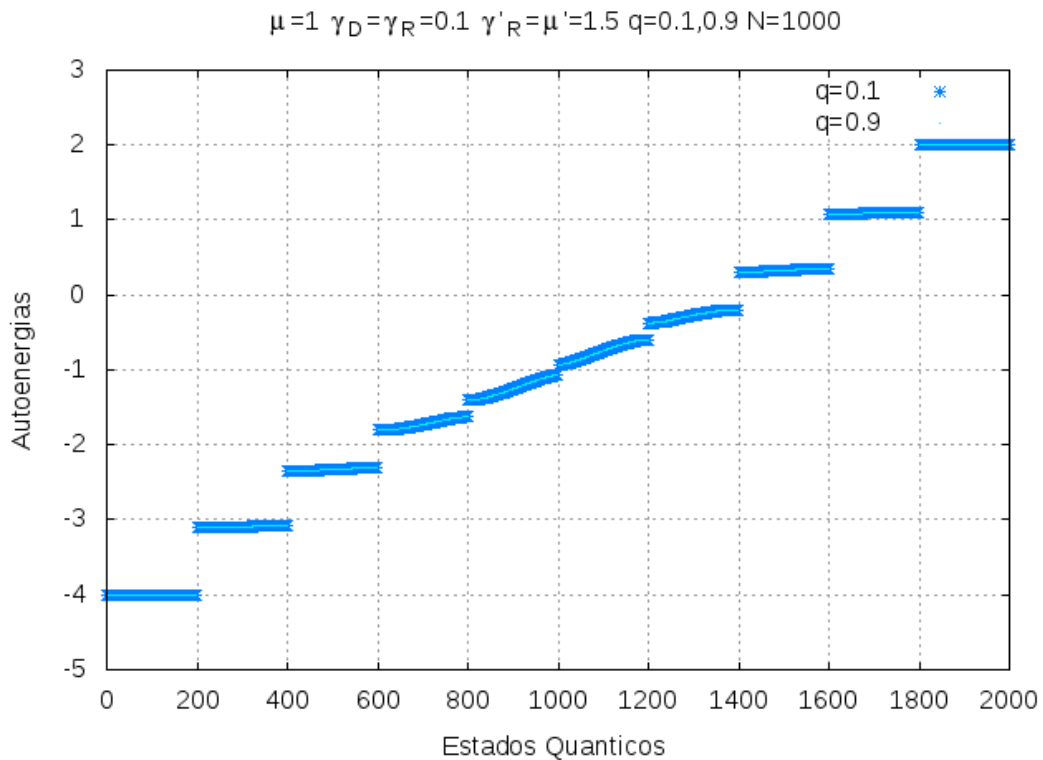


Figura 14 – Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados para $\gamma'_R = \mu' = 1.5$ e $q = 0.1, 0.9$.

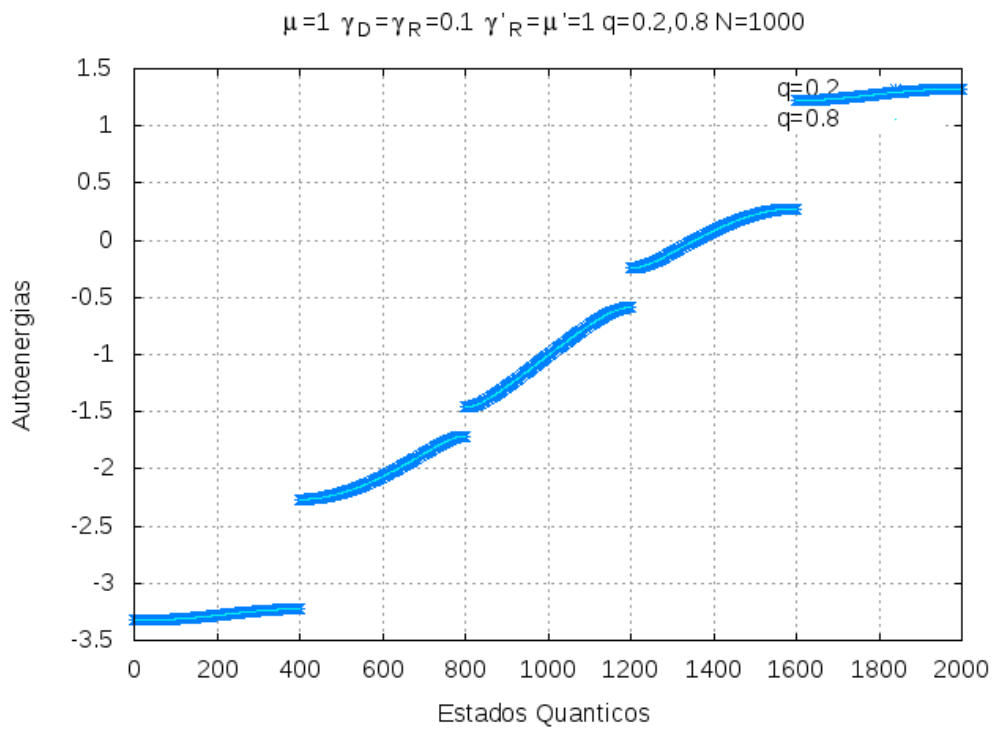


Figura 15 – Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados para $\gamma'_R = \mu' = 1$ e $q = 0.2, 0.8$.

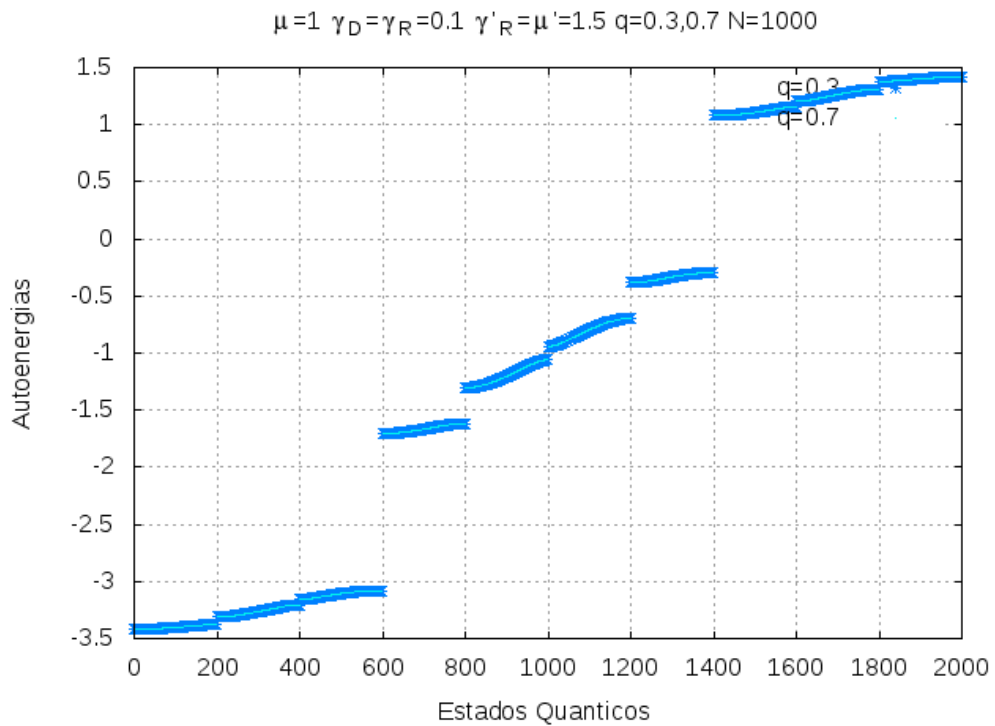


Figura 16 – Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados para $\gamma'_R = \mu' = 1.5$ e $q = 0.3, 0.7$.

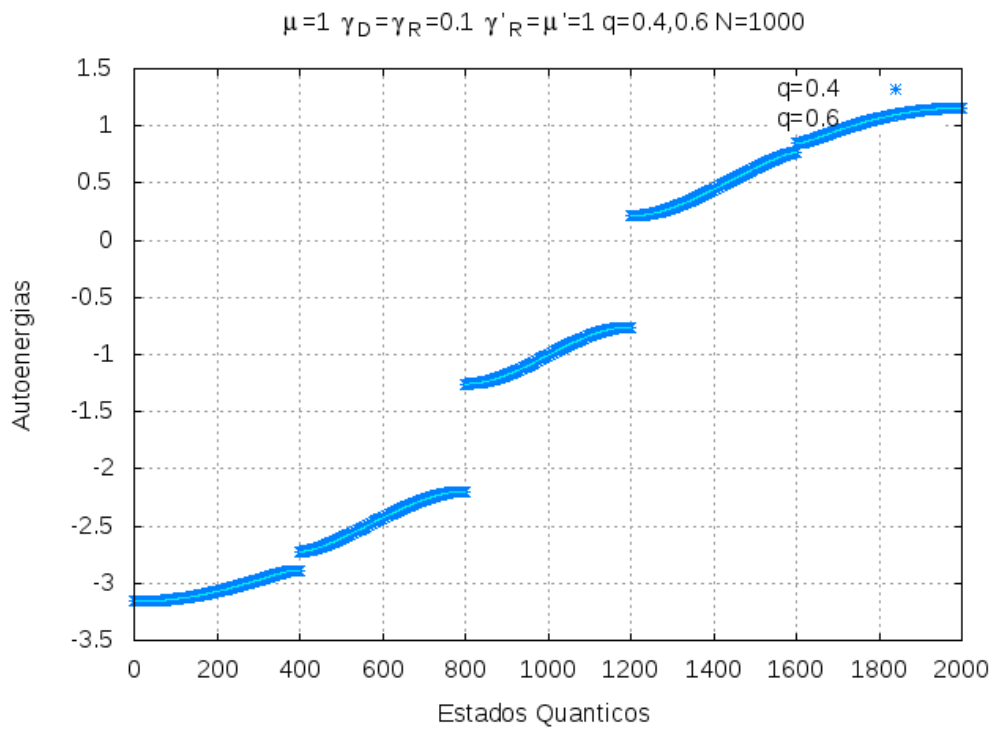


Figura 17 – Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados para $\gamma'_R = \mu' = 1$ e $q = 0.4, 0.6$.

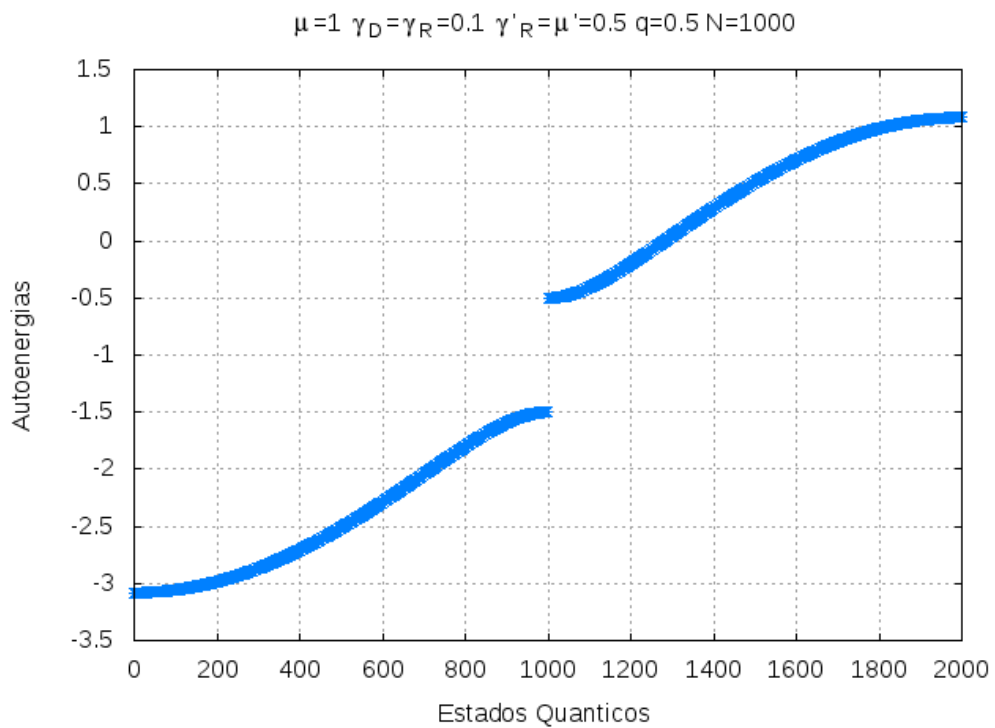


Figura 18 – Estrutura de bandas na presença das interações spin-órbita de Rashba e potencial químico modulados para $\gamma'_R = \mu' = 0.5$ e $q = 0.5$.

Nas Figs. 14 - 17, observamos a abertura de múltiplos gaps distribuídos uniformemente ao longo do espectro de energias. Vemos que a quantidade e o número de gaps depende do número de onda q da modulação externa e que valores de q simétricos em relação à 0.5 geram espectros iguais. A Fig. 18 mostra o espectro para $q = 0.5$ que representa o limite físico para o número de onda da modulação externa. Neste caso, observamos apenas um gap no meio da banda. Finalmente, notamos que na presença da modulação externa, há um aumento na largura da banda de energia em relação ao sistema uniforme como pode ser visto comparando-se os intervalos de energia das Figs. 12 e 14-18. Este aumento é esperado pois as interações moduladas introduzem mais uma fonte de energia no sistema.

No trabalho analítico de Malard et. al. [12], o gap isolante era interpretado como sendo gerado dinamicamente no nível de Fermi quando a condição de preenchimento $Q = 2k_F$ era satisfeita. Em particular, sendo baseado na linearização do espectro em torno do nível de Fermi, o formalismo analítico é capaz de detectar a presença apenas deste gap. As simulações revelam, ao contrário, uma coleção de gaps estruturais em oposição a um único gap aberto dinamicamente quando o preenchimento da rede atinge determinado valor. Os gaps são estruturais pois o preenchimento da rede não é um parâmetro de entrada do código numérico com qual diagonalizamos o hamiltoniano que descreve o sistema. Estes gaps estruturais surgem nas bordas de zonas de Brillouin reduzidas definidas pela periodicidade da rede externa de capacitores, como explicaremos abaixo.

Devido ao campo periódico aplicado externamente, as zonas de Brillouin do sistema serão modificadas em relação às do cristal puro. As fronteiras das novas zonas de Brillouin serão determinadas pela periodicidade de $\cos(Qna)$ que modula o potencial externo. Lembrando que $Q = (2\pi/a)q$ e tomando $q = p/r$ uma fração reduzida em termos de inteiros p e r , vemos que a periodicidade do cosseno é igual a r .

Em um cristal puro, as fronteiras das zonas de Brillouin ocorrem em $\pm k = \pm k_{zb} = \pm m\pi/a$, onde $m = 1, 2, \dots$. As bordas das zonas de Brillouin reduzidas pela modulação externa de período r estarão em:

$$\pm k = \pm k_{zb} = \pm \frac{m\pi}{ra}$$

O tamanho finito Na do fio implica que o espaço recíproco é discreto e $\pm k = \pm k_n = \pm(2\pi/Na)n$, com $n = 1, 2, \dots, N$. Substituindo esta relação na equação acima obtemos

$$n_{zb} = m \frac{N}{2r} \quad m = 1, 2, \dots$$

onde n_{zb} são os números inteiros associados às fronteiras das zonas de Brillouin reduzidas.

A cada número de onda k , ou seja, a cada inteiro n , correspondem quatro elétrons: $|k \uparrow\rangle, |k \downarrow\rangle, |-k \uparrow\rangle, |-k \downarrow\rangle$. Sendo assim, o número total de elétrons N_e^{zb} até as fronteiras das zonas de Brillouin reduzidas é dado por:

$$N_e^{zb} = 4n_{zb} = 2m \frac{N}{r} \quad (3.1)$$

Como podemos ver, as posições dos gaps nos gráficos das Figs. 14 a 18 satisfazem a relação dada na eq. (3.1). Nas Figs. 14 e 16, temos o valor do número de onda da modulação externa $q = 0.1 = 1/10$ e $q = 0.3 = 3/10$, respectivamente; logo para estes casos $r = 10$. Substituindo este valor na eq. (3.1) com $N = 1000$ vemos que os gaps se abrem a cada 200 estados quânticos. Porém, note que os perfis das bandas dos casos $q = 0.3$ e $q = 0.1$ são diferentes assim como os tamanhos dos gaps. Isto é esperado já que valores diferentes da modulação externa q representam sistemas diferentes.

Nas Figs. 14 e 16, tomamos $\gamma'_R = \mu' = 1.5$ que é o menor valor para estes parâmetros com o qual todos os gaps são visíveis, embora alguns sejam ainda bem pequenos. Se aumentarmos os valores de γ'_R e μ' além de 1.5, os gaps ficam mais evidentes, porém as bandas de energia começam a ficar planas (*flat bands*). De fato, já para $\gamma'_R = \mu' = 1.5$, o caso $q = 0.1, 0.9$ já apresenta bandas planas no começo e no final do espectro, como pode ser visto na Fig. 14. Estas bandas planas são níveis energéticos altamente degenerados que, por isso, possuem algumas propriedades não usuais que serão investigadas em pesquisas futuras.

Agora, nas Figs. 15 e 17, temos $q = 0.2 = 1/5$ e $q = 0.4 = 2/5$; logo $r = 5$. Substituindo este valor com $N = 1000$ na eq. (3.1), vemos que os gaps se abrem a cada 400 estados quânticos. Assim como no caso anterior, note que o perfil das bandas dos casos $q = 0.2$ e $q = 0.4$ são diferentes, bem como os tamanhos dos gaps. Note que agora tomamos $\gamma'_R = \mu' = 1$, e que este valor é suficiente para identificar todos os gaps. Comparando com o caso anterior, isso quer dizer que, quanto menos bandas de energia (consequentemente menos gaps), menores os valores de γ'_R e μ' necessários para visualizar todos os gaps.

Finalmente, substituindo na eq. (3.1) $r = 2$ e $N = 1000$, temos o caso $q = 0.5 = 1/2$ da Fig. 18 com um único gap se abrindo no milésimo estado quântico, isto é, no meio da banda. Neste caso, tomamos $\gamma'_R = \mu' = 0.5$ e este valor já é suficiente para visualizar o gap.

É interessante compararmos a condição de abertura de gap do trabalho analítico [12] com as condições numéricas dadas pela eq. (3.1) para o sistema estar em uma das fronteiras de um gap. A condição analítica $Q = 2k_F$ pode ser reescrita, utilizando das

relações anteriores, da seguinte forma:

$$\frac{2\pi}{a}q = \frac{2\pi}{a} \frac{N_e}{2N}$$

$$N_e = 2p \frac{N}{r} \quad (3.2)$$

Comparando as eqs. (3.1) e (3.2) podemos ver que quando $m = p$ as condições analítica e computacional coincidem, ou seja, referem-se ao mesmo gap. Isto nos mostra que o trabalho numérico recupera o resultado obtido analiticamente e ainda revela a existência de outros gaps. Aqui, é importante ressaltar mais uma vez a diferença de interpretação para os gaps do trabalho analítico [12] em relação aos resultados numéricos. Como já dissemos anteriormente, no trabalho analítico, o próprio aparecimento do gap estava condicionado a um determinado preenchimento da rede tal que $Q = 2k_F$. Nesta condição, uma transição de fase metal-isolante era obtida. Aqui, podemos compreender os gaps e as transições de fase a partir da interpretação usual em teoria de bandas. Em situações onde o preenchimento da banda é parcial, o sistema se encontra em uma fase metálica. Já para situações onde o preenchimento da banda é total, quando atinge a fronteira de um gap, o sistema passa a ser isolante. Podemos então compreender a dinâmica de transição de fase metal-isolante a partir do controle do preenchimento da banda passando pelos gaps. Estas transições de fase metal-isolante controladas externamente equivalem a uma chave de corrente baseada no grau de liberdade de spin, isto é, um transistor de spin.

Na próxima seção, iremos analisar e discutir a dependência do tamanho do gap com a intensidade dos parâmetros modulados, ou seja, do campo externo.

3.1.4 Dependência do gap dos parâmetros modulados

Assim como discutido no trabalho analítico [12], podemos estudar a influência dos parâmetros modulados nos gaps à medida que aumentamos a intensidade do campo elétrico externo. A fim de comparar com o resultado analítico, analisaremos o gap numérico que coincide com aquele dado pela condição analítica, ou seja, tomando $m = p$ na eq. (3.1). Na Fig. 19, mostramos o gap em função da intensidade γ'_R da interação Rashba modulada (que, como já dissemos, varia linearmente com o campo elétrico) para diferentes valores de q . Cada valor de q corresponde a um preenchimento da rede, com $q = N_e/(2N)$ tomando $m = p$ na eq. (3.1) e lembrando que $q = p/r$. No gráfico, a amplitude μ' do potencial químico modulado acompanha a variação de γ'_R . Isto reflete o fato de que ambos os parâmetros variam linearmente com a intensidade do campo elétrico externo. O lado direito do gráfico corresponde à interação spin-órbita

de Rashba e potencial químico modulados em fase e o lado esquerdo fora de fase conforme explicado na seção 2.1 e ilustrado na Fig. 9.

No gráfico, observamos que em ambos os lados "em fase" e "fora de fase" o gap é uma função linear crescente de γ'_R com inclinação dependente do preenchimento da rede q . Este resultado é consistente com a expectativa de que quanto mais intensa a interação de Rashba modulada, maiores os gaps [12,23]. A Fig. 19 mostra também que, quando os potenciais modulados estão fora de fase, a taxa de aumento do gap é menor. Isso nos mostra que o efeito localizante é maior quando os parâmetros atuam em conjunto, o que está de acordo com a fenomenologia esperada e com os resultados analíticos [12].

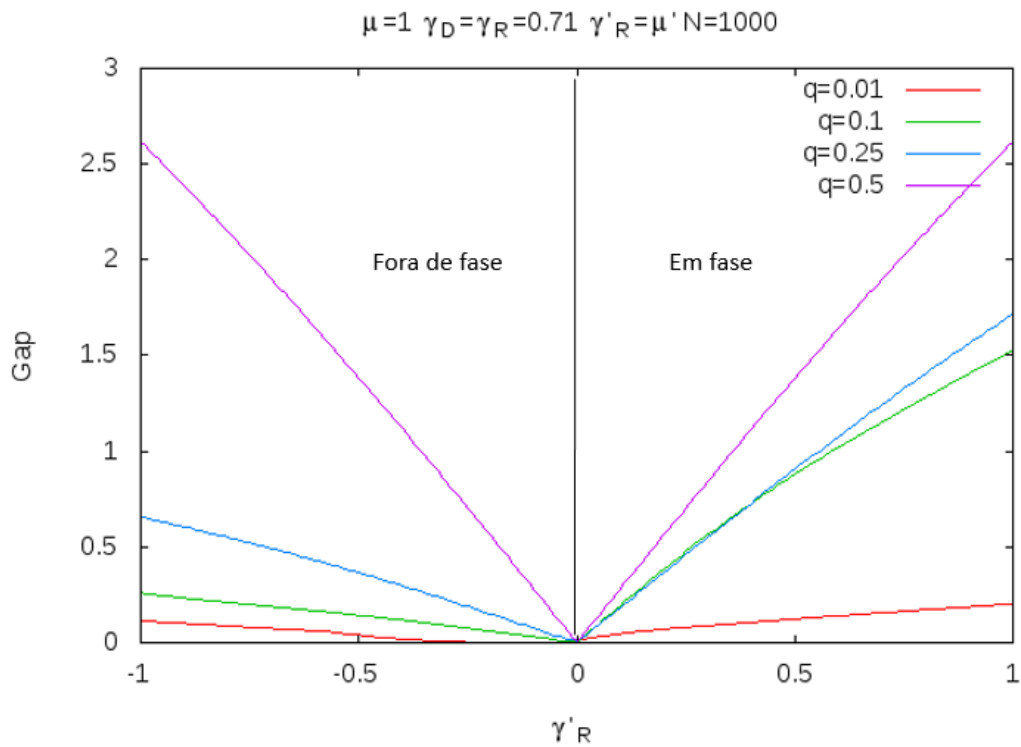


Figura 19 – Gap em função da intensidade da interação de Rashba modulada γ'_R .

Na Fig. 20, mostramos o gap em função da intensidade da interação de Rashba modulada γ'_R , mas agora mantendo a amplitude μ' do potencial químico fixa em 1. Da mesma forma que na Fig. 19, o lado direito do gráfico corresponde aos potenciais modulados em fase e o lado esquerdo, fora de fase.

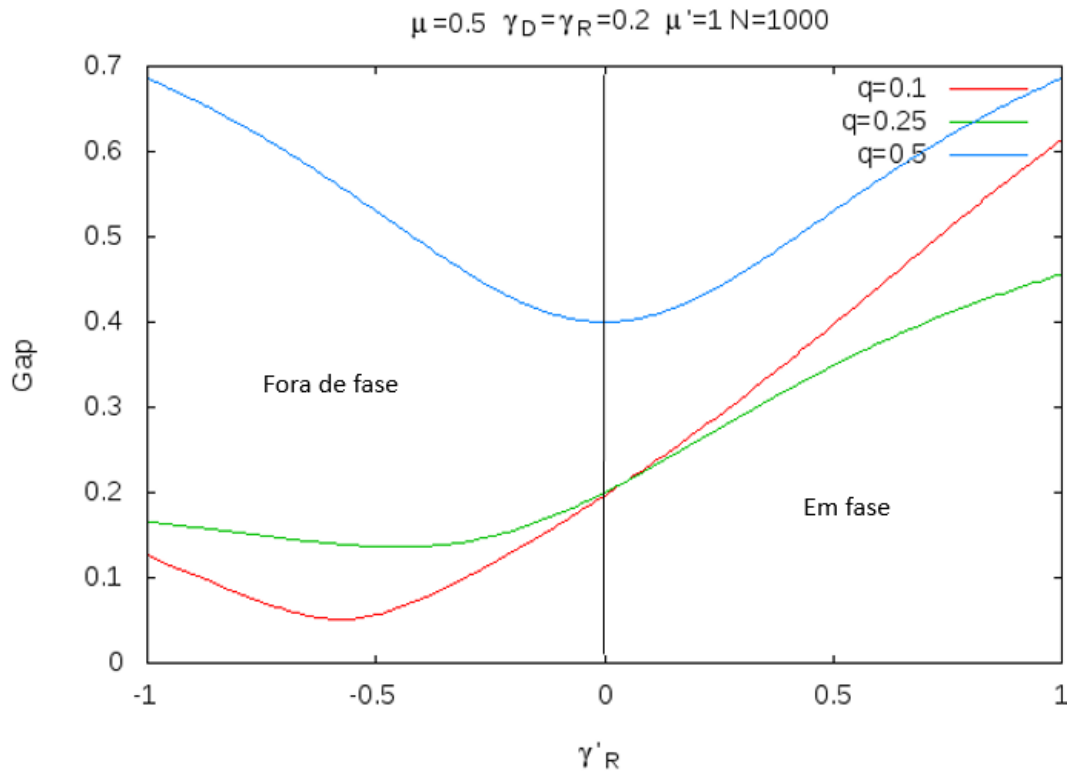


Figura 20 – Gap em função da intensidade da interação de Rashba modulada γ'_R com $\mu' = 1$.

No lado direito do gráfico, observamos que conforme a intensidade da interação de Rashba aumenta, o gap também aumenta. Este resultado é consistente com o obtido na Fig. 19. Já no lado esquerdo do gráfico, onde os potenciais estão fora de fase, observamos um comportamento inusitado: o gap inicialmente decresce com a intensidade da interação de Rashba modulada até atingir um valor mínimo a partir do qual o comportamento crescente "normal" é recuperado. Este comportamento está de acordo com o obtido por Malard et. al. [12] que o chamaram de *crossover*. Também em concordância com Malard et. al., a Fig. 20 mostra que o *crossover* é mais pronunciado para valores menores de q , ou seja, para sistemas mais diluídos. Para $q = 0.1$, por exemplo, o *crossover* encolhe o gap significativamente próximo à $\gamma'_R = -0.5$.

Apesar de contra-intuitivo em um primeiro momento, o regime de *crossover* (que contém uma faixa onde o gap diminui com o aumento da intensidade do potencial localizante) pode ser entendido da seguinte forma: Quando $\gamma'_R = 0$ e $\mu' = 1$, todos os elétrons se encontram aglomerados nos poços de potencial químico, pois esta configuração de carga minimiza a energia do sistema. Este estado localizado de elétrons é sustentado por um gap de aproximadamente 0.2 (em unidade de *hopping* t), como mostra a Fig. 20. A Fig. 21 ilustra este estado de cargas localizadas nas regiões de mínimo de potencial químico.

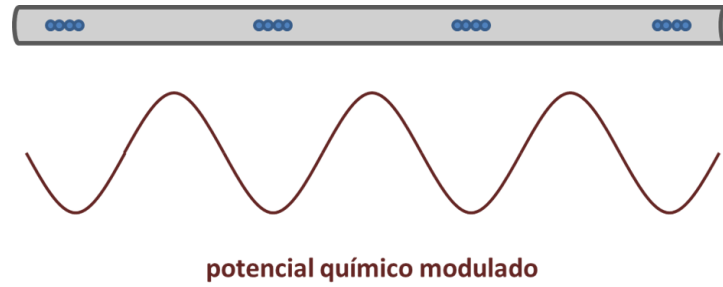


Figura 21 – Elétrons aglomerados nos poços de potencial químico modulado na ausência de interação de Rashba modulada.

Quando a interação de Rashba modulada é ligada, alguns elétrons migram para os poços de Rashba de modo a minimizar a energia de repulsão coulombiana e a interação de troca (princípio de exclusão de Pauli), como mostrado na Fig 22. Isso enfraquece o efeito de localização do potencial químico e, conseqüentemente, o gap diminui, como pode ser visto na Fig. 20.

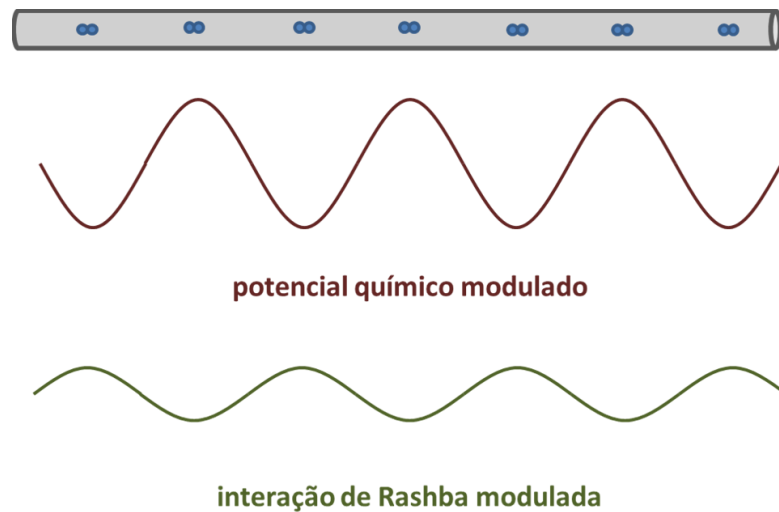


Figura 22 – Ligando a interação de Rashba fora de fase com o potencial químico. Alguns elétrons se movem para os poços de Rashba.

Conforme continuamos a aumentar a intensidade da interação de Rashba modulada, cada vez mais elétrons migram para os poços de Rashba até que, para um valor suficientemente grande de γ'_R , correspondente ao mínimo da curva de gap na Fig. 20, todos os elétrons estarão aglomerados nos poços de Rashba. Esta configuração de carga é ilustrada na Fig. 23. Deste ponto em diante, o gap passa a aumentar a medida que os poços de Rashba vão ficando cada vez mais profundos, como mostrado na Fig. 20. O valor de γ'_R necessário para uma completa migração entre os poços de

potencial químico e os poços de Rashba (pontos de mínimo de gap) é menor para sistemas mais densos, conforme podemos ver comparando as curvas da Fig. 20. Para o preenchimento $q = 0.5$ cujo gap é simétrico em torno de $\gamma'_R = 0$, os poços de potencial químico são esvaziados imediatamente para qualquer valor não nulo de γ'_R . Este sistema possui um capacitor a cada dois sítios e, com isso, é vantajoso para o elétron migrar imediatamente para o poço de Rashba (embora raso) localizado no sítio vizinho a um baixo custo energético (apenas um *hopping*). Já em sistemas mais diluídos, o custo energético para migrar entre poços mais distantes é maior (vários *hopping*) e, por isso, este pulo só acontece para poços de Rashba mais profundos.

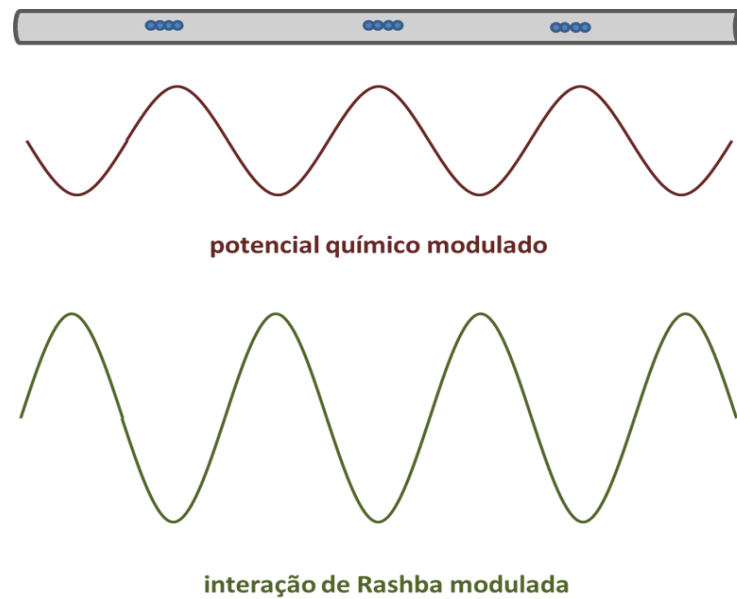


Figura 23 – Poços de Rashba mais profundos do que os de potencial químico. Todos os elétrons aglomerados nos poços de Rashba.

Na próxima seção vamos investigar o espectro de energia em função do número de onda q que nos fornece um resultado bastante interessante: um padrão fractal conhecido como borboleta de Hofstadter.

3.1.5 Borboletas de Hofstadter

Nesta seção iremos analisar a estrutura das autoenergias para diferentes números de onda da modulação externa q . O objetivo é visualizar todos os perfis de banda e onde os gaps estão localizados. Na Fig. 24, o eixo vertical mostra as autoenergias do sistema para diferentes valores de q , mostrados no eixo horizontal.

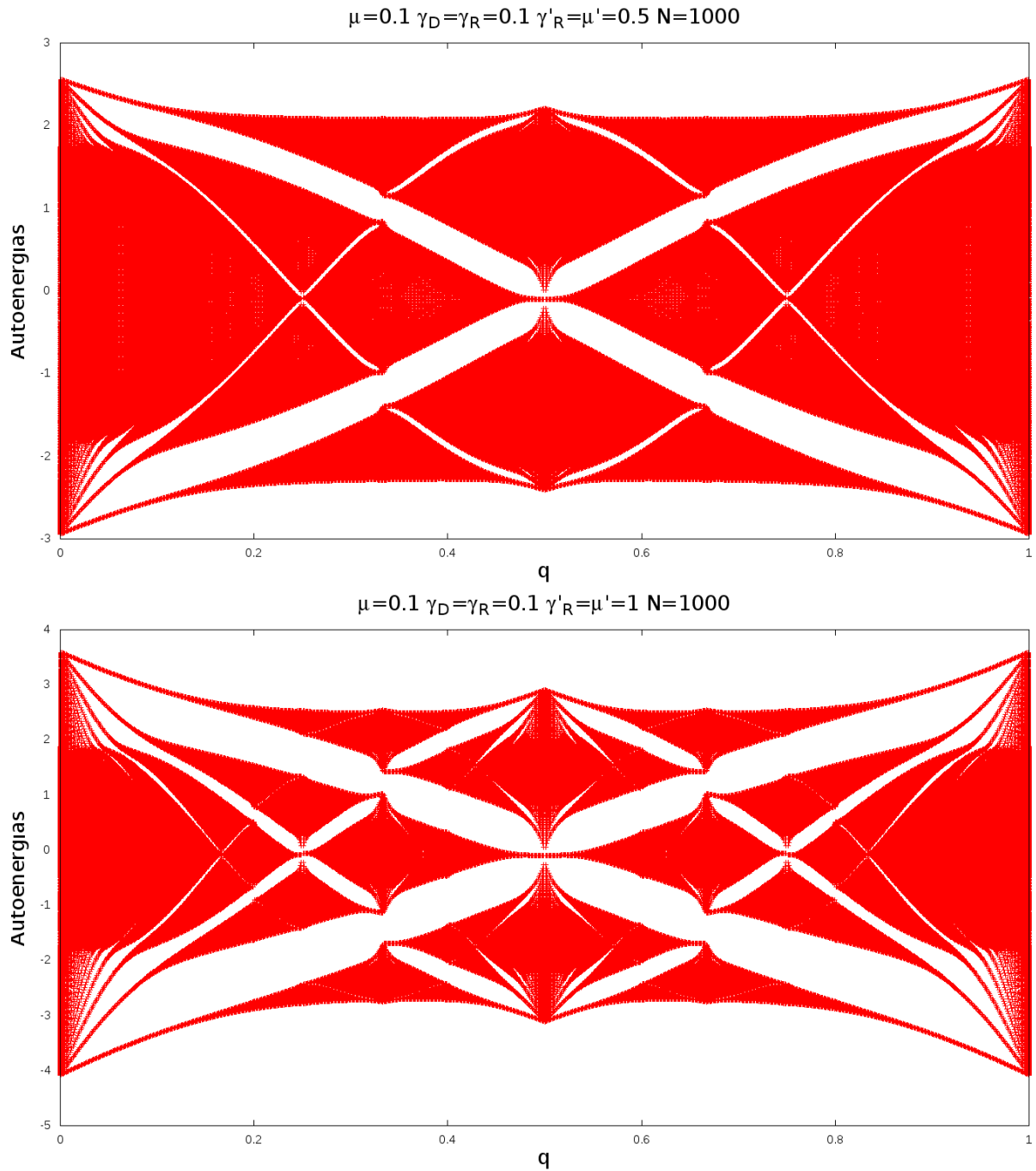


Figura 24 – Autoenergias do sistema para diferentes valores do número de onda q da modulação externa. As regiões brancas são gaps de energia. **Acima:** $\gamma'_R = \mu' = 0.5$ **Abaixo:** $\gamma'_R = \mu' = 1$

Em primeiro lugar, comparando os gráficos superior ($\gamma'_R = \mu' = 0.5$) e inferior ($\gamma'_R = \mu' = 1$) da Fig. 24, vemos, como esperado, a ampliação dos gaps com o aumento da intensidade dos potenciais modulados em fase.

Mais relevante, entretando, é que o gráfico da Fig. 24 nos mostra um padrão fractal que se assimila à famosa borboleta de Hofstadter, Fig. 25. Prevista teoricamente

em 1976, esta borboleta é um dos primeiros fractais quânticos descobertos em física. O que torna nosso resultado curioso é que a borboleta de Hofstadter “original” se refere à estrutura de bandas de elétrons em uma rede cristalina 2D expostos a um campo magnético [24], ou seja, um cenário bastante diferente do tratado aqui. A Fig. 25 retirada do artigo original mostra, no eixo horizontal, os níveis de energia do sistema e, no eixo vertical, o fluxo magnético em cada célula do potencial periódico bidimensional.

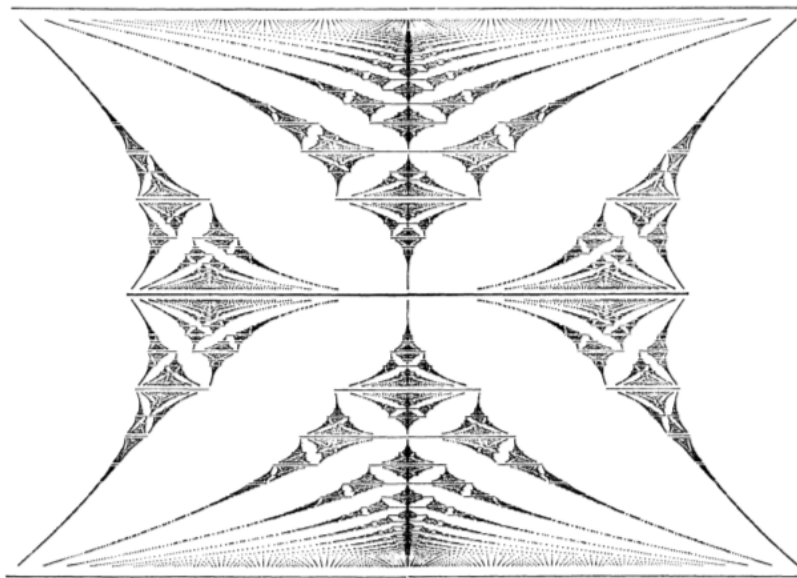


FIG. 1. Spectrum inside a unit cell. ϵ is the horizontal variable, ranging between +4 and -4, and $\beta = \{\alpha\}$ is the vertical variable, ranging from 0 to 1.

Figura 25 – Borboleta de Hofstadter. Figura retirada do artigo original [24].

Para cada valor de campo, o espectro de Hofstadter emerge da combinação dos espectros de energia que seriam obtidos se os elétrons estivessem sujeitos apenas ao potencial cristalino ou ao campo magnético. Sabemos, de teoria de bandas, que o espectro de energias de elétrons se movendo no potencial cristalino da rede é formado por níveis discretos de energia aglomerados em bandas separadas por gaps [25]. Sabemos também que elétrons se movendo em duas dimensões sob a ação de um campo magnético possuem espectro discretizado em termos dos níveis de Landau [25]. O padrão de “auto-similaridade recursiva” anunciado por Hofstadter (o termo “fractal” só apareceu alguns anos depois) aparece quando os dois campos “quantizantes” – o cristalino e o magnético - são combinados e depende da comensurabilidade entre os comprimentos típicos associados a estes campos [24].

Apesar dos intensos esforços experimentais empregados ao longo das décadas desde a previsão teórica de Hofstadter, dados observacionais conclusivos acerca da existência da borboleta foram sistematicamente frustrados pela dificuldade prática de conciliar as escalas de comprimento do potencial cristalino e do campo magnético.

Para valores típicos do parâmetro de rede em cristais – da ordem de grandeza de ângstrons – o campo magnético necessário seria impraticavelmente alto. Para tornar o campo magnético acessível na prática, as propostas experimentais procuram realizar redes sintéticas com parâmetros de rede maiores do que em materiais naturais. Nas primeiras propostas, esta questão foi atacada através de técnicas de litografia [26, 27] e, posteriormente, usando redes óticas [28]. Ironicamente, estas redes sintéticas apresentam a dificuldade oposta da encontrada em materiais naturais: parâmetros de rede na ordem de centenas de nanômetros, correspondendo a campos magnéticos tão baixos que seu efeito é varrido pela desordem no sistema.

Evidências experimentais mais conclusivas do padrão de Hofstadter só começaram a aparecer muito recentemente, trazendo o assunto de volta aos temas de alto destaque na pesquisa de fronteira em matéria condensada. Em iniciativas independentes, dois grupos de pesquisa reportaram, em 2013, assinaturas de padrões fractais do tipo Hofstadter no espectro de energias de um arranjo de camadas de grafeno e nitreto de boro, submetido a um campo magnético [29,30]. Neste sistema de camadas sobrepostas, a super-rede resultante forma uma estrutura periódica conhecida como “padrão de Moiré” [31], com parâmetro de rede ajustável pelo ângulo de rotação de uma camada sobre a outra [29]. Com esta técnica, é possível obter espaçamentos de dezenas de nanômetros e, assim, valores de campo magnético intermediários entre os dois cenários problemáticos discutidos anteriormente. Os experimentos detectaram comportamentos característicos de efeito Hall quântico que podem ser associados aos gaps fractais recursivos da borboleta de Hofstadter.

É importante observar que a proposta original de Hofstadter e, consequentemente, os subsequentes esforços experimentais de realizar a borboleta – desde as primeiras técnicas de litografia até os trabalhos recentes envolvendo grafeno – se baseiam na presença de um campo magnético externo. No presente trabalho, o padrão de Hofstadter é produzido sem a presença de um campo magnético. Aqui, a rede cristalina é associada a uma super-rede também elétrica de comprimento de onda ajustável. Em particular, através da substituição do campo magnético uniforme por um campo elétrico modulado, o tamanho do parâmetro de rede do material deixa de ser um fator limitante à realização experimental do sistema. Em outras palavras, substituímos o problema de sintetizar um cristal bidimensional com um parâmetro de rede específico e submetê-lo a um campo magnético pela tarefa tecnicamente mais simples de associar ao cristal unidimensional “natural” uma cadeia elétrica externa com espaçamento arbitrário. Interessantemente, esta substituição leva ao mesmo padrão fractal previsto por Hofstadter. Note que enquanto a borboleta de Hofstadter original é formada em um plano energia *versus* fluxo do campo magnético por quanta de fluxo magnético (Fig. 25), no nosso caso, o mesmo padrão fractal emerge no plano energia *versus* número de onda do campo elétrico externo (Fig. 24).

Na borboleta de Hofstadter original, a distribuição dos gaps no plano energia versus fluxo de campo magnético (e, conseqüentemente, a formação do padrão fractal) é determinada pela razão de comensurabilidade entre as escalas de comprimento dos campos cristalino e magnético. Quando estes comprimentos estão na razão de dois inteiros, um gap se abre no eixo de energia. No nosso caso, temos uma relação de comensurabilidade análoga que pode ser obtida da eq. (3.1) para os preenchimentos nos quais os gaps se abrem: $N_e/2N = m/r = (m/p)q$ com $q = p/r$ uma fração reduzida em dois inteiros p e r e $m = 1, 2, \dots$. Lembrando que $q = (a/2\pi)Q$ e que $Q = \pi/d$, temos $d/a = mN/(pN_e)$, $m = 1, 2, \dots$. Ou seja, quando a razão entre o espaçamento d da super-rede e o espaçamento a da rede é igual a um múltiplo m da razão entre os inteiros N (com N o número de sítios) e pN_e (com N_e o número de elétrons), gaps se abrem no espectro energia. A forma como estes gaps se distribuem no plano energia versus q resulta na borboleta mostrada na Fig. 24.

Além de seu interesse puramente teórico, espectros de energia com estrutura fractal – particularmente a borboleta de Hofstadter – têm sido associados à presença no sistema de estados topológicos de borda cujas propriedades exóticas possuem potencial de importantes aplicações tecnológicas [32].

Como um projeto de pesquisa futuro, pretendemos explorar mais profundamente a física e as implicações teóricas e tecnológicas da borboleta de Hofstadter obtida para o sistema investigado neste trabalho.

3.2 Análise dos autoestados - Ondas de densidade de carga

Para compreender melhor a transição de fase metal-isolante, podemos analisar a estrutura dos autoestados de cada sistema específico em diferentes posições da banda.

Utilizando os autoestados fornecidos pela diagonalização numérica, podemos computar a probabilidade $P_j(na, t; \sigma)$ de encontrar um elétron em determinada posição da rede, com determinada orientação de spin em um instante de tempo:

$$P_j(na, t; \sigma) = |\Psi_j(na, t; \sigma)|^2 \quad (3.3)$$

onde Ψ_j , com $j = 1, 2, \dots, 2N$, é o j -ésimo autoestado do sistema em função da posição na na rede, do tempo t e do spin σ .

Primeiro, observemos o caso mais simples: um sistema sem modulação externa.

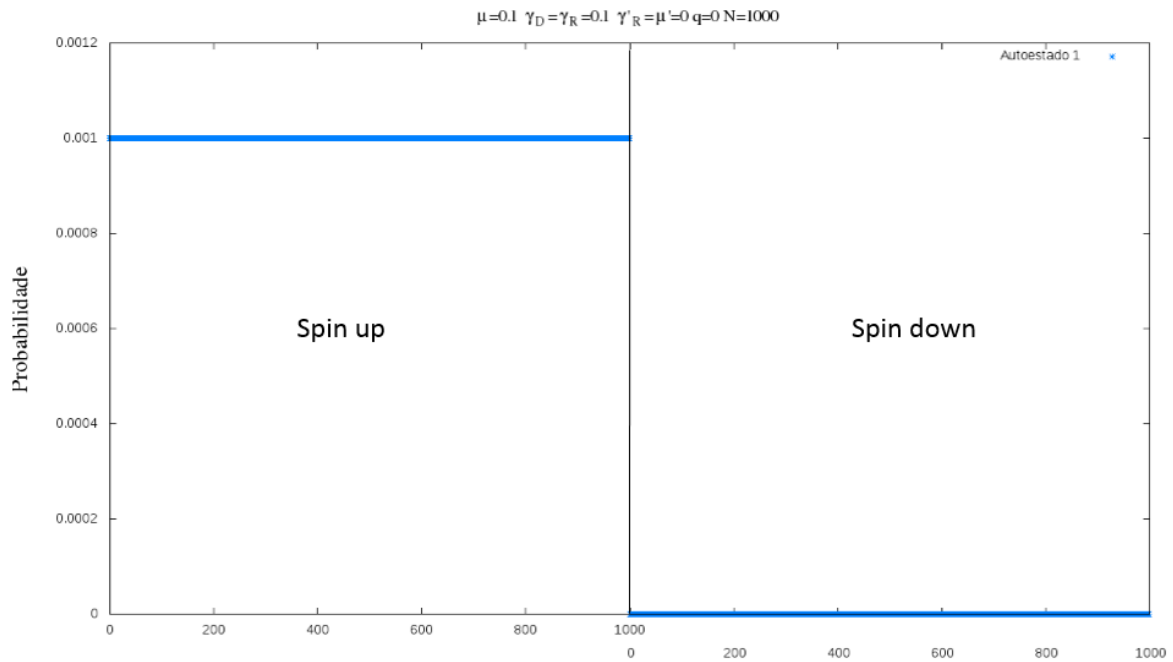


Figura 26 – Probabilidade de encontrar um elétron em função da posição na rede para cada orientação de spin em um sistema sem modulação externa. Primeiro autoestado.

Podemos ver que a distribuição de probabilidade é uniforme para este autoestado, ou seja, para a mesma orientação de spin, todos os sítios da rede são igualmente prováveis para o elétron, daí o valor 0.001 da probabilidade distribuída igualmente dentre 1000 sítios. Este resultado corresponde a um sistema metálico de espectro de energia sem gaps, em concordância com o obtido na Fig. 12. Como, para o caso não modulado, o hamiltoniano é diagonal na variável de spin, notamos também que não existe inversão de spin. Aqui, é suficiente analisar apenas um auto-estado (tomamos o primeiro) a fim de revelar o caráter metálico dos estados, já que o espectro de energia não contém gaps.

Agora, vamos analisar o primeiro autoestado para a estrutura de banda do sistema submetido à modulação externa.

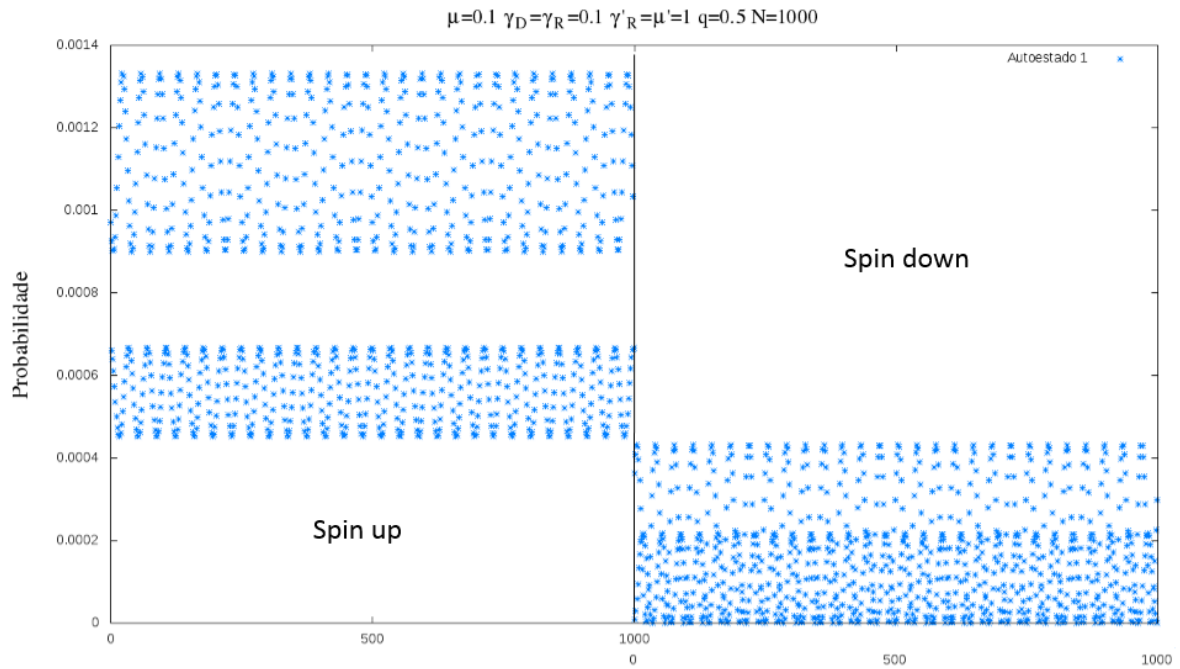


Figura 27 – Probabilidade de encontrar um elétron em função da posição na rede para cada orientação de spin em um sistema com modulação externa. Primeiro autoestado: metálico.

A Fig. 27, tomada para $q = 0.5$, mostra que a distribuição de probabilidade não é mais uniforme e que há inversão de spin. A distribuição de probabilidade é modulada espacialmente refletindo a modulação externa; temos uma onda de densidade de carga (CDW). Olhando mais de perto, podemos visualizar esta modulação na densidade de carga: A Fig. 28 mostra um zoom para os 100 primeiros sítios que evidencia este fenômeno. Podemos discernir um padrão de batimento na onda de densidade de carga. Mas, apesar da "textura" na probabilidade, esta não é nula para nenhum sítio, ou seja, o autoestado é metálico, coerente com o esperado para o primeiro autoestado na Fig. 18. A inversão de spin é esperada e vem das matrizes H_{+-} e H_{-+} na Seção 2.3 que, por sua vez, se originam do termo proporcional a $\sin 2\theta$ na eq. (2.31). Pelas eqs. (2.14) e (2.31), vemos que a origem da inversão de spin está na interação de Dresselhaus uniforme em conjunção com a interação de Rashba modulada.

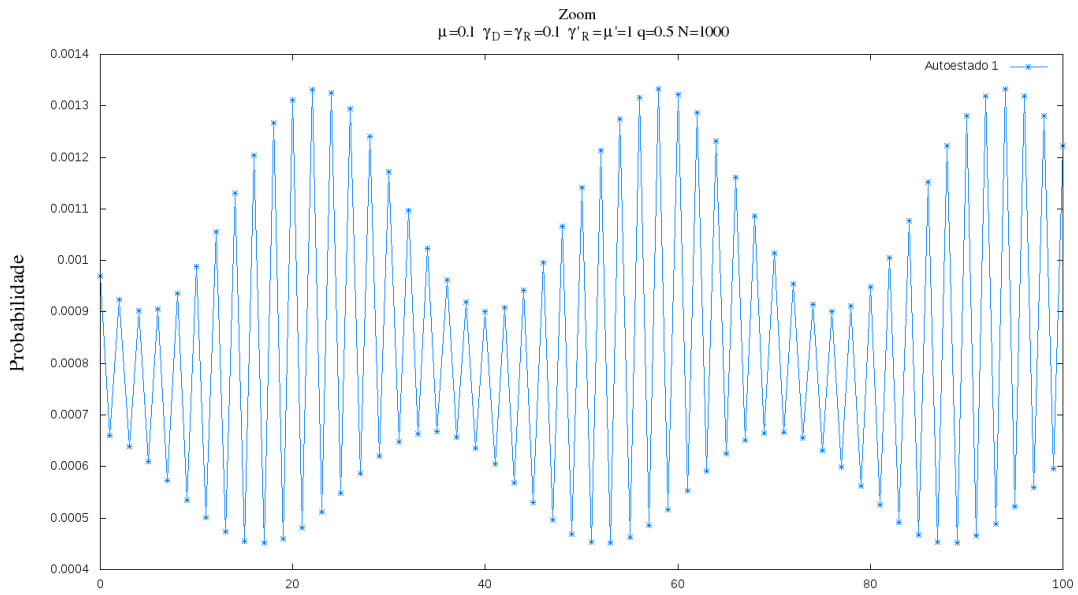


Figura 28 – Zoom para os 100 primeiros sítios do sistema com modulação externa. Onda de densidade de carga. Primeiro autoestado: metálico.

Vamos agora analisar um autoestado isolante, ou seja, na beirada de um gap. No caso $q = 0.5$, este estado corresponde ao milésimo autoestado, localizado no meio do espectro, conforme se vê na Fig. 18.

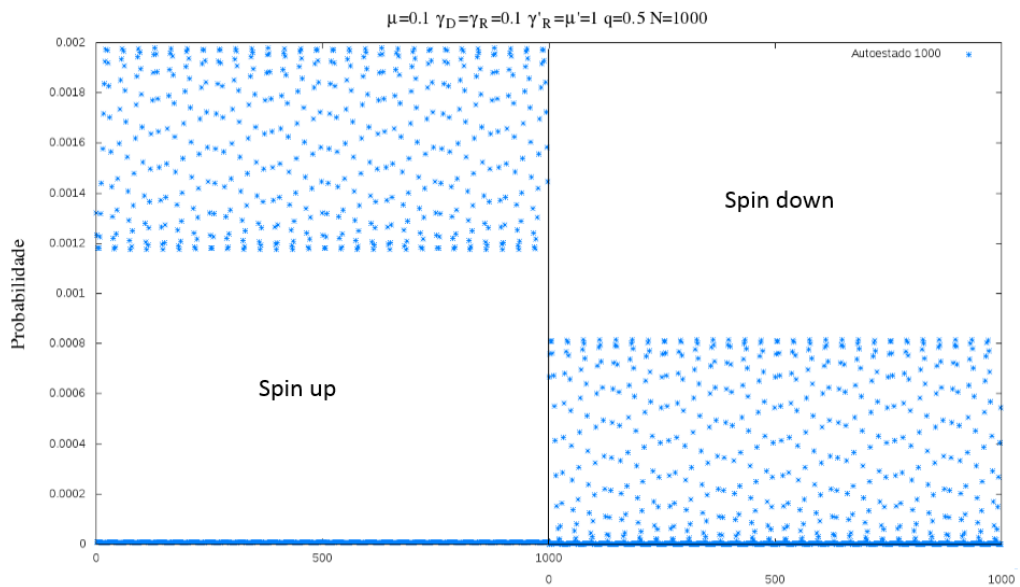


Figura 29 – Probabilidade de encontrar um elétron em função da posição na rede para cada orientação de spin em um sistema com modulação externa. Milésimo autoestado: isolante.

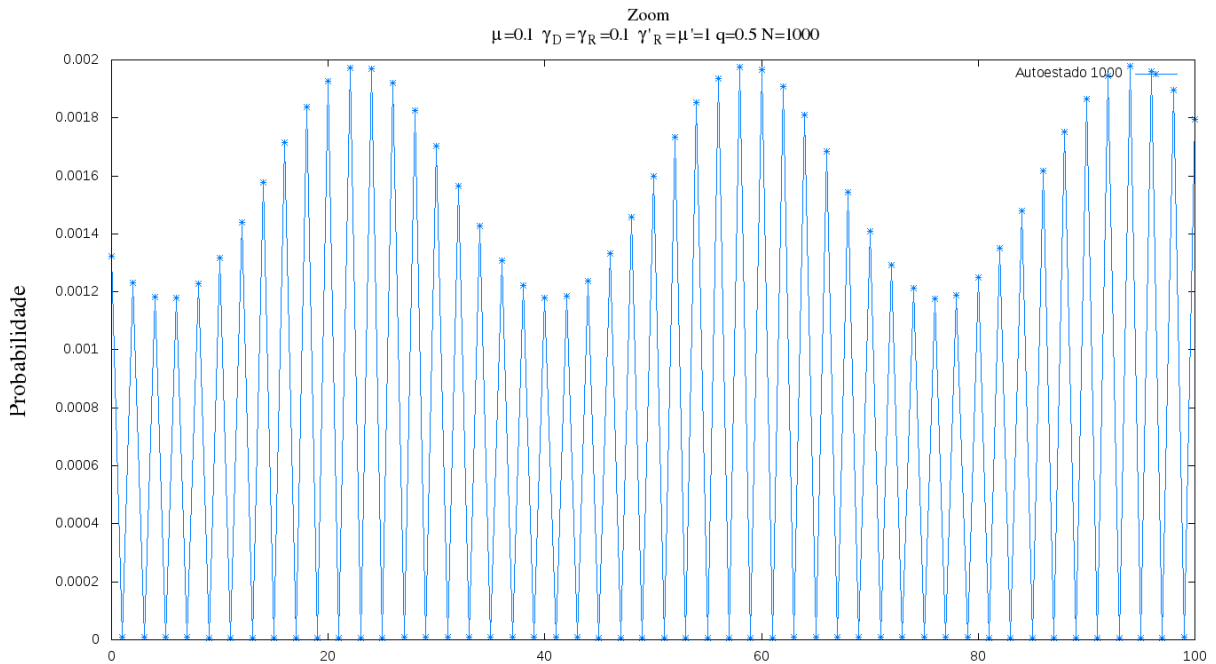


Figura 30 – Zoom para os primeiros 100 sítios do sistema com modulação externa. Onda de densidade de carga. Milésimo autoestado: isolante.

As Figs. 29 e 30 mostram que, na beirada do gap, a probabilidade de ocupação dos sítios se anula pulando um sítio, mais uma vez refletindo a periodicidade da rede quando $q = 0.5$. Este resultado corresponde a uma onda de densidade de carga localizada (ou isolante) já que os elétrons não podem ser conduzidos através dos sítios proibidos. Vemos também que a inversão de spin vista anteriormente no estado metálico é mantida no estado isolante.

3.3 Estudo de Caso

Com o objetivo de investigar a viabilidade prática de nosso modelo para um transistor de spin, realizamos um estudo de caso utilizando dados experimentais para um fio quântico formado em um poço quântico de Arseneto de Índio (InAs): $a = 5 \text{ \AA}$ [33], $\gamma_R = 8 \text{ meV}$ [34], $\gamma_D = 5 \text{ meV}$ [35], $\mu' = 4 \text{ meV}$ [12] e $\gamma'_R = -8 \text{ meV}$ [34], com o sinal – indicando que o potencial químico e a interação de Rashba modulados estão fora de fase neste material. O valor anterior de γ'_R corresponde a capacitores externos a uma voltagem de 0.3 V. Em nosso código numérico, todas as energias estão em unidades de *hopping* t . Tomando o valor típico de 50 meV para a largura de banda ΔE e sabendo que $4t \approx \Delta E$, temos: $t \approx 12.5 \text{ meV}$. Com isso, os parâmetros de entrada do código são: $\gamma_R = 0.64$, $\gamma_D = 0.40$, $\mu' = 0.32$ e $\gamma'_R = -0.64$.

A verificação experimental e potencial aplicação dos fenômenos previstos de-

pende de que estes ocorram em uma escala de comprimento menor do que o comprimento de localização devido à desordem já que, além deste tamanho, a desordem destrói a coerência dos estados quânticos. Logo, o comprimento do fio não pode ser maior do que o comprimento de localização no sistema. Consideraremos um fio quântico com mil sítios, $N = 1000$, de modo que o tamanho do fio quântico $Na = 0.5 \mu\text{m}$ está dentro do comprimento de localização típico em estruturas semicondutoras estimado em vários micrômetros [36].

Tomando $q = 0.1$, o preenchimento da banda $N_e/2N = m/r$ até o primeiro gap ($m = 1$) será de $1/10$, que é um valor típico para semicondutores [12]. Finalmente, tomamos $\mu = 0$ pois este valor apenas desloca o espectro de energias verticalmente, não afetando o tamanho dos gaps.

Executando o código numérico para os os valores anteriores, obtivemos o gap = 0.33 ou, multiplicando pelo hopping $t \approx 12.5 \text{ meV}$, gap = 4,1 meV. Este resultado está de acordo com o encontrado por Malard et. al. [12] onde, na ausência de interação elétron-elétron, o gap varia entre 0.3 meV e 3.0 meV. Para que o dispositivo efetivamente funcione, o gap precisa superar a energia térmica $k_B T$, do contrário esta energia irá promover parte dos elétrons através do gap, destruindo o estado isolante. Para que $4,1 \text{ meV} > k_B T$, devemos ter $T < 48 \text{ K}$. Embora esta temperatura seja muito baixa para uma imediata aplicação tecnológica do modelo proposto, ela é facilmente alcançável em laboratórios de transporte quântico de modo que o teste experimental deste modelo teórico é, em princípio, viável.

Além disso, o gap pode ser ampliado de algumas formas: Primeiro, pode-se utilizar um material onde a interação de Rashba esteja em fase com o potencial químico. A título de demonstração, usando os mesmos parâmetros anteriores mas com γ'_R positivo, obtivemos gap = 11 meV, correspondendo a temperaturas de funcionamento de até 128 K. Uma outra forma de aumentar o gap é aumentando a voltagem dos capacitores externos. Importando dados experimentais de [34], $\gamma'_R = -60 \text{ meV}$ para uma voltagem externa de 0.8 V. Utilizando os mesmos valores anteriores para os demais parâmetros, encontramos gap = 20 meV, possibilitando funcionamento até temperaturas de 232 K, ainda mais altas do que no caso anterior.

Este estudo de caso demonstra que as escalas de comprimento e temperatura para o funcionamento do dispositivo proposto estão ao alcance das capacidades experimentais atuais. Considerando a sua simplicidade e robustez, este modelo pode ser usado como um protótipo em estudos de interessantes fenômenos associados a transições de fase quânticas em sistemas eletrônicos em uma dimensão.

Conclusão

Neste trabalho, analisamos os efeitos da interação spin-órbita de Rashba e do potencial químico modulados por um campo elétrico externo periódico aplicado a um fio quântico isolado em um poço quântico semiconductor.

Revisitamos o estudo analítico realizado por Malard et. al. [12] para este sistema, mas aqui utilizamos métodos numéricos para resolver o hamiltoniano que descreve o modelo proposto e obter as autoenergias e autoestados do sistema.

Os cálculos numéricos recuperaram os principais achados do trabalho analítico e ainda produziram novos resultados, levando a uma reinterpretação da física do sistema.

Uma diferença importante entre os trabalhos analítico e o numérico é a seguinte: enquanto o primeiro previa um gap isolante aberto dinamicamente no nível de Fermi quando o preenchimento da rede atingia determinado valor, no segundo trabalho, vimos que múltiplos gaps estruturais se abrem no espectro de energia em intervalos regulares definidos pelas fronteiras das zonas de Brillouin reduzidas do sistema.

No caso de potenciais modulados em fase, os gaps se tornam mais pronunciados conforme intensificamos o campo elétrico externo. Para o caso de potenciais fora de fase, um comportamento de *crossover* é observado.

A análise dos autoestados nos proporcionou uma melhor compreensão das fases metálicas e isolantes do sistema, bem como do fenômeno de inversão de spin causada pela interação spin-órbita de Dresselhaus.

O estudo de caso mostrou que os gaps são robustos e que o dispositivo proposto pode ser desenvolvido em escalas de comprimento e temperatura viáveis para laboratórios atuais.

Obtivemos no plano das autoenergias *versus* número de onda da modulação externa o padrão fractal da borboleta de Hofstadter. Diferentemente do cenário teórico da borboleta de Hofstadter original e das várias tentativas experimentais de visualizá-la, aqui o padrão é obtido sem um campo magnético externo. Em seu lugar, utilizamos um campo elétrico modulado periodicamente e esta substituição pode representar uma grande vantagem experimental na detecção da borboleta. Em um trabalho futuro, pretendemos aprofundar a investigação dos padrões de Hofstadter em nosso sistema, bem como de suas possíveis aplicações.

Identificamos também que, para um campo elétrico externo suficientemente intenso, o espectro de energias desenvolve uma estrutura de bandas planas. Na

sequência deste trabalho, pretendemos investigar este fenômeno e explorar suas implicações em termos fundamentais e de aplicações tecnológicas.

Referências

- [1] R. Arns, "The other transistor: early history of the metal–oxide–semiconductor field-effect transistor," *Engineering Science and Education Journal*, pp. 233–240, Oct. 2012.
- [2] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, "Spintronics: Fundamentals and applications," *Rev. Mod. Phys.*, vol. 76, pp. 323–410, Apr 2004.
- [3] S. Datta and B. Das, "Electronic analog of the electro-optic modulator," *Applied Physics Letters*, vol. 56, no. 7, pp. 665–667, 1990.
- [4] E. I. Rashba *Sov. Phys. Solid State*, vol. 2, pp. 1224–1238, 1960.
- [5] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, "Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers," *Journal of Physics C: Solid State Physics*, vol. 17, no. 33, p. 6039, 1984.
- [6] S. Blügel and I. für Festkörperforschung (Jülich), *Spintronics - from GMR to Quantum Information*. Lecture manuscripts of the ... Spring School of the Institute of Solid State Research, Forschungszentrum, Zentralbibliothek, 2009.
- [7] D. Grundler, "Ballistic spin-filter transistor," *Phys. Rev. B*, vol. 63, p. 161307, Apr 2001.
- [8] H. Dery, L. Cywiński, and L. J. Sham, "Spin transference and magnetoresistance amplification in a transistor," *Phys. Rev. B*, vol. 73, p. 161307, Apr 2006.
- [9] B. Wang, J. Wang, and H. Guo, "Quantum spin field effect transistor," *Phys. Rev. B*, vol. 67, p. 092408, Mar 2003.
- [10] F. S. M. Guimarães, A. T. Costa, R. B. Muniz, and M. S. Ferreira, "Graphene-based spin-pumping transistor," *Phys. Rev. B*, vol. 81, p. 233402, Jun 2010.
- [11] J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, "Nonballistic spin-field-effect transistor," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 90, p. 146801, Apr 2003.
- [12] M. Malard, I. Grusha, G. I. Japaridze, and H. Johannesson, "Modulated rashba interaction in a quantum wire: Spin and charge dynamics," *Phys. Rev. B*, vol. 84, p. 075466, Aug 2011.
- [13] D. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson international edition, Pearson Prentice Hall, 2005.

- [14] G. Mahan, *Many-Particle Physics*. Physics of Solids and Liquids, Springer, 2000.
- [15] D. Halliday, R. Resnick, and J. Walker, *Fundamentos de física: volume 3 : eletromagnetismo*. Fundamentos de física, LTC, 2008.
- [16] J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 2011.
- [17] Q.-f. Sun, J. Wang, and H. Guo, “Quantum transport theory for nanostructures with rashba spin-orbital interaction,” *Phys. Rev. B*, vol. 71, p. 165310, Apr 2005.
- [18] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich, and J. Chazelas, “Giant magnetoresistance of (001)fe/(001)cr magnetic superlattices,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 61, pp. 2472–2475, Nov 1988.
- [19] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, “Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange,” *Phys. Rev. B*, vol. 39, pp. 4828–4830, Mar 1989.
- [20] G. Dresselhaus, “Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures,” *Phys. Rev.*, vol. 100, pp. 580–586, Oct 1955.
- [21] D. M. Ritchie, “The development of the c language,” *SIGPLAN Not.*, vol. 28, pp. 201–208, Mar. 1993.
- [22] *Intel Math Kernel Library. Reference Manual*. Santa Clara, USA: Intel Corporation, 2009. ISBN 630813-054US.
- [23] G. I. Japaridze, H. Johannesson, and A. Ferraz, “Metal-insulator transition in a quantum wire driven by a modulated rashba spin-orbit coupling,” *Phys. Rev. B*, vol. 80, p. 041308, Jul 2009.
- [24] D. R. Hofstadter, “Energy levels and wave functions of bloch electrons in rational and irrational magnetic fields,” *Phys. Rev. B*, vol. 14, pp. 2239–2249, Sep 1976.
- [25] C. Kittel, *Introdução a física do estado sólido*. LTC, 2006.
- [26] S. Melinte, M. Berciu, C. Zhou, E. Tutuc, S. J. Papadakis, C. Harrison, E. P. De Poortere, M. Wu, P. M. Chaikin, M. Shayegan, R. N. Bhatt, and R. A. Register, “Laterally modulated 2d electron system in the extreme quantum limit,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 92, p. 036802, Jan 2004.
- [27] C. Albrecht, J. H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer, “Evidence of hofstadter’s fractal energy spectrum in the quantized hall conductance,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 86, pp. 147–150, Jan 2001.

- [28] M. Aidelsburger, M. Atala, M. Lohse, J. T. Barreiro, B. Paredes, and I. Bloch, "Realization of the hofstadter hamiltonian with ultracold atoms in optical lattices," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 111, p. 185301, Oct 2013.
- [29] C. R. Dean and L. Wang, "Hofstadter's butterfly and the fractal quantum hall effect in moire superlattices," *Nature*, vol. 497, pp. 598–602, May 2013. Letter.
- [30] L. A. Ponomarenko, R. V. Gorbachev, G. L. Yu, D. C. Elias, R. Jalil, A. A. Patel, A. Mishchenko, A. S. Mayorov, C. R. Woods, J. R. Wallbank, M. Mucha-Kruczynski, B. A. Piot, M. Potemski, I. V. Grigorieva, K. S. Novoselov, F. Guinea, V. I. Fal'ko, and A. K. Geim, "Cloning of dirac fermions in graphene superlattices," *Nature*, vol. 497, pp. 594–597, May 2013. Letter.
- [31] P. Moon and M. Koshino, "Electronic properties of graphene/hexagonal-boron-nitride moiré superlattice," *Phys. Rev. B*, vol. 90, p. 155406, Oct 2014.
- [32] D.-T. Tran, A. Dauphin, N. Goldman, and P. Gaspard, "Topological hofstadter insulators in a two-dimensional quasicrystal," *Phys. Rev. B*, vol. 91, p. 085125, Feb 2015.
- [33] J. Hornstra and W. Bartels, "Determination of the lattice constant of epitaxial layers of iii-v compounds," *Journal of Crystal Growth*, vol. 44, no. 5, pp. 513 – 517, 1978.
- [34] D. Liang and X. P. Gao, "Strong tuning of rashba spin-orbit interaction in single inas nanowires," *Nano Letters*, vol. 12, no. 6, pp. 3263–3267, 2012. PMID: 22545669.
- [35] S. Giglberger, L. E. Golub, V. V. Bel'kov, S. N. Danilov, D. Schuh, C. Gerl, F. Rohlfing, J. Stahl, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl, and S. D. Ganichev, "Rashba and dresselhaus spin splittings in semiconductor quantum wells measured by spin photocurrents," *Phys. Rev. B*, vol. 75, p. 035327, Jan 2007.
- [36] D. Liu and S. Das Sarma, "Localization in semiconductor quantum-wire nanostructures," *Phys. Rev. B*, vol. 51, pp. 13821–13823, May 1995.