

Simulação de estruturas <Mn> δ -doped tipo-p via método k.p

Wesley S. Patrocínio e Guilherme M. Sipahi

Instituto de Física de São Carlos – Universidade de São Paulo – Av. Trabalhador São-carlense, 400 – São Carlos – SP – CEP. 13.560-000

Resumo — A spintrônica tornou-se, nos últimos anos, uma das grandes áreas de aplicações tecnológicas, visando o desenvolvimento de novos dispositivos (computação quântica, armazenamento de dados, displays e outros). Os DMS's (semicondutores magnéticos diluídos) tem sido estudados massivamente, devido à grande tecnologia existente para semicondutores em geral, assim como características que viabilizam a aplicação desses materiais em dispositivos (eficiência, temperatura de trabalho). Por meio deste trabalho, realizamos um estudo de estruturas semicondutoras δ -doped (III,Mn)IV.

Palavras-chaves — DMS, delta-doped, método k.p.

I. INTRODUÇÃO

Spintrônica (contração do termo *spin transport electronics*) tem como base o uso do spin como portador de informação. Usando o *spin*, pode-se aumentar a densidade de informação armazenada por área, armazenar dados de forma não-volátil, aumentar a velocidade de processamento e comunicação e também gerar ferramentas para o desenvolvimento da computação quântica [1]. O estudo de semicondutores magnéticos diluídos (DMS) permite o uso das tecnologias e propriedades bastante conhecidas dos materiais do grupo-IV e III-V para o desenvolvimento de dispositivos baseados em novos fenômenos, como o TAMR (*Tunneling anisotropic magnetoresistance*) com possibilidade de aplicabilidade real.

A. Método k.p

O método k.p é usado há muitos anos para descrever a estrutura de bandas de estruturas semicondutoras. Inicialmente desenvolvido para bulk [2,3], tal formalismo foi estendido para superredes [4], possibilitando assim o estudo de diversas micro e nanoestruturas. Para *bulk*, assumimos a função de onda como a função de Bloch:

$$\langle \mathbf{r} s | j m_j \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \langle \mathbf{r} s | j m_j \rangle \quad (1)$$

onde j e m_j representam o momento angular e sua projeção no eixo $\hat{\mathbf{z}}$, respectivamente, V é o volume da cela unitária e \mathbf{k} é um vetor pertencente à primeira zona de Brillouin.

Para a aplicação deste modelo em superredes, Sipahi et. al. [4] propuseram um método, os autoestados da superrede são

expandidos em ondas planas, e aplicada na equação de massa efetiva multibandas. A função de onda expandida é dada por:

$$\langle \mathbf{r} s | \nu \mathbf{k} \rangle = \sum_{j m_j \mathbf{K}} \langle j m_j \mathbf{k} \mathbf{K} | \nu \mathbf{k} \rangle \langle \mathbf{r} s | j m_j \mathbf{k} \mathbf{K} \rangle \quad (2)$$

onde \mathbf{K} é um vetor da rede recíproca.

A equação de massa efetiva então toma a forma:

$$\sum_{j' m' \mathbf{K}'} \langle j m_j \mathbf{k} \mathbf{K} | H | j' m' \mathbf{k} \mathbf{K}' \rangle \langle j' m' \mathbf{k} \mathbf{K}' | \nu \mathbf{k} \rangle = E_\nu(\mathbf{k}) \langle j m_j \mathbf{k} \mathbf{K} | \nu \mathbf{k} \rangle \quad (3)$$

onde:

$$H = H_{k.p} + H_{Het} + H_{XC} + H_{Coulomb} + H_{Magnetic} \quad (4)$$

O tamanho do Hamiltoniano pode então variar de acordo com o número de ondas planas escolhido para a expansão. Na figura 1 temos um exemplo do Hamiltoniano para uma onda plana.

$\langle -K H -K \rangle$	$\langle -K H 0 \rangle$	$\langle -K H K \rangle$
$\langle 0 H -K \rangle$	$\langle 0 H 0 \rangle$	$\langle 0 H K \rangle$
$\langle K H -K \rangle$	$\langle K H 0 \rangle$	$\langle K H K \rangle$

Figura 1 – Exemplo do Hamiltoniano total para a expansão em uma onda plana da equação de massa efetiva. Quanto mais escuro o bloco, maior sua contribuição para o resultado final.

B. Hamiltoniano k.p

Em nosso modelo, cada bloco da matriz k.p total é composta pelo Hamiltoniano proposto por Luttinger Kohn [3], o qual faz uma descrição da banda de valência, inserindo a interação com a banda de condução perturbativamente. A matriz k.p de Luttinger Kohn, na base de momento angular, possui a forma:

$$\begin{pmatrix} Q & S & R & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}}S & -i\sqrt{2}R \\ S^* & T & 0 & R & \frac{-i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S \\ R^* & 0 & T & -S & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{-i}{\sqrt{2}}(Q-T) \\ 0 & R^* & -S^* & Q & -i\sqrt{2}R^* & \frac{-i}{\sqrt{2}}S^* \\ \frac{-i}{\sqrt{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & i\sqrt{\frac{3}{2}}S & i\sqrt{2}R & \frac{1}{2}(Q+T)-\Delta & 0 \\ i\sqrt{2}R^* & -i\sqrt{\frac{3}{2}}S^* & \frac{i}{\sqrt{2}}(Q-T) & \frac{i}{\sqrt{2}}S & 0 & \frac{1}{2}(Q+T)-\Delta \end{pmatrix}$$

C. Potencial de troca-correlação

Em sistemas contendo portadores ionizados, o Hamiltoniano total do sistema deve possuir os potenciais Coulombiano e de Troca-correlação (XC), referente a interação de muitos corpos. O potencial XC é parametrizado via LSDA (*Local Spin Density Approximation*), onde cada região da distribuição é tratada como um gás homogêneo de elétrons com a densidade daquele ponto. A energia XC é escrita em função de duas grandezas, a polarização relativa e o raio de Wigner-Seitz, dados por:

$$\zeta = \frac{\rho_{\uparrow} - \rho_{\downarrow}}{\rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}} \quad (5)$$

$$r_s = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{1/3} \frac{2m^*}{\epsilon} \quad (6)$$

onde ρ representa a densidade de portadores com determinado spin, ϵ a constante dielétrica do material, e m^* é a massa efetiva do portador.

Nesse trabalho, a parametrização utilizada foi proposta por Perdew-Wang [6], usando as densidades de portadores ocupando cada orbital *p-like* do cristal.

D. Potencial Magnético

Assumindo que os íons de Mn substituem homogeneamente os íons grupo III, a distribuição de Mn é dada então por:

$$\rho(r) \approx xN_0g(z) \quad (7)$$

onde N_0 é a densidade de íons, x é a concentração substitucional de Mn, e $g(z)=1$ se z pertence a uma camada DMS, e $g(z)=0$ caso contrário. Nesse caso, a interação magnética pode ser representada por [6]:

$$V_{mag}(z) = -\frac{x}{2} N_0 \beta g(z) \vec{M} \cdot \vec{\sigma} \quad (8)$$

W. S. Patrocínio, wesley.patrocinio@gmail.com, Tel +55-16-33738097
 G. M. Sipahi, sipahi@ifsc.usp.br, Tel +55-16-33739856
 Este trabalho foi parcialmente financiado pelo CNPq/CAPES.

onde β é o termo referente à integral de troca da interação *sp-d* para portadores tipo-p, e \vec{M} a magnetização local devido à presença de íons de Mn.

O Hamiltoniano de interação magnética é dado então por:

$$-\frac{x}{6}N_0\beta \begin{pmatrix} 3M_z & 0 & i\sqrt{3}M_- & 0 & \sqrt{6}M_- & 0 \\ 0 & -3M_z & 0 & -i\sqrt{3}M_+ & 0 & -\sqrt{6}M_+ \\ -i\sqrt{3}M_+ & 0 & M_z & 2iM_- & 2\sqrt{2}iM_z & -\sqrt{2}M_- \\ 0 & i\sqrt{3}M_- & -2iM_+ & -M_z & \sqrt{2}M_+ & -2\sqrt{2}iM_z \\ \sqrt{6}M_+ & 0 & -2\sqrt{2}iM_z & \sqrt{2}M_- & -M_z & iM_- \\ 0 & -\sqrt{6}M_- & -\sqrt{2}M_+ & 2\sqrt{2}iM_z & -iM_+ & M_z \end{pmatrix}$$

E. Cálculo autoconsistente

Para obter a estrutura de bandas e a distribuição de cargas do sistema, usamos um ciclo autoconsistente, onde iniciamos com uma distribuição tentativa de cargas, calculamos os potenciais e depois misturamos as configurações inicial e final de cada ciclo. Na figura x temos um esquema de nosso ciclo.



Figura 2 – Ilustração do ciclo autoconsistente. O ciclo só é encerrado quando os potenciais determinados pela equação de Poisson são iguais aos potenciais iniciais da mesma iteração. Quando convergido, os autoestados e autoenergias do sistema são determinados.

F. Computação de alto desempenho

Os cálculos de estruturas de bandas de estruturas dopadas exigem bastante poder computacional, pois são realizadas diversas operações com matrizes dentro de um ciclo autoconsistente. Sendo assim, o LFC desenvolve, em conjunto aos modelos físicos, métodos computacionais para otimização de cálculos massivos como os aqui apresentados. Atualmente, os cálculos podem ser realizados usando computação paralela, via um *cluster* com quatro nós AMD64 X2 ligados em rede Gigabit Ethernet, em computadores pessoais com processadores *multicores*, e também usando as tecnologias mais atuais, como o nVidia CUDA, onde os cálculos são realizados usando os recursos de placas de vídeo dedicadas, e também usando processadores Cell inclusos dentro do video-game Playstation 3 (em desenvolvimento).



Figura 3 – Ilustrações das tecnologias usada para os cálculos realizados.

G. Estrutura <Mn> δ -doped tipo-p

Os semicondutores magnéticos diluídos compõem hoje uma grande perspectiva para dispositivos de spintrônica, devido suas características favoráveis a aplicabilidade em sistemas reais [8-11].

O δ -doping é uma técnica bem estabelecida, aplicada há muitos anos na construção de dispositivos eletrônicos. Dessa forma, resolvemos estudar os sistemas <Mn> δ -doped, analisando suas características. Na figura 4 temos um exemplo do perfil de potencial dessas estruturas.

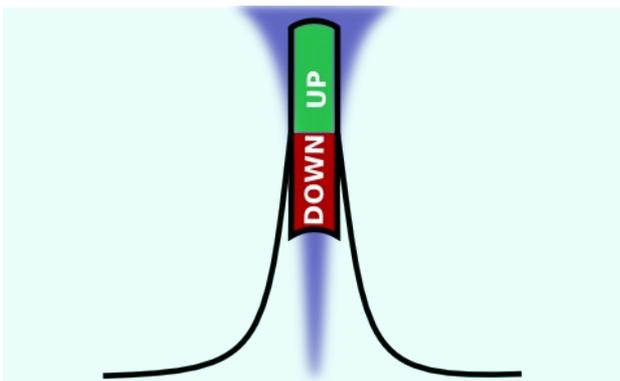


Figura 4 – Esquema do potencial total da região dopada. O momento magnético local causa um deslocamento dos potenciais entre portadores *spin up* e *down*.

Esperamos desse sistema uma boa polarização relativa de portadores, pois assim esse tipo o mesmo pode ser utilizado para dispositivos de spintrônica, via injeção de portadores polarizados em regiões não-magnéticas, ou então emissão de luz polarizada.

II. RESULTADOS

Aplicamos nosso método de simulação em estruturas <Mn> δ -doped, ou seja, algumas monocamadas do semiconductor são altamente dopadas com Mn, gerando uma grande quantidade de portadores ionizados, assim como momento magnético localizado.

O material escolhido para o estudo foi o (Ga,Mn)As. O manganês substituindo os átomos de Gálio inserem buracos ionizados no sistema, tornando a estrutura um sistema tipo-p.

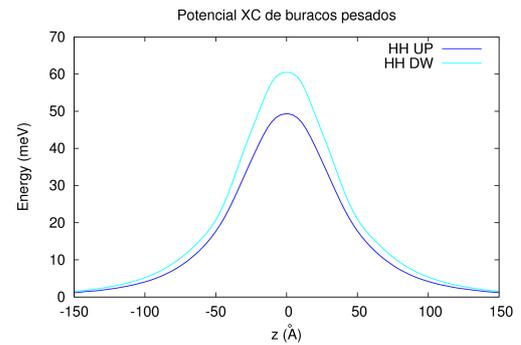


Figura 5 – Perfil de potencial de troca-correlação (XC) para buracos pesados. Devido às diferentes distribuições de carga e o uso da aproximação LSDA, os potenciais para spin up e down possuem magnitudes diferentes.

Os resultados apresentados são referentes a um <Mn> δ -doped com densidade superficial de carga $n_s = 6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. Essa quantidade de portadores ionizados implica em uma concentração substitucional de Mn em torno dos 0,5%. A largura a meia altura da distribuição δ é de 1,5 nm e a periodicidade do sistema é 50 nm. Devido ao momento magnético presente na região de dopagem, há um desdobramento dos perfis de potencial de cerca de 20 meV para um mesmo tipo de portador com *spins* diferentes.

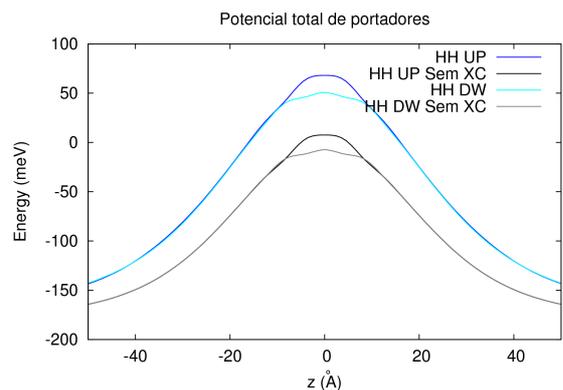


Figura 6 – Perfil de potencial total para buracos pesados. As curvas azul são referentes ao potencial total com a contribuição da troca-correlação entre os portadores, e as curvas cinza não contém tal contribuição.

Comparando os perfis de potencial total com e sem troca-correlação, pode-se ver a magnitude da interação de muitos corpos no potencial total. A figura 6 mostra uma diferença de cerca de 60 meV entre o perfil total e o mesmo sem a contribuição XC. Além disso, é possível notar a região de magnetização devido a presença de íons magnéticos.

Na figura 7 é mostrada a polarização relativa de portadores, dada pela equação x. Nota-se que a carga está concentrada na região central do sistema, devido à difusão dos portadores ionizados ao longo da vizinhança da região de dopagem. Neste sistema, a taxa de polarização está por volta de 35%, o que é uma quantidade considerável de portadores polarizados. Com nossa simulação é possível simular sistemas com dimensões e dopagens diferentes para avaliar melhor este tipo de sistema.

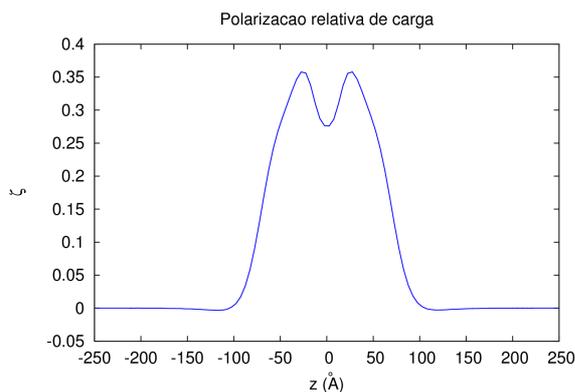


Figura 7 – Polarização relativa de cargas ao longo do sistema.

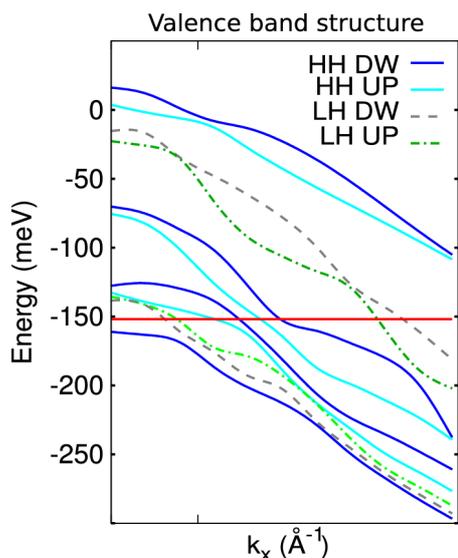


Figura 8 – Estrutura de bandas do sistema. As linhas azul claro e escuro mostram as bandas de buracos pesados *spin down* e *up*, respectivamente. As linhas cinza referem-se a estados de buraco leve *spin down*, enquanto as verde à *spin up*. A reta vermelha indica o nível de Fermi do sistema.

A estrutura de bandas do sistema é mostrada na figura 8. A partir da probabilidade de ocupação dos portadores no ponto Γ , pode-se determinar a quais tipos de portadores as bandas estão relacionadas. Vê-se pelo gráfico que grande parte das bandas são ocupadas por buracos pesados. O estado mais próximo ao topo da banda de valência contém buracos pesados com *spin down*, como era esperado. A quebra de degenerescência causada pela interação magnética permite a transição entre estados com *spins* diferentes, permitindo assim a emissão de luz polarizada.

III. CONCLUSões

A spintrônica tem mostrado grandes perspectivas para o futuro tecnológico mundial. Pelos resultados mostrados neste trabalho pode-se concluir que os sistemas $\langle \text{Mn} \rangle \delta$ -doped apresentam características que o colocam como forte candidato a integrar dispositivos spintrônicos. Conclui-se

também que o método apresentado é capaz de contribuir significativamente para o avanço tecnológico.

REFERÊNCIAS

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova e D. M. Treger, “Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future”, *Science*, vol. 294, pp. 1488, November 2001.
- [2] E. O. Kane, “Energy band structure in p-type germanium and silicon”, *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 1, pp. 82-99, April 1956.
- [3] J. M. Luttinger and W. Kohn, “Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields”, *Phys. Rev.*, vol. 97, pp. 869-883, February 1955.
- [4] G. M. Sipahi et al., “Band structure of holes in p-type δ -doping quantum wells and superlattices”, *Phys. Rev. B*, vol. 53, pp. 9930-9942, April 1996.
- [5] R. Enderlein et al., “Density functional theory for holes in semiconductors”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 79, pp. 3712-3715, November 1997.
- [6] J. P. Perdew and Y. Wang, “Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation energy”, *Phys. Rev. B*, vol. 45, pp. 13244-13249, June 1992.
- [7] I. S. P. Marin, “Propriedades eletrônicas de heteroestruturas magnéticas diluídas”, Dissertação de mestrado, Instituto de Física de São Carlos, pp. 99, Fevereiro 2006.
- [8] A. M. Nazmul and S. Sugahara, “Transport properties of Mn δ -doped GaAs and the effect of selective doping”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 80, pp. 3120-3122, April 2002.
- [9] X. Wang et al., “Systematic study on the spacer-dependent magnetic properties of Mn δ -doped GaAs/(Ga,Mn)As ferromagnetic heterostructures: from first principles”, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 42, pp. 025002, November 2008.
- [10] A. M. Nazmul, S. Sugahara and M. Tanaka, “Ferromagnetism and high Curie temperature in semiconductor heterostructures with Mn δ -doped GaAs and p-type selective doping”, *Phys. Rev. B*, vol. 67, pp. 241308, June 2003.
- [11] A. M. Nazmul et al., “High temperature ferromagnetism in GaAs-based heterostructures with Mn δ -doping”, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 95, pp. 017201, July 2005.