



Università degli Studi di Firenze
Facoltà di Ingegneria

Corso di Laurea
in
Ingegneria Elettronica

*Dispositivi ad effetto tunnel
risonante per applicazioni alla
Spintronics*

Tesi di Laurea di

Sara Bernardis

Relatori:

Prof. Gianfranco Manes

Prof. Giovanni Frosali

Ing. Alessandro Cidronali

Anno Accademico 2003/2004

*Ai miei genitori, Cristina e Franco,
a mia sorella Stella
ed ai miei nonni, Olga ed Otello
con tanto affetto.*

Indice

<i>Ringraziamenti</i>	i
<i>Introduzione</i>	iv
<i>Prefazione</i>	iv
<i>Sommario</i>	v
I <i>Analisi Fisica dell' Effetto Rashba</i>	2
1 <i>Spintronics</i>	3
1.1 <i>Definizione</i>	3
1.2 <i>Caratteristiche, Vantaggi e Svantaggi</i>	3
1.3 <i>Spin</i>	5
1.3.1 <i>Definizione</i>	5
1.3.2 <i>Proprietà</i>	8
1.3.3 <i>Spin e Momento Angolare</i>	9
1.3.4 <i>Momento Angolare Totale: Meccanica Classica e Meccanica Quantistica a Confronto</i>	10
1.3.5 <i>Dinamica di Spin</i>	13
1.3.6 <i>Spin e Magnetismo</i>	17

1.4	<i>Dispositivi Basati su Semiconduttori e su Materiali Ferromagnetici</i>	17
2	<i>Concetti Fondamentali di Meccanica Quantistica</i>	19
2.1	<i>Esperimento di Stern-Gerlach</i>	20
2.1.1	<i>Descrizione dell'Esperimento</i>	20
2.2	<i>Cinematica di Spin</i>	23
2.3	<i>Ket e Bra</i>	24
2.4	<i>Misurazione di Osservabili</i>	30
2.4.1	<i>Processo di Misura</i>	30
2.4.2	<i>Valore di Aspettazione</i>	36
3	<i>Effetto Rashba</i>	39
3.1	<i>Definizione del Problema</i>	39
3.2	<i>Teoria Perturbativa Indipendente dal Tempo</i>	40
3.2.1	<i>Caso Non Degenero</i>	40
3.2.2	<i>Caso Degenero</i>	46
3.3	<i>Concetti Fondamentali di Fisica dello Stato Solido</i>	49
3.3.1	<i>Reticolo di Bravais</i>	49
3.3.2	<i>Strutture a Cristallo</i>	50
3.4	<i>Simmetria d'Inversione</i>	54
3.5	<i>Degenerazione di Kramers</i>	55
3.5.1	<i>Degenerazione di Spin</i>	57
3.6	<i>Interazione Spin Orbita</i>	57
3.6.1	<i>Ulteriore Formulazione dell'Interazione Spin Orbita</i>	61
3.7	<i>Effetto Zeeman</i>	62

3.8	<i>Effetto Rashba</i>	65
3.8.1	<i>Effetto Rashba ed Effetto Zeeman a Confronto</i>	65
3.8.2	<i>Descrizione del Fenomeno</i>	66
3.8.3	<i>Origine dello Spin-Splitting a Campo Nullo: SIA e BIA.</i>	67
3.8.4	<i>SIA e BIA a Confronto: Analogie e Differenze.</i>	72
3.8.5	<i>Equazione di Rashba</i>	77
3.8.6	<i>Hamiltoniana Effettiva di Spin-Orbita</i>	80
 II <i>Analisi del Dispositivo ed Implementazione Numerica dell' Effetto Rashba</i>		82
 4 <i>Concetti Fondamentali di Tunneling Risonante ed Applicazioni</i>		83
4.1	<i>Tunneling Risonante</i>	84
4.1.1	<i>Tunneling e Tunneling Risonante a Confronto</i>	84
4.1.2	<i>Tunneling Risonante: Definizione.</i>	85
 5 <i>Analisi Numerica</i>		90
5.1	<i>Proprietà Generali di un Elettrone</i> <i>in un Potenziale Periodico</i>	90
5.1.1	<i>Potenziale Periodico</i>	90
5.1.2	<i>Teorema di Bloch</i>	92
5.1.3	<i>Analisi di un Elettrone Incidente</i> <i>su una Struttura Monodimensionale</i>	94
5.2	<i>Equazioni del Modello Numerico</i>	98
5.3	<i>Metodo di Runge-Kutta</i>	104

6	<i>Filtri di Spin a Tunneling Risonante con Effetto Rashba</i>	108
6.1	<i>Eterostruttura Asimmetrica InAs/GaSb/AlSb</i>	108
6.2	<i>Funzionamento del Dispositivo</i>	111
6.3	<i>Indagine Quantistica del Principio di Funzionamento</i>	113
6.4	<i>Equazioni Finali del Modello</i>	121
6.4.1	<i>Approssimazioni ed Ipotesi</i>	122
6.4.2	<i>Sistema di Equazioni</i>	123
7	<i>Discussione dei Risultati</i>	124
7.1	<i>Diagramma a Bande dell'Eterostruttura</i>	125
7.2	<i>Caso Iniziale: Assenza di Risonanza</i>	126
7.2.1	<i>Caso Risonante</i>	129
7.3	<i>Diagramma del Coefficiente di Trasmissione</i>	132
	<i>Conclusioni e sviluppi futuri</i>	136
III	<i>Appendici</i>	139
7.4	Appendice A	
	<i>Notazione</i>	140
7.5	Appendice B	
	<i>Relazioni fondamentali</i>	142
IV	<i>Bibliografia</i>	144

Elenco delle figure

1.1	Schematizzazione grafica del fenomeno della precessione di spin.	16
2.1	Esperimento di Stern-Gerlach.	21
2.2	Rappresentazione grafica del fascio di elettroni emergente da un dispositivo di Stern-Gerlach.	23
3.1	Tipologia di reticolo BCC.	51
3.2	Tipologia di reticolo FCC.	51
3.3	Reticolo del diamante.	52
3.4	Reticolo della zincoblenda.	53
3.5	Schematizzazione grafica del fenomeno fisico da cui trae origine l'effetto Rashba.	59
3.6	Spettro energetico del modello di Rashba.	69
3.7	Diagramma di dispersione in condizioni di asimmetria d'inversione.	72
3.8	Diagramma di dispersione in presenza di effetto Rashba.	73
4.1	Effetto tunnel risonante in una doppia barriera rettangolare di potenziale.	87
6.1	Eterostruttura asimmetrica per la realizzazione di un filtro di spin.	109

6.2	Spin splitting nella banda di conduzione di GaAs ed AlAs. . .	110
6.3	Principio di funzionamento del filtraggio di spin, in presenza di tunneling interbanda risonante.	111
7.1	Diagramma a bande dell'eterostruttura.	125
7.2	Funzione d'onda di conduzione relativa agli spin up.	127
7.3	Funzione d'onda di conduzione relativa agli spin down.	127
7.4	Funzione d'onda: evoluzione verso la risonanza (spin up).	128
7.5	Funzione d'onda di conduzione in risonanza (spin up).	129
7.6	Funzione d'onda di conduzione relativa al valore di energia risonante (spin down).	130
7.7	Funzione d'onda di conduzione in assenza di risonanza relativo allo spin down (per alti valori dell'energia).	130
7.8	Componente di valenza della funzione d'onda relativa all'ener- gia di risonanza (stato di ponte)	131
7.9	Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.	132
7.10	Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.	133
7.11	Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.	134

Elenco delle tabelle

3.1	Composti caratterizzati dalla tipica struttura a zincoblenda. . .	53
5.1	Grandezze di riferimento e valori numerici, secondo il formalismo di Green.	99
6.1	Corrispondenze principali tra variabili dinamiche ed operatori quantistici.	116

Ringraziamenti

La stesura del presente lavoro di tesi ha rappresentato per me non solo l'epilogo di un percorso di studi, ma l'opportunità di svolgere una ricerca che mi ha appassionato enormemente.

Ringrazio, a tal scopo, i miei relatori, che mi hanno offerto la possibilità di avvicinarmi ad un argomento così avvincente. Esprimo la mia gratitudine all'Ing. Alessandro Cidronali, per avermi suggerito d'intraprendere questo lavoro e per il suo interessamento nelle varie fasi di lavoro.

Un ringraziamento speciale al Prof. Giovanni Frosali, per il sostegno professionale, che non è mai mancato, per l'incoraggiamento nei momenti più difficili, ma soprattutto per la disponibilità con cui mi ha sempre accolto. È stato un onore ed un piacere poter lavorare insieme.

Desidero esprimere, in particolare, tutta la mia sincera riconoscenza all'Ing. Omar Morandi, che mi ha seguito durante l'intero percorso, con particolare competenza e continua disponibilità. La sua irrinunciabile collaborazione ed i suoi innumerevoli consigli sono stati, per me, di fondamentale importanza per lo sviluppo di questa tesi.

Vorrei ringraziare, inoltre, il Dott. Luigi Barletti, per l'interesse che mi ha sempre dimostrato nonché per i preziosi suggerimenti ricevuti durante la fase di revisione.

Un semplice grazie non rende giustizia al riconoscimento che sento per il Prof. Giovanni Borgioli, che, durante le lezioni del corso di Fisica Matematica, mi ha permesso di intraprendere rigorosamente lo studio della Meccanica Quantistica, antica passione che mi avvinceva e mi incuriosiva fin dai tempi del Liceo.

Un doveroso riconoscimento, inoltre, spetta al Dott. Francesco Mugelli, per tutte le sue consulenze tecniche, che mi hanno aiutato a redigere al meglio il presente testo in ambiente LaTeX.

Grazie, infine, al MICLab ed a tutti i suoi componenti per avermi ospitato in questo periodo.

A prescindere dal ruolo decisivo che svolgono nella mia vita, niente di tutto questo si sarebbe potuto realizzare senza la presenza dei miei genitori, Cristina e Franco, di mia sorella Stella e dei miei nonni, Olga ed Otello.

È ineffabile l'amore ed insostituibile l'amicizia che mi legano alla persona davvero speciale, che ho l'immensa fortuna di avere per Mamma. Il suo sostegno in ogni mia scelta, la fiducia che ripone in me e la sua presenza unica sono, da sempre, una certezza ed un pilastro. È a lei, in particolare, che vorrei dedicare questo mio lavoro, perchè il traguardo raggiunto oggi è riconducibile a lei più di quanto si possa immaginare. Per tutto quello che non sono in grado di comunicare a parole, grazie di cuore e l'abbraccio più forte.

Grande è il legame d'affetto che mi unisce al Babbo. Grazie infinite per la stima e le attenzioni dimostrate, per le parole, talvolta non pronunciate, ma ugualmente avvertite, per i cambiamenti maturati negli anni.

Un abbraccio enorme alla mia sorellina. La sua nascita, da me tanto desiderata, ha illuminato e riempito la mia vita. Sono orgogliosa di poterla

avere al mio fianco, felice di poter condividere con lei ogni momento, immensamente grata per l'impareggiabile simpatia, i saggi consigli, l'indissolubile affetto che mi regala e che si rafforza ogni giorno sempre di più.

Sono, inoltre, così fortunata da poter avere vicino a me anche i miei Nonni, che mi hanno aiutato a crescere in serenità e che mi accompagnano con tanta tenerezza. Alla Nonna Olga, a cui devo moltissimo, grazie mille per l'amorevole presenza che non smette mai di dimostrarmi, per il continuo incoraggiamento, per l'esempio di vita. Con il Nonno Otello ho trascorso dei momenti indimenticabili, che sicuramente sono tra i ricordi più belli che porto con me. La sua compagnia è stata per me fondamentale, così come lo è adesso la sua protezione.

Vorrei ringraziare, infine, Francesca, per il rapporto fraterno che ci lega da anni, Matteo, per l'amicizia sincera che condividiamo e tutti gli amici, che mi sono stati accanto con la propria presenza e partecipazione.

Introduzione

Prefazione

Alla base dell'elettronica e di tutte le sue applicazioni esiste uno stesso fenomeno: il movimento di carica elettrica, da cui scaturisce la definizione stessa di corrente, intesa come variazione della quantità di carica nell'unità di tempo. Infatti, operazioni come l'amplificazione di un segnale, tanto quanto la memorizzazione di un bit in una RAM da parte di un microprocessore, prevedono l'assunzione secondo cui l'informazione oggetto d'esame sia associata ad un flusso di corrente.

Il nuovo paradigma su cui si concentra la ricerca dell'elettronica di ultima generazione presuppone che l'informazione risulti associata allo spin dell'elettrone. Ecco che il grado di libertà appartenente allo spin sostituisce quello proprio della carica elettrica.

Ciò che risulta interessante, del resto, risiede nel fatto che le tecnologie basate sullo spin, ancora agli esordi, si mostrano compatibili con i materiali e le metodologie realizzative che sono utilizzati nell'elettronica tradizionale, planare, a semiconduttore, basata sul movimento di carica elettrica.

Tra gli scopi che si prefigge questo lavoro di tesi, il primo consiste nel fornire una panoramica sullo stato dell'arte raggiunto dalla spintronics, con particolare riferimento a quanto concerne le problematiche connesse alla realizzazione di dispositivi basati fondamentalmente sullo spin, mediante l'impiego di eterostrutture¹ a semiconduttore. L'ulteriore obiettivo raggiunto è costituito dalla scelta di un modello specifico di diodo tunneling interbanda risonante, costituito a partire da un'eterostruttura asimmetrica a doppia barriera di potenziale, realizzata mediante la successione InAs/GaSb/AlSb, proposto nell'intento precipuo di ottenere, come dispositivo circuitale, un filtro di spin [?].

Nel dettaglio, si è focalizzata l'attenzione su l'analisi fisico-matematica relativa e sulla simulazione effettiva del comportamento, ottenuta grazie ad un codice numerico realizzato in ambiente Matlab. In base ai diagrammi scaturiti, è stato possibile riscontrare un comportamento selettivo, ottenendo, pertanto, un reale filtraggio di spin, che avvalorava sperimentalmente quanto ipotizzato in sede teorica.

Sommario

Una volta definito il contesto in cui si inserisce la presente ricerca, si accenna, con la massima sintesi, all'argomento specifico di ciascun capitolo.

Il lavoro si suddivide in tre parti fondamentali, con l'aggiunta di una quarta, interamente dedicata alla bibliografia.

La prima parte, intitolata *Analisi Fisica dell'Effetto Rashba*, è comple-

¹Si definisce *eterostruttura* una struttura formata da semiconduttori di origine diversa.

tamente rivolta allo studio teorico delle problematiche fisiche coinvolte nel fenomeno oggetto d'esame. Si inquadra, innanzitutto, la disciplina, nota in letteratura, con l'acronimo *spintronics*, presentandone le caratteristiche costitutive peculiari, gli aspetti innovativi vantaggiosi che la differenziano dall'elettronica tradizionale, nonché le inevitabili problematiche, che ne rappresentano la contropartita.

Si prosegue definendo lo spin di un elettrone, proprietà esclusivamente quantistica, le cui innumerevoli potenzialità sono state solo recentemente comprese e sfruttate, e fulcro essenziale di tutta l'indagine. A tal scopo, si è rivelata imprescindibile un'analisi quantistica, di cui si sono riportati soltanto i concetti basilari adottati e gli strumenti matematici impiegati, perchè consoni per un'interpretazione dell'effetto Rashba, che non pretende di essere del tutto esaustiva, ma che certamente aspira ad essere almeno rigorosa.

A tal scopo, è proprio lo studio dell'effetto Rashba, vera e propria chiave di lettura dell'intera trattazione, che occupa, nelle varie sezioni costitutive, il terzo capitolo. Nel corpo centrale della tesi, infatti, l'attenzione è volta, nell'ordine, ad una breve presentazione della teoria perturbativa, che si trova largamente impiegata quando si affrontano problematiche analoghe a quella in questione e ad una sintesi dei concetti mutuati dalla fisica dello stato solido. Si prosegue con la definizione di una particolare simmetria reticolare, definita *simmetria d'inversione*, presente in materiali composti con struttura a zincoblenda, la cui assenza figura tra le cause che originano il fenomeno, e con la descrizione dell'effetto Zeeman, che si pone come termine di confronto con l'effetto Rashba. Si conclude, infine, passando in rassegna tutti i possibili dettagli inerenti il fenomeno in esame.

Nella seconda parte, intitolata *Analisi del Dispositivo ed Implementazione Numerica dell'Effetto Rashba*, si focalizzano dapprima le tematiche del tunneling risonante, accennando alle applicazioni che trovano largo impiego nell'elettronica dei dispositivi a semiconduttore tradizionali, per poi volgere l'interesse al filtro di spin, implementato con l'eterostruttura asimmetrica a semiconduttore, realizzata a partire dalla successione InAs/GaAs/AlSb, che si è assunta a paradigma di un'intera classe di dispositivi. In quest'ultima sezione, è possibile rintracciare sia l'indagine quantistica relativa al principio di funzionamento, sia i risultati di simulazione del fenomeno, ottenuta in ambiente Matlab, per quanto concerne il riscontro sperimentale dell'analisi teorica e la verifica degli obiettivi e dei comportamenti precedentemente ipotizzati.

Si conclude definitivamente con la terza parte, in cui si riassumono, sotto forma di due appendici, le notazioni adottate nel testo e le relazioni fondamentali a cui si è pervenuti.

Parte I

Analisi Fisica dell' Effetto

Rashba

Capitolo 1

Spintronics

1.1 *Definizione*

L'elettronica basata su dispositivi che utilizzano lo spin dell'elettrone per controllare il movimento di carica elettrica è riferita con il termine SPINTRONICS, acronimo che scaturisce dalla definizione SPIN TRansport eletrONICS [3] [4].

Come ulteriore obiettivo, questa branca dell'elettronica si prefigge quello di realizzare dispositivi la cui azione si basi direttamente ed esclusivamente sullo spin, con lo scopo di immagazzinare ed elaborare dati senza alcuna necessità di spostare la carica.

1.2 *Caratteristiche, Vantaggi e Svantaggi*

Effettuando un confronto tra l'elettronica tradizionale e la spintronics, si individuano alcune caratteristiche peculiari di quest'ultima, che si dimostrano

estremamente vantaggiose nelle possibili applicazioni.

Tra queste, si possono individuare le principali, che sono riportate di seguito:

1. *minor potenza richiesta*,
in quanto l'energia impiegata per il cambiamento dello spin risulta pari ad una minuscola frazione di quella necessaria per lo spostamento della carica;
2. *non-volatilità*,
in quanto gli spin non cambiano il loro stato anche se il dispositivo viene staccato dall'alimentazione;
3. *maggior velocità*,
per l'elaborazione dei dati;
4. *maggior densità di integrazione*.

La natura stessa dello spin e della teoria quantistica che lo descrive mostrano anche ulteriori possibilità, come la realizzazione dei seguenti componenti:

- porte logiche, le cui funzioni (AND, OR, NOR...) possono permutare con una frequenza pari a $\sim 10^9 Hz$;
- dispositivi che operano direttamente con fasci di luce polarizzata, così come con tensioni;
- elementi di memoria che si trovano in due stati distinti contemporaneamente.

Da questo si può evincere l'esistenza di tipologie di funzionalità completamente diverse da quelle a cui si è attualmente abituati ed, anzi, le più

sorprendenti sembrano proprio quelle neppure immaginabili.

A fronte di questi vantaggi, occorre tener presente le inevitabili problematiche da affrontare, tra cui la cosiddetta *SPIN INJECTION*, espressione con cui si intende il controllo lungo la direzione desiderata degli spin che sono "forzati" ad attraversare un materiale.

1.3 *Spin*

1.3.1 *Definizione*

A Goudsmit ed Uhlenbeck si deve l'idea di postulare, in un lavoro datato 1925, che l'elettrone possieda un grado di libertà interno, completamente svincolato ed indipendente dall'ambiente in cui si trova ad agire l'elettrone stesso¹. Questa non ancora ben definita entità fisica è pensata come una sorta di momento angolare intrinseco, in qualche modo dovuto ad un non meglio precisato movimento interno, riconducibile vagamente alla rotazione di un corpo intorno ad un asse passante per il proprio centro. Attualmente non si può certo prescindere dalla conoscenza che l'elettrone non si comporta affatto come una particella classica che ruota vorticosamente attorno al proprio nucleo. La denominazione *SPIN*, invece, deriva da questa idea, peraltro tanto suggestiva quanto chiarificatrice: ritenere che se l'elettrone possedeva un momento angolare pur senza essere legato al movimento nello spazio, allora si doveva comportare proprio come una trottola che girava. L'origine, infatti, deriva dal verbo inglese *to spin*.

¹Nel 1925, mentre lavorava alla sua tesi di dottorato di ricerca, per il conseguimento del Ph. D., presso l'Università di Leiden, nei Paesi Bassi, Uhlenbeck formulò, insieme con Goudsmit, il postulato sull'esistenza dello spin.

Ecco perchè alla nuova quantità in esame fu dato il nome di *MOMENTO ANGOLARE DI SPIN*.²

Si esamini il postulato di Goudsmit ed Uhlenbeck in dettaglio. Si assume che l'elettrone possenga un quarto grado di libertà³, lo spin appunto, che spiega l'insorgere anche del momento magnetico di spin⁴.

Per mantenere conformità con i risultati sperimentali, si ipotizzano due concetti chiave:

- le componenti di questo nuovo momento di spin lungo la direzione di un campo magnetico esterno applicato possono assumere soltanto due valori discreti;

²Per quanto concerne il momento angolare totale, il momento angolare di spin ed il momento angolare orbitale, si può rintracciare una trattazione più esaustiva in seguito.

³I primi tre gradi di libertà sono rappresentati, per una particella libera, dalle coordinate x, y, z oppure dai tre numeri quantici, che, per un atomo idrogenoide, sono rappresentati da:

- n , *numero quantico principale*, che etichetta le energie e le funzioni d'onda radiali;
- l , *numero quantico del momento angolare orbitale*, che specifica l'intensità appunto del momento angolare orbitale;
- m , *numero quantico magnetico*, che specifica la componente lungo la direzione privilegiata z del momento angolare orbitale.

I valori consentiti per i numeri quantici sono rispettivamente:

$$\begin{cases} n, & n=1, 2, 3, \dots; \\ l, & l= 0, 1, \dots, n-1; \\ m, & m= -l, -l+1, \dots, l-1, l. \end{cases}$$

⁴Questo concetto viene ripreso ed esplicitato in seguito a proposito dell'esperimento di Stern-Gerlach.

- il nuovo momento angolare di spin viene assunto in modo tale che si comporti in modo formalmente simile al momento angolare orbitale. Tale asserzione significa che, dall'analogia tra momento angolare di spin e momento angolare orbitale, possono essere corrisposte e mutuate alcune proprietà.

Come si può facilmente intuire, non esisteva garanzia alcuna che un tale stratagemma potesse effettivamente funzionare e non rivelarsi una mera entità costruita "ad hoc". In realtà, esperimento dopo esperimento, il presupposto si rivelava sempre più fondato, dal momento che i risultati non solo non riuscivano a dimostrarne la falsità, ma anzi ne palesavano i più riconosciuti risvolti.

Nel 1928, infine, il postulato sull'esistenza dello spin perse formalmente la ragione della sua esistenza, ed il merito deve essere ricondotto a Paul Dirac, che derivò nuovamente la meccanica quantistica, includendo i presupposti della teoria speciale sulla relatività di Albert Einstein. Nel suo lavoro⁵, si dimostra che l'esistenza e l'intero formalismo riguardante lo spin dell'elettrone scaturisce direttamente dalla teoria relativistica ed è per ciò che non necessita affatto di un postulato [5].

A fronte di tale derivazione immediata, si riscontra una difficoltà assolutamente da non sottovalutare nell'adozione della teoria di Dirac, che va oltre l'obiettivo che la presente tesi si prefigge: di conseguenza, la precisazione è stata riportata per completezza, ma senza rinunciare, nel seguito della trattazione, al postulato originario sullo spin.

⁵P. A. M. Dirac, *Principles of Quantum Mechanics*, 4th ed. New York: Clarendon University Press, 1958

1.3.2 Proprietà

Lo spin rimane di fatto un mistero insondato. Così come la carica e la massa, è una proprietà *intrinseca*, propria di due grandi categorie di particelle subatomiche:

- i *fermioni*, così nominati in onore di Enrico Fermi, a cui appartengono elettroni, protoni e neutroni;
- i *bosoni*, così nominati in onore di Satyaendra Nath Bose, a cui appartengono i fotoni.

Tra le caratteristiche distintive delle due categorie di particelle, si riscontra la proprietà in base alla quale lo spin di un bosone è misurabile come un numero intero (0, 1, 2...) di unità, mentre i fermioni sono dotati di uno spin pari a $\frac{1}{2}$, $\frac{3}{2}$, $\frac{5}{2}$ di unità, considerando come unità di riferimento la costante di Planck normalizzata, cioè $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, con $h = 6.626 \times 10^{-34} Js$.

La quantità di spin posseduta da una particella può essere espressa in termini di \hbar ed inoltre⁶, dato che in una teoria quantistica tutto si presenta in quantità discrete, le particelle possono per questo assumere i valori di spin pari a $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$

In pratica, però, per la fisica delle particelle, i fermioni hanno spin $\frac{1}{2}$ ed i bosoni hanno spin 0 o 1. La differenza può sembrare di importanza marginale, ma assume profonde implicazioni per il loro comportamento in un mondo in cui le regole sono fissate da una teoria quantistica. Una tra le molte differenze che ne conseguono è rappresentata dal fatto che due bosoni possono occupare esattamente la stessa posizione nello stesso istante di tempo, mentre a due fermioni questo è impedito, in base al principio di esclusione di Pauli.

⁶Per ulteriori dettagli, si può ricorrere alla sezione (§ 2.1, pag.16) di questo lavoro relativa all'esperimento di Stern-Gerlach.

Nella teoria standard, le particelle materiali, come gli elettroni e gli altri leptoni ed i quark, sono fermioni, mentre i quanti che trasmettono le interazioni sono bosoni [9].

1.3.3 *Spin e Momento Angolare*

Il concetto dello spin risulta difficile da padroneggiare perchè non esiste il corrispettivo nel mondo macroscopico⁷. Risulta conveniente, come si è accennato, l'analogia con ciò che ne rappresenta la più simile controparte: il momento angolare di un corpo in rotazione.

Ma sussistono delle differenze sostanziali.

Mentre il momento angolare cessa al termine della rotazione del corpo, così che si annovera tra le proprietà *estrinseche*, lo spin è una sorta di *MOMENTO ANGOLARE INTRINSECO*, che una particella non guadagna né perde. Tale analogia, inoltre, non risulta formalmente valida, in quanto lo spin non scaturisce dalla rotazione, né l'elettrone possiede dimensioni fisiche, come un raggio; ecco che, nel significato classico, la relazione di affinità non ha proprio senso. A rigore, il momento angolare di una particella assimilata ad un punto prevede, nell'accezione classica, il prodotto vettoriale del raggio vettore e della quantità di moto; ma, le due grandezze interessate non possono essere oggetto di una misura simultanea perchè coniugate⁸.

⁷In particolare, come si avrà modo di illustrare meglio in seguito, la proprietà dello spin è di natura squisitamente quantistica. In base all'esperimento di Stern-Gerlach, (§2.1, pag.10), si dedurrà che risulta proporzionale a \hbar , come già accennato; ma allora essa scompare nell'effettuare il passaggio al limite classico $\hbar \rightarrow 0$ e, di conseguenza, non ammette un'interpretazione classica.

⁸A tal proposito, si veda più avanti (§ 2.3.1 pag.16) per una spiegazione più dettagliata.

Una differenza significativa tra lo spin ed il momento angolare orbitale consiste nel fatto che è possibile cambiare il valore dell'intensità del momento angolare orbitale di una particella, mediante l'applicazione di campi esterni, ma non è altrettanto consentito per quanto attiene il suo spin. Infatti, per ogni particella, l'intensità del suo spin è stabilita dal numero di componenti presenti nella funzione d'onda associata e risulta una quantità invariante. Ecco perchè lo spin di un elettrone è sempre pari a $\frac{1}{2}$, in termini di \hbar , che è sempre assunta come unità di misura di riferimento. In un certo qual modo, lo spin può essere ritenuto un'*etichetta* per la particella, dato che, essendo invariante, costituisce una quantità identificativa, proprio perchè una volta stabilita rimane costante alla stessa maniera della carica.

1.3.4 *Momento Angolare Totale: Meccanica Classica e Meccanica Quantistica a Confronto*

Nella definizione dello spin e nella sezione precedente, si è fatto ricorso alla nozione di momento angolare fornito dalla fisica classica; questo continuo intrecciarsi tra meccanica classica e meccanica quantistica comporta un conseguente continuo richiamo tra l'una e l'altra branca della fisica.

Sembra così doveroso effettuare qui una sorta di punto della situazione riguardo ai concetti di momento coinvolti per una particella.

Il *momento angolare orbitale* di una particella è legato al moto della stessa particella nello spazio che la circonda.

In ambito classico, si ha la seguente definizione:

Momento Angolare Orbitale. *Data una particella classica, dotata di massa m , che si muove con velocità \mathbf{v} lungo una traiettoria⁹ a distanza \mathbf{r} dall'origine del sistema di riferimento, si definisce la sua quantità di moto, o momento lineare, il prodotto $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Il prodotto vettoriale tra il raggio vettore e la quantità di moto è allora definito momento angolare orbitale o momento della quantità di moto¹⁰.*

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1.1)$$

Il momento angolare intrinseco \mathbf{S} della particella è riferito, come già noto, come spin della particella; del momento angolare legato al suo moto nello spazio, si è visto che si è tenuto conto con il momento angolare orbitale. Non resta, allora, che definire il **Momento Angolare Totale** della particella, che scaturisce dalla somma delle due precedenti quantità¹¹.

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L} \quad (1.2)$$

⁹L'attributo *classica* riferito alla particella in esame non è ridondante. È stato sottolineato, infatti, che per la particella è possibile definire una traiettoria, come invece sarebbe impedito nel caso in cui la particella fosse quantistica, in base al principio di indeterminazione di Heisenberg.

¹⁰Si noti come, già dalla notazione, esista un legame tra il momento angolare orbitale ed il secondo numero quantico l , che rappresenta un autovalore proprio di \mathbf{L} . Per il problema agli autovalori di un operatore (cfr. §2.2.)

¹¹La relazione che lega il momento angolare di spin con quello angolare può essere vista come l'analogo quantistico della legge classica del momento angolare totale di un sistema, che si esprime come somma vettoriale di tutti i momenti angolari relativi alle singole parti del sistema.

Esiste una legge, nota come *legge di composizione dei momenti angolari*, la cui validità in ambito classico persiste anche in quello quantistico, che garantisce la seguente proprietà [11].

Legge di composizione dei momenti angolari. *Sia dato un sistema fisico, che, per certe considerazioni ed in particolari condizioni, possa essere considerato come una struttura composta da due sottosistemi, ciascuno con momento angolare. Dato che le tre componenti del momento angolare orbitale sono variabili, di cui due dinamiche¹², che soddisfano tutte alla proprietà di additività, allora il momento angolare totale del sistema globale è esprimibile come somma dei momenti angolari parziali.*

In base alla legge appena enunciata, si può dare almeno una giustificazione più fondata della composizione dei momenti angolari, orbitale e di spin, per l'espressione di quello totale della particella.

Dalla meccanica classica a quella quantistica, è ancora valida un'altra fondamentale proprietà: la *Legge di conservazione del momento angolare*.

Nell'approssimazione non relativistica, gli stati stazionari dell'atomo sono deducibili dall'equazione di Schrödinger, riferita al sistema di elettroni, che sono sottoposti sia al campo coulombiano del nucleo quanto all'interazione elettrica reciproca. In questa equazione, non compaiono però gli operatori di spin degli elettroni.

¹²Ricordando la definizione di momento angolare orbitale, si ha $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$. Raggio vettore, velocità e massa sono dunque le tre variabili a cui si fa riferimento, di cui le prime due dinamiche.

In realtà, tuttavia, allargando la prospettiva, si ha che nell'interazione elettromagnetica tra gli elettroni esistono sempre degli effetti relativistici imputabili ai loro spin. Non è certo questo l'ambito d'indagine del presente lavoro; si lasceranno quindi ulteriori approfondimenti relativi al problema, che coinvolgono la sfera della meccanica relativistica. Tuttavia, sembra alquanto interessante evidenziare l'aspetto seguente: l'interazione elettromagnetica tra i vari elettroni comporta, tra l'altro, il fatto che l'energia dell'atomo dipende non solo dal valore dei momenti \mathbf{L} e \mathbf{S} , ma anche dalla loro mutua disposizione. In altri termini, il momento angolare orbitale \mathbf{L} ed il momento angolare di spin \mathbf{S} non si conservano più separatamente. Ciò che non viene a mancare, però, è la conservazione del momento angolare totale $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$. Rimane, pertanto, assicurata la legge generale di conservazione del momento angolare e così si scopre ancora di più, se mai fosse necessario, l'enorme importanza di aver definito la quantità \mathbf{J} .

1.3.5 *Dinamica di Spin*

L'obiettivo che questa sezione si prefigge riguarda la ricerca dell'Hamiltoniana dello spin, basandosi sull'analogia con il mondo classico; a tal scopo, si richiamano dapprima alcune idee della magnetostatica classica.

Si consideri una spira quadrata percorsa da corrente I , immersa in un campo magnetico \mathbf{B} . Dall'espressione della forza magnetostatica per unità di lunghezza, che agisce su di un conduttore percorso da corrente, si ha che il momento torcente della spira è fornito dall'espressione:

$$\mathbf{T} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{B}$$

con

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{IA}{c} \mathbf{e}_\perp$$

MOMENTO MAGNETICO

avendo indicato con

A area della spira;

c velocità della luce;

\mathbf{e}_\perp versore ortogonale al piano della spira.

L'effetto del momento torcente della spira, rappresentato da \mathbf{T} , consiste nel far torcere la spira fino a che $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} non risultano paralleli. Questo accade se intervengono delle forze a carattere dissipativo¹³.

Dato che si è interessati alla fine ad un problema di meccanica quantistica, si riassume l'interazione tra la spira ed il campo magnetico in termini di energia potenziale associata al momento torcente, così da ricondursi poi all'Hamiltoniana¹⁴ del corrispettivo quantistico.

Se si indica con θ l'angolo compreso tra $\boldsymbol{\mu}$ e \mathbf{B} , allora l'energia di interazione può essere espressa come

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \int T(\theta) d\theta = \int \mu B \sin \theta d\theta = -\mu B \cos \theta = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$$

Questa espressione non è in realtà l'Hamiltoniana completa, dal momento che non include l'energia cinetica della spira, ma soltanto l'energia potenziale di interazione con il campo magnetico.

¹³In caso contrario, infatti, cioè quando sono assenti le forze dissipative, si riscontra solo il fenomeno della *precessione* intorno all'asse di rotazione, di cui si parla tra breve.

¹⁴In termini intuitivi, l'Hamiltoniana \mathcal{H} di un dato sistema è esprimibile come la somma dell'energia cinetica e di quella potenziale proprie del sistema stesso.

In accordo a quanto già accennato, questa energia risulta minimizzata per $\boldsymbol{\mu}$ parallelo a \boldsymbol{B} , ovvero quando si annulla il prodotto scalare tra le due quantità.

Ora, anche se si sono ricavate per il caso di una spira quadrata, tali equazioni risultano valide per qualunque spira planare, di spessore trascurabile rispetto alle altre due dimensioni, su cui si estende un campo magnetico costante. In tale contesto può essere inserito il problema inerente una particella di massa m , dotata di carica q , che si muove con velocità \boldsymbol{v} compiendo un'orbita approssimativamente circolare di raggio r . La corrente associata a questa carica è data da

$$I = \frac{qv}{2\pi r}$$

ed il *momento angolare magnetico* è caratterizzato da un'intensità pari a

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{qv}{2\pi r} \frac{\pi r^2}{c} = \frac{q v r}{2c} = \frac{q}{2mc} m v r = \frac{q}{2mc} \boldsymbol{l}$$

con l intensità del momento angolare magnetico.

Dato che $\boldsymbol{\mu}$ ed \boldsymbol{l} sono tra loro paralleli, allora è lecito scrivere

$$\boldsymbol{\mu} = \frac{q}{2mc} \boldsymbol{l} \quad (1.3)$$

Il coefficiente che lega $\boldsymbol{\mu}$ ad \boldsymbol{l} è definito *RAPPORTO GIROMAGNETICO* ed è indicato con $\gamma = \frac{q}{2mc}$.

Ora, mentre nel caso di una spira percorsa da corrente, l'effetto del momento torcente \boldsymbol{T} è quello di far allineare¹⁵ $\boldsymbol{\mu}$ a \boldsymbol{B} , la situazione cambia quando $\boldsymbol{\mu}$ trae origine dal momento angolare, così come accade nel caso della particella

¹⁵Si ricordi quanto già precisato in merito all'effetto del momento torcente, che si limita alla precessione solo in assenza di forze di natura dissipativa. Qualora quest'ultime siano effettivamente non trascurabili, allora il momento torcente dà origine all'allineamento di $\boldsymbol{\mu}$ e di \boldsymbol{B} .

in esame. In questo contesto, \mathbf{T} causa il fenomeno della *PRECESSIONE* di $\boldsymbol{\mu}$ attorno a \mathbf{B} e ciò si verifica con una frequenza pari proprio a

$$\boldsymbol{\omega}_0 = -\gamma \mathbf{B}.$$

La quantità

$$\beta = \frac{q\hbar}{2mc}$$

è definita *MAGNETONE DI BOHR*; in particolare, se riferita all'elettrone, risulta di entità pari a

$$\beta = \frac{e\hbar}{2mc} \simeq 0.610^{-8} eV/G,$$

avendo indicato con e la carica dell'elettrone.

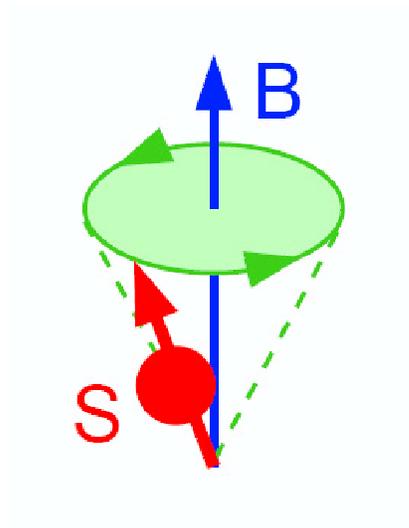


Figura 1.1: Schematizzazione grafica del fenomeno della precessione di spin.

In definitiva, nel caso dell'elettrone, si ha che il momento angolare magnetico $\boldsymbol{\mu}$ dell'elettrone risulta legato al momento angolare orbitale ed al momento angolare di spin¹⁶ secondo le seguenti relazioni:

¹⁶Questa equazione viene ripresa anche in seguito, perchè utile nell'esperimento di Stern-Gerlach; cfr. § 2.1.1

$$\boldsymbol{\mu}_L = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \quad (1.4)$$

$$\boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{mc} \mathbf{S} \quad (1.5)$$

1.3.6 *Spin e Magnetismo*

Il magnetismo è una manifestazione macroscopica della presenza dello spin¹⁷. Infatti, lo spin è la caratteristica che rende l'elettrone un minuscolo ma completo magnete, dotato di nord e sud. L'orientazione dell'asse nord-sud dell'elettrone dipende dall'asse dello spin della particella.

In alcuni atomi di materiali ordinari, alcuni di questi assi di spin sono rivolti "in alto" (*spin up*), mentre un egual numero puntano "in basso" (*spin down*).

1.4 *Dispositivi Basati su Semiconduttori e su Materiali Ferromagnetici*

L'approccio tradizionale per l'utilizzo dello spin si basa sull'allineamento di uno spin, sia up che down, in riferimento ad un campo magnetico applicato. Le funzioni del dispositivo muovono così a partire dalla corrente elettrica che dipende dal grado di allineamento degli stessi spin. In questo contesto si inseriscono dispositivi come l'*MJT*, acronimo per *Magnetic Tunnel Junction*, che è alla base del funzionamento delle *MRAM* (*Magnetoresistive Random Access Memory*) [6], che sfruttano il fenomeno di isteresi magnetica per immagazzinare dati e quello della magnetoresistività per poterli leggere.

¹⁷Il momento magnetico di spin tiene conto proprio di quest'aspetto.

L'alternativa a questo tipo di approccio consiste nell'impiego di strutture realizzate con semiconduttori, a cui non viene applicato alcun campo magnetico esterno; ed è proprio in questo contesto che si inserisce il caso dell'eterostruttura di cui si occupa questa tesi.

Capitolo 2

Concetti Fondamentali di Meccanica Quantistica

In questo capitolo si focalizzano alcuni dei concetti fondamentali alla base della meccanica quantistica, la cui comprensione si rivela preziosa per la corretta interpretazione dei fenomeni particolari, quali l'effetto Rashba, a cui è rivolta, nello specifico, l'attenzione di questo lavoro. A questo proposito, la trattazione che viene proposta di seguito, ha lo scopo di evidenziare alcune problematiche di carattere generale, che impongono una "forma mentis" rivolta alla fisica quantistica ed un linguaggio, costituito dalle equazioni matematiche con cui si descrivono, che si distinguono da quelli a cui si è abituati dalla fisica classica.

Si esordisce con una breve discussione dell'esperimento di Stern-Gerlach, che viene spesso assunto a paradigma per illustrare proprio la necessità di un allontanamento dai concetti della meccanica classica.

Si procede con una sintesi della matematica a cui si ricorre, proponendo una definizione dello spazio dei ket e di quello dei bra ed una introduzione alle

relative proprietà peculiari.

Si conclude passando in rassegna il processo di misurazione di una grandezza fisica, che comporta una serie di conseguenze imprescindibili nella trattazione seguente.

2.1 *Esperimento di Stern-Gerlach*

L'esperimento di Stern-Gerlach [7] viene qui riportato, anche se a sommi capi, perchè fornisce una chiave di lettura preziosa ai fini di una maggiore comprensione della meccanica quantistica.

2.1.1 *Descrizione dell'Esperimento*

La versione originaria dell'esperimento prevede di considerare un fascio di atomi di argento¹, che, dopo essere stati riscaldati in un forno dotato di una piccola fessura, vengono fatti passare attraverso un collimatore ed infine vengono sottoposti all'azione di un campo magnetico, prodotto da poli (fig.2.1).

Questo campo magnetico viene considerato diretto lungo l'asse \hat{z} e non uniforme rispetto alle variazioni riferite a z , così che può essere espresso come

$$\frac{\partial B_z}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial B_z}{\partial y} = 0; \quad \frac{\partial B_z}{\partial z} \neq 0.$$

L'atomo di argento considerato, composto da un nucleo e da 47 elettroni, viene ad essere modellato come una nube elettronica simmetrica, priva di momento angolare complessivo, ed un elettrone "isolato", dell'orbitale $5s$.

¹Risultati analoghi a quelli discussi nel seguito furono ottenuti da Phipps e Taylor, nel 1927, utilizzando atomi di idrogeno al posto di quelli di argento.

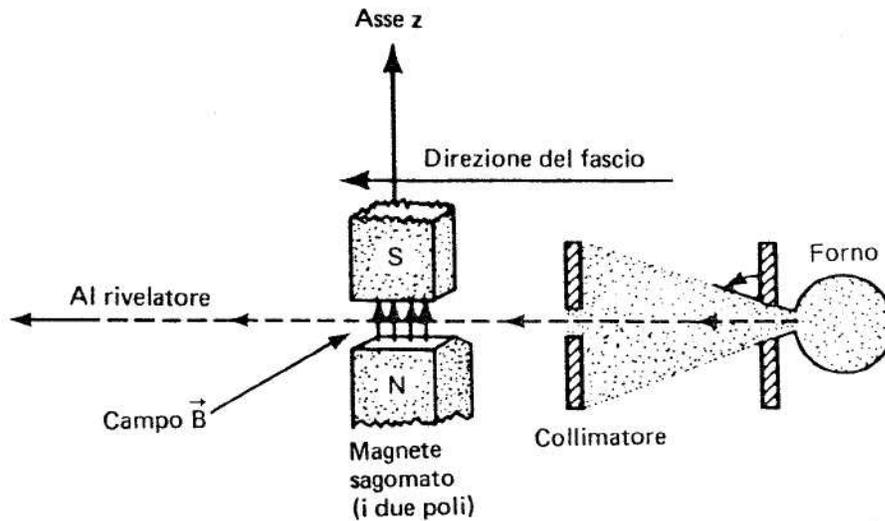


Figura 2.1: Esperimento di Stern-Gerlach. (L'immagine è tratta da [8].)

In definitiva, il momento angolare dell'intero atomo dipende esclusivamente dal momento angolare di spin dell'unico elettrone considerato separato dalla nube. Il momento magnetico $\boldsymbol{\mu}$ dell'atomo risulta proporzionale al momento di spin dell'elettrone secondo la relazione (1.5).

Ora, dato che ciascuno degli atomi del fascio possiede un momento magnetico con componente non nulla lungo la direzione z , allora interviene una forza sull'intero fascio, che subisce una deflessione. In termini più precisi, si ha che l'energia di interazione del momento magnetico di ogni atomo con il campo magnetico in azione è esprimibile come $\propto -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$. Da questo segue che la componente lungo z della forza a cui l'atomo è soggetto è data dalla relazione

$$F_z = \frac{\partial}{\partial z} (\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}) \simeq \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}.$$

Se l'atomo, ed in sostanza il 47-esimo elettrone in esame, fosse assimilabile ad un dipolo magnetico classico, allora si potrebbe predire con certezza che il momento magnetico medio potrebbe assumere qualunque valore compreso nell'intervallo di estremi

$$-\frac{e}{2mc} |\mathbf{L}| \leq \bar{\boldsymbol{\mu}} \leq \frac{e}{2mc} |\mathbf{L}|.$$

Si considera che il fascio di elettroni si suddivida in base ai valori di μ_z , supponendo cioè che l'apparato di Stern-Gerlach misuri la componente di \mathbf{S} a meno di un fattore di proporzionalità.

In definitiva, secondo quanto suggerito dalla teoria classica, al rivelatore dovrebbe apparire una banda continua. Si verifica, invece, che al di là di ogni aspettativa, il fascio di elettroni subisce uno splitting in due componenti distinte e dunque non esiste affatto una distribuzione continua di fasci emergente dal dispositivo, come nel caso classico (fig.2.2). Ciò che si rivela piuttosto è una *QUANTIZZAZIONE SPAZIALE* del momento angolare di spin, per il quale esistono due soli valori possibili, che sono indicati con la notazione S_{z+} ed S_{z-} e definiti come riportato di seguito:

$$\begin{cases} S_{z+} = \frac{\hbar}{2}, \\ S_{z-} = -\frac{\hbar}{2}. \end{cases} \quad (2.1)$$

Questo risultato dell'esperimento di Stern-Gerlach si rivela di importanza strategica perchè dimostra la necessità di spiegare i fenomeni fisici inerenti la meccanica quantistica con concetti del tutto nuovi rispetto a quelli più familiari della meccanica classica².

²In realtà, dall'esperimento di Stern-Gerlach è possibile evincere anche altri risultati rispetto a quello riportato. Per approfondire l'argomento risulta molto utile la trattazione disponibile in J. J. Sakurai *Meccanica Quantistica Moderna*.

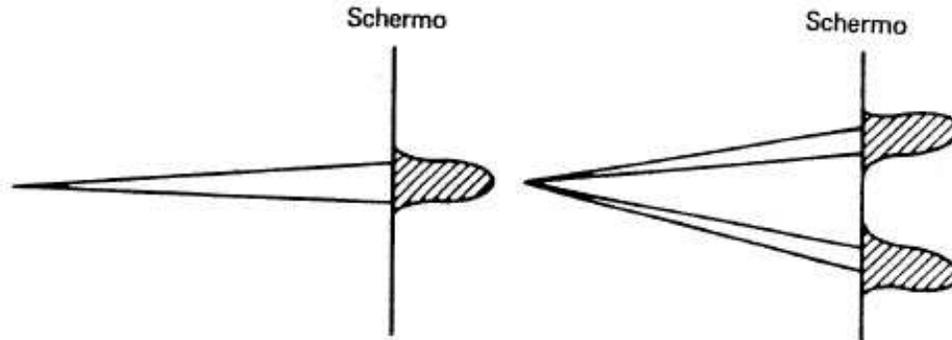


Figura 2.2: Rappresentazione grafica del fascio di elettroni emergente da un dispositivo di Stern-Gerlach. L'immagine sulla sinistra evidenzia la banda continua predetta dalla teoria classica; quella sulla destra, invece, mostra quanto effettivamente osservato. Il fascio di elettroni subisce uno splitting in due componenti distinte, prova della *QUANTIZZAZIONE SPAZIALE* del momento angolare di spin. (L'immagine è tratta da [8].)

2.2 Cinematica di Spin

Come risultato dell'esperimento di Stern-Gerlach, si è dedotta la quantizzazione del momento angolare di spin appartenente all'elettrone, espresso dal sistema (2.1).

Si può esprimere la stessa relazione in modo più sintetico ed esaustivo, ricorrendo ad una notazione compatta, che si propone di seguito, a cui normalmente si fa riferimento in letteratura.

In generale, dunque, è valida l'equazione:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.2)$$

con $\boldsymbol{\sigma}$ *matrici di Pauli*, così definite:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -j \\ j & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{array} \right.$$

Nel proseguio della presente trattazione, laddove si accenna alla presenza dello spin, si sottintende proprio la forma appena presentata.

2.3 *Ket e Bra*

SPAZIO DEI KET. Si considera uno spazio vettoriale complesso³ \mathbb{H} , la cui dimensionalità è specificata dalla natura del sistema fisico in esame.

In meccanica quantistica, uno stato fisico è rappresentato da un *vettore di stato* in un spazio vettoriale. Secondo la notazione di Dirac, tale vettore è definito *KET* ed è indicato con $|\alpha\rangle$.

Un postulato fondamentale è il seguente.

Postulato. *Il ket di stato contiene tutte le informazioni relative allo stato fisico in esame.*

³Lo spazio vettoriale complesso considerato viene indicato con la lettera \mathbb{H} perchè, in generale, risulta soddisfare le proprietà di uno spazio di Hilbert. Il campo degli scalari associati allo spazio \mathbb{H} è dato dallo spazio \mathbb{C} .

Tra le proprietà di base si annoverano le seguenti:

- $|\alpha\rangle + |\beta\rangle = |\gamma\rangle$
la somma di due ket è ancora un ket;
- dato un numero complesso $c \in \mathbb{C}$, allora $c|\alpha\rangle$ è ancora un ket.

Si postula inoltre che $|\alpha\rangle$ e $c|\alpha\rangle$ rappresentino lo stesso stato fisico. Da questo segue che, nello spazio degli stati, ciò che risulta davvero significativa è la direzione, e non tanto il modulo; è per questo che spesso si trova in letteratura la trattazione dei ket assimilata ai raggi piuttosto che ai vettori.

L'oggetto dell'analisi fisica è definito *SISTEMA* ed alle sue proprietà, come energia e quantità di moto, ci si riferisce con il termine *VARIABILI DINAMICHE*⁴ sostituito talvolta dalla espressione *OSSERVABILI*.

In realtà, le due denominazioni non sono immediatamente equivalenti. Si consideri, infatti, la definizione rigorosa:

Osservabile. *Sia A un operatore COMPLETO, nel senso che i suoi autovettori formano una base dello spazio di Hilbert⁵. Una variabile dinamica è allora definita OSSERVABILE se il corrispondente operatore quantistico è hermitiano⁶.*

⁴Le *variabili dinamiche* sono grandezze che caratterizzano il moto dell'elettrone o, in generale, di qualsiasi oggetto che obbedisce alle leggi della meccanica quantistica; si distinguono dalle grandezze o parametri che caratterizzano, invece, l'oggetto quantistico come particella (carica, massa).

⁵A tal proposito, si ricorda l'enunciato del *TEOREMA SPETTRALE per spazi di Hilbert*, che asserisce che se un operatore è hermitiano, allora è completo.

⁶Per approfondire ulteriormente la questione, può risultare interessante J. Chahoud *Meccanica Quantistica-Nascita e Sviluppo*- Pitagora Editrice Bologna (1987).

Nella definizione precedente, si è implicitamente sfruttato un principio, noto come *principio di corrispondenza*⁷, in base al quale si ha quanto segue.

Ad ogni osservabile fisica corrisponde un operatore hermitiano che agisce sullo spazio dei ket⁸.

Esiste un teorema, peraltro, che risulta utile per decidere se una variabile dinamica possa essere considerata un'osservabile o meno. Senza scendere comunque eccessivamente nel dettaglio, merita soffermarsi ad analizzare almeno un caso. Un esempio particolarmente degno di nota, riguarda infatti l'energia. È ragionevole supporre che sia sempre un'osservabile, ma ciò può non essere rigorosamente valido. Il problema dell'energia, del resto, riveste un ruolo di importanza primaria, anche nel seguito di questo lavoro, ed è per questa ragione che merita qui di essere scandagliato.

Si consideri il caso di una particella di massa m , dotata di carica, soggetta ad un campo di forze derivabile da un potenziale: l'energia del sistema coincide con l'Hamiltoniana. La questione da derimere inerente l'energia si riduce così a valutare se l'Hamiltoniana possa essere trattata sempre come osservabile. In realtà, non esiste una dimostrazione generale che asserisca la completezza dell'operatore Hamiltoniana; viene, pertanto, a non essere assicurata una delle due condizioni necessarie viste nella definizione. Tuttavia, nei casi in cui per tale operatore il problema agli autovalori⁹ è esattamente solubile, allora i suoi autostati formano un insieme completo.

⁷Per maggiori dettagli riguardanti il principio di corrispondenza, si può trovare utile la digressione svolta nella sezione § 6.2.1, con particolare riferimento alla tabella (6.1).

⁸In particolare, si ha che la corrispondenza tra l'osservabile fisica e l'operatore, così come lo spazio dei ket sul quale agisce quest'ultimo, dipende direttamente dal sistema fisico considerato.

⁹Il problema agli autovalori consiste nel risolvere l'omonima equazione, che viene riportata nella pagina seguente.

Questo avvalora l'iniziale supposizione ed ecco giustificato il fatto che l'energia d'ora in poi è sempre trattata come un'osservabile.

Ora, nello spazio dei ket, un'osservabile di un dato sistema fisico viene rappresentata da un operatore; nel proseguo, sarà indicato con la lettera maiuscola A . In generale, un operatore agisce su di un ket da sinistra e l'azione di un operatore su di un ket produce il vettore

$$A| \alpha \rangle .$$

Esiste, tuttavia, una classe particolare di ket, denominati *AUTOKET* e riconoscibili nella notazione dalla presenza dell'apice, che godono della seguente proprietà peculiare, che li contraddistingue dagli altri ket:

dati gli autoket $| a' \rangle, | a'' \rangle, | a''' \rangle, \dots$

$$\Rightarrow \begin{cases} A| a' \rangle = a'| a' \rangle \\ A| a'' \rangle = a''| a'' \rangle \quad a', a'', a''' \text{ numeri} \\ A| a''' \rangle = a'| a''' \rangle \end{cases}$$

Gli autoket di A formano una base su tutto lo spazio dei ket.

L'applicazione di un operatore A ad un autoket riproduce lo stesso ket a meno di un fattore moltiplicativo: l'azione dell'operatore, quindi, consiste semplicemente in una sorta di riscaldamento e lo stato descritto risulta lo stesso.

L'insieme $\{a', a'', a''', \dots\}$ è costituito da numeri ed è indicato come *INSIEME DEGLI AUTOVALORI dell'operatore A*.

Lo stato fisico corrispondente ad un autoket viene definito *AUTOSTATO*.

Si torni ancora sul concetto di autovalore, inquadrandolo da un altro punto di vista. Sia A il solito operatore lineare, definito sullo spazio di Hilbert.

Si consideri allora l'equazione:

$$A|\alpha\rangle = a|\alpha\rangle \quad (2.3)$$

EQUAZIONE AGLI AUTOVALORI PER L'OPERATORE A.

I possibili valori di a che la soddisfano sono indicati con il termine *AUTOVALORI* ed i relativi vettori con *AUTOVETTORI*, o equivalentemente, nella dizione di Dirac qui adottata, *AUTOKET*.

Dopo aver fornito un po' di nomenclatura, si conclude questo paragrafo con una considerazione a proposito dei sistemi di spin $\frac{1}{2}$, per i quali la proprietà relativa agli autoket è espressa dal sistema

$$\begin{cases} S_z |S_z; +\rangle = \frac{\hbar}{2} |S_z; +\rangle, \\ S_z |S_z; -\rangle = \frac{\hbar}{2} |S_z; -\rangle, \end{cases}$$

con $|S_z; +\rangle$ ed $|S_z; -\rangle$ autoket dell'operatore S_z e con $+\frac{\hbar}{2}$ e $-\frac{\hbar}{2}$ autovalori.

SPAZIO DEI BRA. Lo spazio vettoriale complesso duale rispetto a quello dei ket è indicato con l'espressione *SPAZIO DEI BRA*.

Si postula, infatti, che $\forall \text{ ket } |\alpha\rangle \exists \text{ un bra } \langle\alpha|$.

In modo del tutto analogo a quanto già visto per lo spazio dei ket, esiste un insieme di autobra, $\{\langle a' |, \langle a'' |, \langle a''' |, \dots\}$, che costituisce la base per lo spazio dei bra e che corrisponde a quello degli autoket $\{| a' \rangle, | a'' \rangle, | a''' \rangle, \dots\}$; si evince pertanto una corrispondenza duale tra lo spazio dei ket e quello dei bra.

Postulato. Dato un ket $c|\alpha\rangle$, con $c \in \mathbb{C}$, il bra duale è dato da $c^* \langle\alpha|$, con $c^* \in \mathbb{C}$ (e non da $c \langle\alpha|$ come si potrebbe erroneamente supporre)¹⁰.

Prodotto Interno. Dato un ket $|\alpha\rangle$ ed un bra $\langle\beta|$, si definisce il loro *PRODOTTO INTERNO* come

$$\langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle).$$

Tra le proprietà fondamentali del prodotto interno, si annoverano le seguenti tre:

1. $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle\alpha|\beta\rangle^*$, dunque $\langle\beta|\alpha\rangle$ e $\langle\alpha|\beta\rangle$ sono tra loro complessi coniugati;
2. $\langle\alpha|\alpha\rangle \geq 0$ questo è noto come *postulato della metrica definita positiva* e l'uguaglianza è valida solo nel caso di $|\alpha\rangle$ ket nullo;
3. dati il ket $|\alpha\rangle$ ed il bra $\langle\beta|$, se soddisfano alla condizione $\langle\beta|\alpha\rangle = 0 \Rightarrow |\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ sono ortogonali tra loro.

¹⁰Seguendo la notazione tradizionale, l'asterisco indica, per convenzione, il numero complesso coniugato.

Prodotto Esterno. Dato un ket $|\alpha\rangle$ ed un bra $\langle\beta|$, si definisce il loro *PRODOTTO ESTERNO* come

$$(|\alpha\rangle) \cdot (\langle\beta|) = |\alpha\rangle\langle\beta|. \quad (2.4)$$

Il risultato di un prodotto esterno è un operatore e così è formalmente ben diverso da un numero, che invece un prodotto interno dà per suo risultato.

Riassumendo:

$$\begin{cases} \langle\beta|\alpha\rangle = (\langle\beta|) \cdot (|\alpha\rangle) \rightarrow \text{prodotto interno} \rightarrow \text{numero}, \\ |\alpha\rangle\langle\beta| = (|\alpha\rangle) \cdot (\langle\beta|) \rightarrow \text{prodotto esterno} \rightarrow \text{operatore}. \end{cases}$$

2.4 Misurazione di Osservabili

Una misura fa sempre saltare il sistema in un autostato della variabile dinamica che si misura.

Questa espressione di Dirac sintetizza un concetto di importanza rilevante per quanto concerne la misurazione di un fenomeno fisico, che assume un valore specifico non indifferente all'interno di un contesto ingegneristico, che dalle misure trae materiale per la propria ricerca. Ecco il motivo per cui si ritiene interessante affrontare questo argomento.

2.4.1 Processo di Misura

Prima di intraprendere la trattazione formale inerente *il processo di misura*, conviene introdurre alcune nozioni introduttive di meccanica quantistica.

Tra le caratteristiche peculiari di quest'ultima, che la distinguono da quella classica [30], si individuano le seguenti:

- esiste la necessità di definire un numero finito di classi di osservazioni effettuabili;
- lo spazio dei valori, che rappresentano le misure ottenute a seguito di un qualunque esperimento, può essere discreto, invece che continuo. Ciò implica che, in questo caso, il risultato deve appartenere ad un insieme numerabile di valori ammessi come possibili;
- si riscontra una impossibilità di origine teorica nella ricerca di un infinito grado di precisione sulle grandezze osservabili, che trae origine dal *Principio di Indeterminazione di Heisenberg*, secondo cui non è concesso ottenere simultaneamente e con un infinito grado di precisione la misurazione di certe coppie di variabili coniugate¹¹.

Tale principio teorico stabilisce l'esistenza di una indeterminazione temporale, per una particella di energia determinata, ed una indeterminazione spaziale, per una particella di quantità di moto determinata. Si indichi, infatti, con Δp_x l'indeterminazione (nota anche come *incertezza*) con la quale è nota la componente x della sua posizione, ed in modo analogo per le altre componenti; con $\Delta \mathcal{E}$, l'indeterminazione dell'energia ed, infine, con Δt l'indeterminazione della posizione nel tempo.

¹¹Nella meccanica quantistica, il processo di misura possiede infatti la proprietà per cui influenza sempre l'oggetto quantistico sottoposto alla misura. Questo concetto è analizzato in seguito da un punto di vista formale, ma intuitivamente può essere compreso pensando che le caratteristiche dinamiche dell'elettrone si manifestano proprio come risultato della misura stessa. Ora, se fosse possibile ridurre a piacere l'influenza del processo di misura, allora significherebbe che la grandezza misurata possiede di per sé un valore intrinseco, indipendente dalla misura; ma, si cadrebbe allora in contraddizione con quanto appena affermato a riguardo delle variabili dinamiche [31].

Si ha allora assicurata la validità delle seguenti relazioni:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2};$$

$$\Delta p_y \cdot \Delta y \geq \frac{\hbar}{2};$$

$$\Delta p_z \cdot \Delta z \geq \frac{\hbar}{2};$$

$$\Delta \mathcal{E} \cdot \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Si noti che per $\Delta x = 0$, si ottiene completa determinazione di x , mentre per la stessa x si ha completa indeterminazione se $\Delta x = \infty$.

La comprensione del concetto di *PROCESSO DI MISURA* richiede di soffermarsi almeno a delineare i tratti essenziali, data l'importanza che riveste e la sostanziale differenza con l'analogo classico.

In meccanica quantistica, infatti, per processo di misura si intende qualsiasi processo di interazione tra oggetto classico, in generale detto strumento, ed oggetto quantistico, che avvenga a prescindere ed indipendentemente da un qualsiasi osservatore [31].

Il merito di questa precisazione spetta a N. Bohr. Già dall'espressione sopra riportata, si può arguire un concetto chiave, a cui qui si accenna soltanto, in base al quale la meccanica quantistica pur contenendo quella classica come caso limite, non può da essa prescindere per porre le sue stesse basi e prova ne è l'interazione considerata a cui si ricorre per definire la misura¹².

¹²Quest'aspetto della meccanica quantistica è davvero peculiare. Di solito, infatti, si ritiene che una teoria generale possa essere costruita, da un punto di vista logico, senza

Si è definito nel paragrafo precedente un sistema fisico indicando le sue proprietà con il termine osservabili. Ad ogni sistema viene associata una funzione denominata *FUNZIONE DI STATO*, dalla cui conoscenza risulta possibile calcolare le probabilità dei diversi risultati e di ogni misura.

Alla luce di tutto ciò, si torni pure all'interpretazione della espressione di Dirac, con cui si è esordito questa sezione.

Si suppone di considerare un sistema fisico ed in particolare una sua osservabile, a cui si assegna, per semplicità, la lettera identificativa A .

Ora, ricorrendo allo spazio dei ket e dei bra, secondo quanto esposto al paragrafo precedente, si rappresenta il sistema in esame, prima che venga effettuata qualunque misurazione sull'osservabile A . L'espressione che si ottiene è la combinazione lineare di seguito riportata:

$$|\alpha\rangle = \sum_{a'} c_{a'} |a'\rangle \langle a'|\alpha\rangle \quad (2.5)$$

con $|\alpha\rangle$ ket, $|a'\rangle$ autoket, $c \in \mathbb{C}$

Questo si giustifica con alcune considerazioni:

- esiste un teorema, di cui non si fornisce la dimostrazione ma solo l'enunciato, in base al quale GLI AUTOKET CORRISPONDENTI AD AUTOVALORI DISTINTI SONO ORTOGONALI;
- GLI AUTOKET NORMALIZZATI DELL'OSSERVABILE A FORMANO UN INSIEME COMPLETO ORTONORMALE, dato che è possibile normalizzare $|a'\rangle$ per ottenere l'ortonormalità dell'insieme e, per quanto concerne

doverne coinvolgere un'altra, più particolare, che della prima rappresenta un caso limite. In questo contesto, ad esempio, si inserisce la meccanica relativistica, che comprende la meccanica newtoniana, senza che ne necessiti però in fase di costruzione.

la sua completezza, si ricorda che tale proprietà è soddisfatta per costruzione, avendo posto per definizione che gli autoket di A formano una base su tutto lo spazio dei ket;

- dalle precedenti asserzioni, trae ragione l'analogia per cui, dato un ket arbitrario $|\alpha\rangle$, con $|\alpha\rangle \in$ spazio dei ket definito dagli autoket di A , allora lo sviluppo di $|\alpha\rangle$ è del tutto simile a quello più familiare di un vettore \vec{v} in uno spazio euclideo reale, con $\{\hat{e}_i\}$ insieme ortogonale dei versori:

$$\vec{v} = \sum_i \hat{e}_i \left(\hat{e}_i \cdot \vec{v} \right)$$

Si conclude pertanto che gli autoket devono essere trattati come ket di base nello stesso modo in cui i vettori unitari ortogonali sono utilizzati come base di vettori in uno spazio euclideo reale.

Lo sviluppo del ket $|\alpha\rangle$, dato dalla (2.3), si riferisce dunque alla rappresentazione del sistema *prima* che si misuri l'osservabile A ; ma ciò che interessa è come diventi tale rappresentazione *dopo* il processo di misura.

Quando si esegue la misurazione, si riscontra un fenomeno che si esprime dicendo che

il sistema precipita in uno degli autostati della osservabile A .

In definitiva:

$$|\alpha\rangle \xrightarrow{\text{misura di } A} |a'\rangle$$

Ecco come *una misura cambia lo stato di un sistema.*

L'unica eccezione all'asserzione precedente è rappresentata dal caso in cui lo stato è già un autostato dell'osservabile oggetto di misurazione, che implicitamente è rappresentato dalla notazione:

$$|a'\rangle \xrightarrow{\text{misura di } A} |a'\rangle \Leftrightarrow |a'\rangle \in \text{autostati}$$

Quando la misurazione di A determina il cambiamento di $|\alpha\rangle$ in $|a'\rangle$, allora a' è il risultato della misura di A . In questo contesto, si spiega il significato dell'affermazione

il risultato di una misura fornisce gli autovalori della osservabile che viene misurata.

Analizzando sempre l'espressione (2.3) dello sviluppo di $|\alpha\rangle$, relativo al sistema prima della misurazione, si evince anche un altro risultato di non poca importanza: in anticipo, non è concesso sapere in quale dei vari stati $|a'\rangle$ il sistema precipiti a seguito della misurazione.

Ricorrendo ad uno dei postulati fondamentali della meccanica quantistica, però, è dato di conoscere la probabilità di saltare in qualche stato $|a'\rangle$, perchè tale è proprio il significato del quadrato del prodotto interno

$$\left| \langle a' | \alpha \rangle \right|^2.$$

Dato uno stato, dunque, è lecito fornire la probabilità relativa ai possibili risultati di misura di un'osservabile dello stato stesso.

A questo punto, si è in grado di osservare un ulteriore aspetto del problema. Si supponga di essere interessati alla probabilità che il sistema, inizialmente caratterizzato da $|a'\rangle$, a seguito della misurazione, cada in un autostato $|a''\rangle$, con $|a''\rangle \neq |a'\rangle$. In base alla proprietà esaminata, per cui gli autoket di A formano un insieme completo ortonormale, si conclude che $|a'\rangle$ ed $|a''\rangle$, essendo entrambi autoket di A , sono tra loro ortogonali e così la relazione del prodotto interno fornisce per risultato zero. Infatti,

$$\begin{aligned} \text{probabilità di avere } |a''\rangle &= \left| \langle a'' | \alpha \rangle \right|^2 = \\ &= \sum_{a'} \left| \langle a'' | |a'\rangle \langle a' | \alpha \rangle \right|^2. \end{aligned}$$

Ne consegue la proprietà in base alla quale, dal punto di vista della misura, i ket tra loro ortogonali corrispondono ad alternative che si escludono a vicenda. Ciò comporta una premessa fondamentale ai fini dell'analisi di questo lavoro: infatti, se si considera un sistema di spin $\frac{1}{2}$, si può stabilire con sicurezza che, se si trova nello stato $|S_z; + \rangle$, certamente non è in $|S_z; - \rangle$.

2.4.2 Valore di Aspettazione

Un ultimo concetto a cui si vuol accennare riguarda il *VALORE DI ASPETTATIVA* dell'osservabile A rispetto ad uno stato α , definito come

$$\langle A \rangle = \langle \alpha | A | \alpha \rangle . \quad (2.6)$$

In altri termini, il valore di aspettazione può essere visto come quello relativo ad una distribuzione di probabilità. Da un punto di vista operativo, l'aspetto interessante si rivela nella seguente constatazione: dato un numero di N particelle in un certo stato $|\alpha \rangle$, la teoria quantistica garantisce di poter predire quale frazione delle particelle iniziali raggiungerà lo stato $|a' \rangle$ se viene misurata una sua osservabile A . Tale predizione implica, d'altra parte, di risolvere il problema agli autovalori di A (2.1). Se, però, non si è interessati ad un'informazione così dettagliata, allora si può decidere di calcolare una media sull'insieme delle particelle in esame; questo significa calcolare il valore di aspettazione[10].

Si riportano le proprietà principali:

1. *il valore di aspettazione di una osservabile rispetto ad uno stato può essere visto come il corrispettivo quantistico della nozione classica di valor medio.*

Questa affermazione viene qui considerata come postulato, al di là della giustificazione intuitiva che se ne può dedurre¹³;

2. *il valore di aspettazione di una osservabile rispetto ad uno stato non deve essere confuso con un suo autovalore*¹⁴. Calcolare il valore di aspettazione di A rispetto ad un suo stato $|\alpha\rangle$, infatti, richiede per definizione il vettore di stato e l'operatore A ; non c'è alcuna necessità dunque di ricercare autovalori o autovettori di A . Il valore di aspettazione, inoltre, può essere visto anche come il valore misurato a' per la probabilità P_a di ottenere a' :

$$\langle A \rangle = a \cdot P_a.$$

Nei sistemi di spin $1/2$, la precedente relazione si traduce nella eguaglianza:

$$\frac{\hbar}{2} P_+ + \frac{\hbar}{2} P_- = 1$$

Ecco che il valore di aspettazione può assumere qualunque valore $\in \mathfrak{R}$, compreso tra $-\hbar/2$ e $+\hbar/2$, a differenza degli autovalori;

3. *dipendenza temporale dei valori di aspettazione*. Esiste un teorema il cui enunciato afferma che il valore di aspettazione di una osservabile in un autostato dell'energia non cambia nel tempo. In base a ciò, un generico autostato dell'energia è definito *STATO STAZIONARIO*.

¹³Una dimostrazione rigorosa può essere rintracciata anche in R. Shankar *Principles of Quantum Mechanics* Kluwer Academic/Plenum Publishers (1994) pag.127.

¹⁴Tutto ciò è valido salvo il caso in cui si tratti di un autostato; qui si misura l'autovalore con probabilità 1.

Concludendo, a qualunque osservabile può essere associato un processo di misura, il cui risultato, cioè la misura, ne rappresenta il valore di aspettazione. Infatti, si ha che un dispositivo di misura effettua un'operazione di filtraggio, cioè seleziona solo uno degli autoket dell'osservabile e lo moltiplica per il suo autovalore. La misura è in effetti proprio il prodotto dell'autoket per il relativo autovalore associato¹⁵.

¹⁵In definitiva, risulta equivalente sostenere che il risultato di un processo di misura è rappresentato dal valore di aspettazione dell'osservabile misurata o dal prodotto dell'autoket per l'autovalore associato. Si ricordi, infatti, $\langle A \rangle = a \cdot P_a$ e che sia la probabilità P_a che l'autovalore sono dei numeri.

Capitolo 3

Effetto Rashba

3.1 *Definizione del Problema*

Lo spin splitting che ha luogo nelle sottobande di conduzione quando la sequenza degli strati che formano l'eterostruttura non è simmetrica (SIA) è riferito come *effetto Rashba*.

Il fenomeno dello spin splitting interviene solo se vengono rimosse le condizioni di *degenerazione di Kramers* e ciò accade in presenza di una delle due possibili cause di asimmetria di inversione, indicate con gli acronimi **SIA**, *Structural Inversion Asymmetry*, e **BIA**, *Bulk Inversion Asymmetry*.

Allo scopo di fornire una descrizione sufficientemente completa dei fenomeni menzionati, si procede per gradi, suddividendo il problema principale nei suoi aspetti essenziali. Il capitolo che qui viene iniziato si propone così di scandagliare dapprima i due meccanismi fisici che rompono la simmetria di inversione, allargando successivamente l'analisi alla degenerazione di Kramers ed all'effetto Zeeman, a cui può essere assimilato l'effetto Rashba, in una sor-

ta di ricomposizione progressiva del problema, dal particolare "zoommato" alla visione globale definitiva.

In questo processo, si inserisce la parentesi relativa alla trattazione della teoria perturbativa, che, come risulta forse più chiaro in seguito, a fronte di una apparente complicazione, fornisce un metodo di soluzione approssimata estremamente vantaggioso in termini di semplificazione.

3.2 *Teoria Perturbativa Indipendente dal Tempo*

3.2.1 *Caso Non Degenere*

FORMULAZIONE DEL PROBLEMA. Nell'ambito della meccanica quantistica ben pochi problemi possono essere annoverati nell'insieme di quelli risolvibili in modo esatto. Da questa premessa trae origine e giustificazione la necessità di ricorrere a metodi risolutivi di tipo approssimato, di cui fa parte a tutti gli effetti la teoria perturbativa indipendente dal tempo, qui riportata secondo la formulazione di Rayleigh-Schrödinger.

Il contesto nel quale opera prevede di dover determinare la soluzione di un problema modellabile con un'Hamiltoniana \mathcal{H} , che risulta indipendente dal tempo e divisibile in due parti:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \tag{3.1}$$

con

- \mathcal{H}_0 HAMILTONIANA IMPERTURBATA;
- V operatore definito PERTURBAZIONE.

La condizione $V = 0$ corrisponde al problema risolto, nel senso che gli autoket esatti dell'energia e gli autovalori esatti dell'energia sono noti. Tutto ciò corrisponde all'equazione

$$\mathcal{H}_0 |n^{(0)}\rangle = \mathcal{E}_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle. \quad (3.2)$$

Le ipotesi che si assumono durante lo svolgimento di questa procedura consistono nelle due seguenti condizioni:

1. per ogni autovalore dell'energia $\mathcal{E}_n^{(0)}$ di \mathcal{H}_0 con autovalore $\mathcal{E}_n^{(0)}$, esiste un autoket $|n\rangle$ di \mathcal{H} con autovalore E_n ;
2. gli autoket e gli autovalori di \mathcal{H}_0 possono essere sviluppati in serie perturbative.

In definitiva, la tecnica in esame permette di determinare gli autoket e gli autovalori approssimati per l'hamiltoniana completa, rappresentata dall'equazione

$$(\mathcal{H}_0 + V)|n\rangle = E_n |n\rangle. \quad (3.3)$$

In generale, l'operatore che tiene conto della perturbazione V non rappresenta il potenziale.

Si consideri, come esempio, l'atomo di idrogeno posto all'interno di campo elettrico o magnetico applicato dall'esterno. L'Hamiltoniana imperturbata associata, cioè \mathcal{H}_0 , consta di due termini:

- l'energia cinetica, con componente

$$\propto \frac{\mathbf{p}^2}{2m};$$

- il potenziale coulombiano dovuto alla presenza del nucleo e

$$\propto \frac{-e^2}{r},$$

avendo indicato con

- \mathbf{p} quantità di moto;
- m massa dell'elettrone;
- e carica dell'elettrone;
- \mathbf{r} coordinata spaziale.

Una parte di potenziale, dovuta all'interazione con il campo elettrico o magnetico, confluisce invece nell'operatore perturbazione V . Questo può rappresentare un controesempio per l'iniziale associazione mentale secondo cui a V si associa direttamente tutto il potenziale in gioco: una componente del potenziale del caso trattato risulta, infatti, comunque all'interno dell'Hamiltoniana \mathcal{H}_0 .

SVILUPPO FORMALE DEL METODO. Il problema fondamentale che si affronta con la teoria perturbativa risulta così formulato:

Ipotesi-

- si suppone che siano noti in modo completo ed esatto gli autoket dell'energia e gli autovalori dell'energia relativi al problema individuato dall'equazione

$$\mathcal{H}_0 | n^{(0)} \rangle = \mathcal{E}_n^{(0)} | n^{(0)} \rangle,$$

con l'insieme degli autoket $\{| n^{(0)} \rangle\}$ considerato completo, nel senso che risulta valida la relazione di chiusura

$$\sum_n | n^{(0)} \rangle \langle n^{(0)} | = 1;$$

- si assume che lo spettro di energia sia non degenere.

Tesi-

Ciò che interessa è la determinazione degli autoket dell'energia e degli autovalori dell'energia *approssimati* associati all'Hamiltoniana completa, data dalla relazione

$$(\mathcal{H}_0 + V)|n\rangle = \mathcal{E}_n|n\rangle.$$

Un passaggio chiave nello svolgimento della procedura prevede di definire la variazione di energia del livello n -esimo come

$$\Delta_n = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_n^{(0)},$$

che trae una giustificazione intuitiva dall'assunzione in base alla quale gli autovalori dell'energia \mathcal{E}_n , relativi all' n -esimo autoket, si "allontanano" dal valore imperturbato $\mathcal{E}_n^{(0)}$, anche se di una quantità piccola rispetto al valore dell'energia.

Occorre procedere ricercando la soluzione approssimata dell'equazione di Schrödinger, che si riporta di seguito:

$$(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{H})|n\rangle = (V - \Delta_n)|n\rangle.$$

A questo punto seguono operazioni e passaggi analitici, che possono essere tralasciati al fine di questa trattazione, in quanto ciò che interessa in questa sede è mostrare il risultato finale fornito dal metodo: questo, è infatti, assunto a paradigma generale e perciò è ad esso che ci si riferisce in seguito, durante lo studio dettagliato del problema specifico dell'effetto Rashba.

In conclusione, le relazioni fondamentali diventano le seguenti:

$$\begin{cases} |n\rangle = |n^0\rangle + \frac{\Phi_n}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{H}_0} (V - \Delta_n)|n\rangle, \\ \Delta_n = \langle n^{(0)} | V | n \rangle, \end{cases}$$

avendo indicato con Φ_n l'operatore di proiezione complementare, che risulta definito dalla relazione

$$\Phi_n = 1 - |n^{(0)}\rangle\langle n^{(0)}| = \sum_{k \neq n} |k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|.$$

Si prosegue sviluppando in serie $|n\rangle$ e Δ_n .

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + |n^{(1)}\rangle + |n^{(2)}\rangle + \dots$$

$$\Delta_n = \Delta_n^{(1)} + \Delta_n^{(2)} + \dots$$

In definitiva, si ottiene:

$$\Delta_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(0)} \rangle$$

$$\Delta_n^{(2)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(1)} \rangle$$

...

$$\Delta_n^{(N)} = \langle n^{(0)} | V | n^{(N-1)} \rangle$$

Questo diventa un risultato importante, nel momento in cui si passa a calcolare la variazione di energia relativa all'ordine N -esimo, in quanto in base alla relazione è sufficiente conoscere il valore di $|n\rangle$ fino all'ordine $(N-1)$ -esimo.

Esplicitando lo sviluppo per la variazione di energia, si raggiunge l'espressione finale seguente:

$$\Delta_n = \mathcal{E}_n - \mathcal{E}_n^{(0)} = V_{nn} + \sum_{k \neq n} \frac{|V_{nk}|^2}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}} + \dots \quad (3.4)$$

avendo posto

$$V_{nk} = \langle n^{(0)} | V | k^{(0)} \rangle \neq \langle n | V | k \rangle,$$

da cui si deduce che il riferimento è costituito dai ket *imperturbati*.

Lo sviluppo per il ket *perturbato*, invece, assume l'espressione:

$$\begin{aligned} | n \rangle = & | n^{(0)} \rangle + \sum_{k \neq n} | k^{(0)} \rangle \frac{V_{nk}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}} + \sum_{k \neq n} \sum_{l \neq n} \frac{| k^{(0)} \rangle V_{kl} V_{ln}}{(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_l^{(0)})} + \\ & - \sum_{k \neq n} \frac{| k^{(0)} \rangle V_{nn} V_{kn}}{(\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)})^2} + \dots \end{aligned}$$

Grazie a questa equazione, si scopre che l' n -esimo livello non è più proporzionale soltanto al ket imperturbato $| n^{(0)} \rangle$, ma risulta dipendente anche da altri ket dell'energia imperturbati. Questo dimostra come l'intervento della perturbazione V generi una combinazione dei vari livelli imperturbati dell'energia. In letteratura, a questo effetto ci si riferisce proprio con il termine di "mescolamento perturbativo" (*the perturbation mixing*).

A tal proposito, osservando l'espressione della variazione di energia al secondo ordine (3.4), si evince che i due livelli di energia, ad esempio l' i -esimo ed il j -esimo, con $j > i$, quando sono collegati dalla perturbazione V_{ij} , tendono a respingersi reciprocamente. Infatti, si nota come il mescolamento dipenda in modo proporzionale dall'elemento $V_{ij} = \langle i^{(0)} | V | j^{(0)} \rangle$ ed inversamente proporzionale alla differenza di energia tra i due livelli in esame¹.

¹Questa affermazione presuppone, per la sua validità, l'ipotesi implicita secondo cui sono trascurati tutti i livelli che non siano l' i -esimo ed il j -esimo.

Questi ultimi, proprio in ragione di

$$\frac{|V_{ij}|^2}{(\mathcal{E}_j^{(0)} - \mathcal{E}_i^{(0)})},$$

vengono modificati dal mescolamento come segue: l' i -esimo livello tende ad essere decrementato, nel suo valore di energia, della quantità sopra indicata, mentre della stessa viene incrementato il livello j -esimo. Intuitivamente, a seguito del mescolamento dovuto all'effetto perturbativo, si ha uno splitting dei due livelli energetici in esame, con la conseguenza che il maggiore dei due sale, dato che il suo valore di energia aumenta, e scende il minore, il cui valore di energia diminuisce. Esiste un teorema, noto come *teorema sull'incrocio dei livelli*, tra i cui casi particolari può essere annoverato quello esaminato, il cui enunciato dichiara che una coppia di livelli di energia collegati da una perturbazione non si incrociano al variare dell'intensità della perturbazione stessa.

3.2.2 Caso Degenero

Il metodo perturbativo sviluppato nella sezione precedente non risulta più valido nel caso in cui gli autoket dell'energia siano tra loro degeneri; viene, infatti, ad essere rimossa una delle due ipotesi necessarie che ne assicurano l'applicabilità.

Una prova immediata ed evidente è fornita dal fatto che la stessa espressione finale, relativa al ket perturbato, qualora applicata, presenterebbe una singolarità dovuta al fattore

$$\frac{V_{nk}}{\mathcal{E}_n^{(0)} - \mathcal{E}_k^{(0)}},$$

nel caso in cui V_{nk} non si annulli ed $\mathcal{E}_n^{(0)}$ sia uguale a $\mathcal{E}_k^{(0)}$.

Lo scopo di questo paragrafo non è certo quello di procedere con una trattazione completa a riguardo del problema sollevato; si limita, di conseguenza, a delineare gli aspetti principali ed a fornire delle proprietà di base di cui, del resto, non si potrà prescindere in seguito.

Tra le peculiarità, nel caso in cui esiste degenerazione è consentito scegliere la base dei ket imperturbati. Il procedimento corretto dimostra che risulta conveniente ricorrere alle combinazioni lineari dei ket imperturbati degeneri che diagonalizzano l'Hamiltoniana \mathcal{H} nel sottospazio che essi stessi individuano.

Si proceda con ordine. Si supponga di dover trattare una degenerazione di ordine d ; questo significa che esistono d autoket, diversi tra loro, tutti dotati però della stessa quantità di energia indicata con $\mathcal{E}_D^{(0)}$. L'insieme costituito dagli autoket degeneri è indicato come $|m^{(0)}\rangle$. In generale, vale il principio per cui la perturbazione che interviene rimuove la degenerazione; questo equivale al fatto che gli autoket perturbati che scaturiscono, ancora in numero pari a d , posseggono ora energie distinte. Questi autoket formano l'insieme $|l\rangle$. Al diminuire dell'intensità della perturbazione, cioè al tendere al limite della perturbazione verso la situazione imperturbata, si ha che² $|l\rangle \rightarrow |l^{(0)}\rangle$. In definitiva, si ha la relazione:

$$|l^{(0)}\rangle = \sum \langle m^{(0)} | l^{(0)} \rangle |m^{(0)}\rangle . \quad (3.5)$$

Tralasciando i vari passaggi analitici che permettono di risolvere il problema, si riporta il seguente risultato:

$$\Delta_l^{(1)} = \langle l^{(0)} | V | l^{(0)} \rangle . \quad (3.6)$$

²In termini rigorosi, i due insiemi $|m^{(0)}\rangle$ e $|l^{(0)}\rangle$ non devono necessariamente coincidere, anche se effettivamente formano una base nello stesso sottospazio degeneri.

Interessa sapere che gli elementi diagonali delle perturbazione V forniscono le variazioni di energia al primo ordine. L'equazione (3.5) risulta simile a quella scritta a proposito della variazione dell'energia al primo ordine nel caso non degenere; con la differenza sostanziale che qui occorre che i ket di base impiegati siano proprio quelli per cui, nel sottospazio degli autoket degeneri imperturbati, la perturbazione V abbia tutti gli elementi non diagonali nulli. Ecco quello a cui si era accennato: ricercare combinazioni lineari dei ket imperturbati degeneri che diagonalizzano l'hamiltoniana \mathcal{H} .

In particolare, se la perturbazione V si presenta già diagonale rispetto ai ket di base che si stanno utilizzando, allora si può scrivere subito la variazione di energia al primo ordine, perchè basta considerare il valore di aspettazione di V ; esattamente come nel caso non degenere.

Quest'ultima considerazione tornerà estremamente utile nel calcolo della variazione di energia per quanto concerne l'effetto Zeeman, affrontato nella sezione § 3.8.

3.3 *Concetti Fondamentali di Fisica dello Stato Solido*

3.3.1 *Reticolo di Bravais*

Per la descrizione di un qualunque solido cristallino, si ricorre ad un concetto generale di fondamentale importanza: il *reticolo di Bravais* [14].

Ciò che interessa, infatti, è la possibilità di specificare la struttura periodica in cui si ripetono le unità di base del cristallo, a prescindere da che cosa siano quest'ultime nello specifico, cioè singoli atomi, gruppi di atomi, molecole oppure ioni. Ed è proprio in questa versatilità, indipendente dalla natura delle unità, che risiede l'utilità del reticolo di Bravais, che quindi viene impiegato solo per avere un'indicazione sulla geometria del sistema che si considera.

Una definizione rigorosa prevede di considerare il reticolo come un array infinito di punti discreti, caratterizzati da una disposizione e da un'orientazione nello spazio tali per cui risultano invarianti rispetto a qualunque punto di osservazione dal quale si considera la struttura³.

³È interessante notare come nella definizione di reticolo di Bravais risulti importante l'orientazione e non solo la disposizione della struttura. La condizione che si richiede, infatti, impone che l'array risulti identico, sempre uguale a se stesso, a prescindere dal punto di vista dell'osservatore. Pensando ad un insieme costituito da una cella base esagonale, come può essere ad esempio un alveare, si giunge alla conclusione immediata per cui la struttura è invariante solo se compie una rotazione di 180° . Questo implica che la cella esagonale, pur essendo una unità di base molto comune ed adatta alla massimizzazione dello spazio al suo interno ed all'impacchettamento [13], non dà luogo ad una struttura riconducibile ad un reticolo di Bravais nell'accezione data. In realtà, estendendo la definizione, si può inquadrare la cella tipo-alveare come un reticolo di Bravais formato da due basi costitutive distinte: l'esagono primitivo e questo ruotato di 90° .

Già dalla definizione precedente, si evince che, dato che tutti i punti sono tra loro equivalenti, il reticolo di Bravais deve necessariamente risultare infinito nella sua estensione.

Ora, una *STRUTTURA A CRISTALLO* è costituita da copie identiche della stessa unità fisica, detta *base*, localizzata proprio nei punti del reticolo di Bravais.

Tutto questo è valido in via teorica ed i cristalli esaminati per ora sono ideali; ma, in realtà, i cristalli hanno dimensione finita.

Nel caso in cui l'estensione della superficie del cristallo sia però sufficientemente grande rispetto alla dimensione della cella base, allora la maggioranza dei punti dell'array può essere ritenuta talmente distante dalla superficie da considerarsi non influenzata dalla sua presenza. Ecco così come il cristallo fisico possa essere considerato come una porzione finita del reticolo infinito ideale di Bravais e come le proprietà, definite a partire da quest'ultimo, possano essere trasferite ai casi pratici.

3.3.2 *Strutture a Cristallo*

Dopo aver inquadrato il problema, si analizzano ora le due tipologie principali di reticolo, a cui si farà presto riferimento.

BCC è una tipologia di reticolo di Bravais, in cui si ha una struttura cubica e dal centro di ogni sua faccia si individuano dei punti che danno luogo ad un'ulteriore struttura cubica.

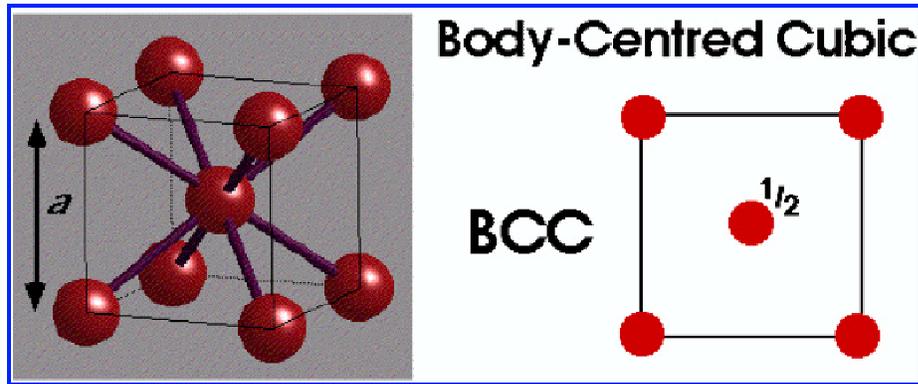


Figura 3.1: Tipologia di reticolo BCC.

FCC è l'altra tipologia di reticolo di Bravais, ottenuta aggiungendo al semplice ⁴ reticolo cubico un punto addizionale nel centro di ogni faccia quadrata.

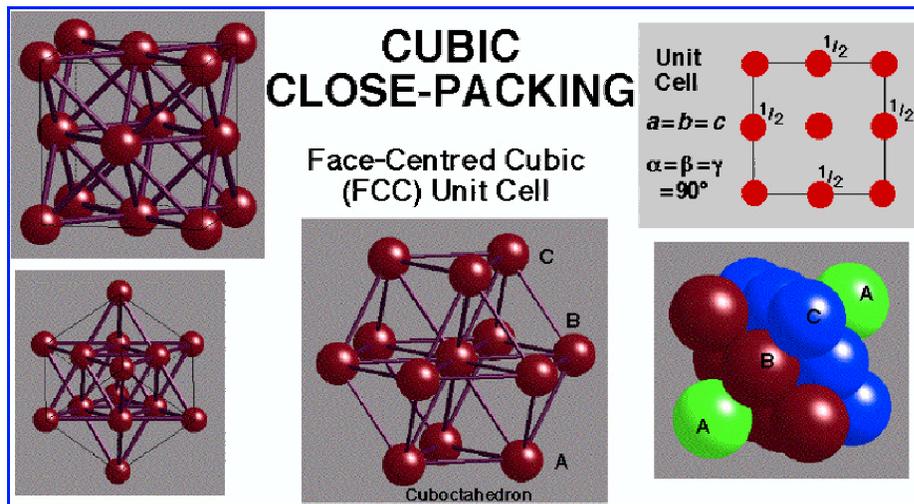


Figura 3.2: Tipologia di reticolo FCC.

⁴Un reticolo è definito *semplice* se la cella unitaria ha i suoi punti costituenti solo ai vertici del reticolo stesso.

Tra le strutture a cristallo più interessanti, almeno da un punto di vista dei semiconduttori, si annoverano le due di seguito analizzate: il *DIAMANTE* e la *ZINCOBLEND*A.

DIAMANTE. Il reticolo del diamante è costituito da due reticoli di Bravais cubici a facce centrate (FCC), interpenetranti, disposti lungo il corpo della diagonale di una cella cubica a distanza pari ad un quarto della lunghezza totale della diagonale stessa. Gli elementi più comuni, caratterizzati da una struttura a diamante, sono il carbonio (C), il silicio (Si), il germanio (Ge).

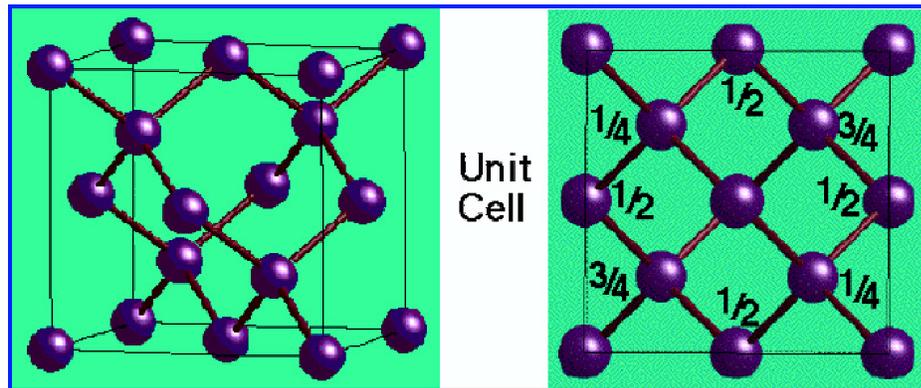


Figura 3.3: Reticolo del diamante.

ZINCOBLENDA. La struttura della zincoblenda è la stessa di quella del diamante; la caratteristica peculiare che la differenzia dalla precedente è data dal fatto che gli elementi costitutivi che la compongono sono appartenenti a due tipi diversi. In altri termini, la zincoblenda è formata da ioni, presenti in egual numero, anche se differenti tra loro, dislocati in una struttura a diamante, così che ogni ione è circondato da quattro ioni dell'altra tipologia

come vicini.

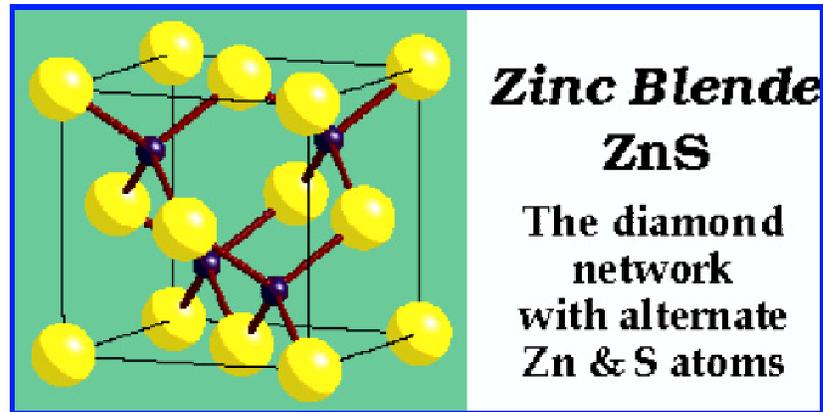


Figura 3.4: Reticolo della zincoblenda.

Tra i composti che presentano la tipica struttura a zincoblenda, si hanno quelli riportati nella tabella seguente.

COMPOSTO	DENOMINAZIONE	DIMENSIONI
ZnS	solfo di zinco ⁵	
AlAs	arseniuro di alluminio	5.62Å
AlSb		6.13Å
GaAs	arseniuro di gallio	5.65Å
GaSb		6.12Å
InP	fosforo di indio	5.87Å
InAs	arseniuro di indio	6.04Å
InSb		6.48Å

Tabella 3.1: Composti caratterizzati dalla tipica struttura a zincoblenda.

Nell'ultima colonna sono riportate le dimensioni, in unità atomiche, relative al lato del cubo della struttura. Come si nota facilmente, quelle proprie

del AlSb, GaSb, InAs sono tutte approssimabili a 6.1\AA . Questi sono le eterostrutture definite *sistemi* 6.1\AA , a cui si fa spesso riferimento in letteratura, in cui si studiano gli effetti dell'asimmetria di inversione (SIA e BIA). In particolare, si tratta proprio di un'eterostruttura basata su InAs/GaSb/AlSb a cui si farà riferimento in seguito per lo studio del filtro di spin.

3.4 *Simmetria d'Inversione*

La struttura a zincoblenda è caratterizzata da una *simmetria di gruppo spaziale*, ma la *simmetria d'inversione* non è invece soddisfatta dai punti che costituiscono i due sottoreicoli [12].

Questa peculiarità, al contrario, appartiene al diamante; si è così rintracciata un'ulteriore e fondamentale proprietà distintiva tra le due strutture a cristallo.

Se si rimuove la condizione di simmetria d'inversione, come nel caso appunto della zincoblenda, allora si può dimostrare che sussiste la tesi del teorema di Kramers, ma si assiste al fatto che la parte periodica delle funzioni di Bloch⁶ non soddisfa più alla condizione $u_{-k}(\mathbf{r}) = u_k(-\mathbf{r})$. La conseguenza diventa rilevante dal momento che, nell'intorno di $\mathbf{k} = 0$, non è più richiesta la doppia degenerazione.

Tale situazione d'asimmetria è esattamente ciò che interessa perchè strettamente correlato con l'effetto Rashba. Procedendo con un'indagine più approfondita, si scopre che esistono due possibili cause che generano asimmetria d'inversione, definite di tipo strutturale (SIA) e del bulk (BIA), che vengono proposte dettagliatamente in seguito (cfr. § 3.8.3).

⁶Si può rintracciare la formulazione del teorema di Bloch nella sezione § 5.1.2.

3.5 *Degenerazione di Kramers*

In meccanica quantistica, la simmetria del moto rispetto al cambiamento di segno del tempo viene espressa tenendo conto che, se Ψ è la funzione d'onda di un certo stato stazionario del sistema, allora anche la funzione d'onda "invertita rispetto al tempo", cioè Ψ^{inv} , descrive un certo stato dotato della stessa energia [31].

Si è visto come il momento angolare orbitale e di spin, pur non conservandosi separatamente, si conserva la loro somma, data dal momento angolare orbitale totale J . Ora, se non esiste alcun campo magnetico esterno, vale la proprietà in base alla quale ciascun livello energetico del sistema in esame è $(2J + 1)$ -volte degenere. Se si applica dall'esterno un campo magnetico, allora, in generale, segue la rimozione di tale degenerazione.

Sorge, pertanto, un problema: capire come si possa rimuovere completamente la degenerazione, pur senza l'applicazione di un campo magnetico esterno, in modo da ottenere soltanto livelli energetici semplici. Questa questione è strettamente connessa con la simmetria d'inversione nel tempo.

Nell'elettrodinamica classica, esiste l'invarianza delle equazioni rispetto al cambiamento di segno del tempo, a patto che si lasci immutato il segno del campo elettrico e si cambi, invece, quello del campo magnetico.

Tale proprietà si conserva anche in ambito quantistico, con la seguente modifica: la simmetria rispetto all'inversione nel tempo è valida in un qualunque campo elettrico esterno, in mancanza però di campo magnetico. In base a quanto appena detto, si ha che, in un campo elettrico arbitrario, la funzione d'onda e la funzione d'onda ottenuta dalla precedente per inversione temporale corrispondono a stati caratterizzati dalla stessa energia, e dunque coincidono, a meno di un fattore costante.

Ritornando al problema proposto, relativo alla rimozione totale della degenerazione in presenza di solo campo elettrico, si ha che la questione viene risolta in base ad un teorema, che risale al 1930, formulato da Kramers.

Il risultato fondamentale a cui si giunge, grazie al teorema precedente, consiste nel fatto che, in assenza di campo magnetico, il campo elettrico può rimuovere completamente la degenerazione soltanto in sistemi per i quali la somma degli spin delle particelle è intera. In un campo elettrico arbitrario, un sistema con somma semintera degli spin deve avere necessariamente tutti i livelli doppiamente degeneri.

In particolare, il teorema di Kramers stabilisce che, in assenza di campo magnetico, sia la funzione d'onda $\Psi_{\mathbf{k}}$ che $j \sigma_y \Psi_{\mathbf{k}}^*$ rappresentino le soluzioni dell'Hamiltoniana relativa allo stesso valore di energia. Dato che la seconda soluzione appartiene al vettore d'onda $-\mathbf{k}$, allora si conclude che, in corrispondenza di un unico valore di energia, esistono due distinte soluzioni relative a \mathbf{k} ed a $-\mathbf{k}$.

3.5.1 *Degenerazione di Spin*

All'interno del fenomeno fisico della degenerazione, si inserisce come caso particolare quello relativo alla *degenerazione di spin*, che merita in questa sede un'attenzione particolare.

Una definizione rigorosa prevede la seguente caratterizzazione:

la degenerazione di spin scaturisce dall'effetto combinato della simmetria d'inversione nello spazio e di quella d'inversione nel tempo del sistema oggetto d'esame [21].

Dal momento che si è decretato, come condizione necessaria per l'esistenza di degenerazione di spin, la presenza simultanea di due concause, allora si evince immediatamente che basta non soddisfarne una affinché non si verifichi degenerazione.

Tale proprietà del sistema può, infatti, essere rimossa mediante l'applicazione di un campo magnetico esterno, che è in grado di revocare la simmetria nel tempo. Se, del resto, il sistema in esame manca di simmetria d'inversione spaziale, allora non si necessita di alcun campo magnetico esterno per poter egualmente annullare la degenerazione e rilevare di conseguenza uno spin-splitting, che in questo caso viene definito proprio *spin-splitting a campo nullo*.

3.6 *Interazione Spin Orbita*

A questo punto si volge l'attenzione alla comprensione della modalità d'interazione tra un elettrone, che per semplicità viene ancora considerato quello di valenza del modello dell'atomo idrogenoide, ed un campo magnetico esterno.

Sono già state evidenziate le relazioni che esprimono il legame tra il momento angolare magnetico ed il momento angolare orbitale (1.4), e tra il

primo ed il momento angolare di spin (1.5); ed è proprio quest'ultimo che qui si richiama per esplicito.

$$\boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{mc} \mathbf{S} .$$

Se l'elettrone fosse a riposo, allora per avere una descrizione completa del problema, basterebbe considerare l'interazione coulombiana ($\propto \frac{-e^2}{r}$); ma occorre tener presente anche il suo movimento con velocità \mathbf{v} .

Fissando il sistema di riferimento sull'elettrone, piuttosto che sul nucleo, come si potrebbe intuitivamente supporre, si giunge alla seguente situazione: l'elettrone⁷ avverte il nucleo dotato di una carica pari a $+e$, di posizione individuata da $-\mathbf{r}$, che si muove compiendo un'orbita circolare con velocità $-\mathbf{v}$.

La forza che agisce sull'elettrone è espressa dalla legge di Lorentz, in base alla quale si ha la relazione:

$$\mathbf{F} = e \left(\mathbf{E} + \frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \right) ,$$

con \mathbf{E} campo elettrico dovuto al nucleo di entità

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{e}{r^2} \hat{\mathbf{r}} = \frac{e}{r^3} \mathbf{r} . \quad (3.7)$$

In particolare, per l'elettrone, questo campo elettrico viene avvertito come se si muovesse insieme con il nucleo; ma, allora, una particella carica, immersa in un campo elettrico che varia nel tempo, risente dell'influenza di quest'ultimo sotto forma di un campo magnetico, la cui intensità risulta proprio pari a

$$\mathbf{B} = -\frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{E} . \quad (3.8)$$

⁷Si ricordi l'ipotesi assunta di atomo idrogenoide; il nucleo, dunque, si riduce in definitiva ad un protone.

La quantità di moto dell'elettrone riferita al nucleo, del resto, può essere scritta come $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Esprimendo così la velocità in termini di massa e di quantità di moto, si può riscrivere il campo magnetico come:

$$\mathbf{B} = \frac{1}{mc} \mathbf{E} \times \mathbf{p} . \quad (3.9)$$

Sostituendo ora l'espressione precedente, relativa al campo elettrico, all'interno di quest'ultima, relativa al campo magnetico, si giunge a

$$\mathbf{B} = \frac{e}{mcr^3} \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \frac{e}{mcr^3} \mathbf{L}, \quad (3.10)$$

avendo ricordato la definizione stessa di momento angolare orbitale \mathbf{L} .

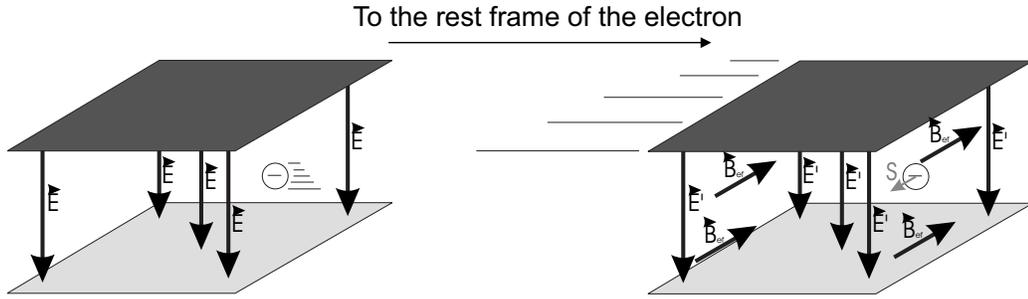


Figura 3.5: Schematizzazione grafica del fenomeno fisico da cui trae origine l'effetto Rashba. L'elettrone che si muove all'interno di un campo elettrico risente dell'azione di quest'ultimo sotto forma di un campo magnetico, con cui interagisce lo spin, in modo simile a quanto avviene nell'effetto Zeeman. (Per gentile concessione di X. Cartoixà, [2]).

Si torni ora alla questione dell'*INTERAZIONE SPIN-ORBITA*. Già dalla denominazione, si può arguire che in qualche modo siano coinvolti il momento angolare di spin ed il momento angolare orbitale dell'elettrone; ma si cerchi una giustificazione rigorosa a questa supposizione qualitativa.

In ultima analisi, di tutto quanto sopra, il punto nodale da focalizzare è rappresentato dall'ultima equazione, perchè sintetizza il fenomeno per cui

ogni volta che una carica in movimento è soggetta ad un campo elettrico, "avverte" anche la presenza di un campo magnetico effettivo.

In conclusione, infatti, ciò che interessa è la dinamica di spin di un elettrone che si trova ad essere coinvolto nell'azione di un campo magnetico.

L'interazione del momento angolare magnetico dell'elettrone con questo campo conduce alla cosiddetta *ENERGIA DI SPIN-ORBITA*, espressa come

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{mcr^3} \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{L} = \frac{e}{mcr^3} \frac{e}{mc} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (3.11)$$

In definitiva, si ha l'equazione relativa all'interazione spin-orbita, espressa in termini di momento angolare di spin e momento angolare orbitale, che poi si rivela esattamente pari al legame che era stato ipotizzato intuitivamente, e che si concretizza nella seguente relazione:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{e^2}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}. \quad (3.12)$$

Si ipotizza che, nell'ambito della teoria quantistica, intervenga la perturbazione del tipo di quella appena ricavata:

$$\mathcal{H}_V = \left(-\frac{e}{mc} \right) \left(-\frac{e}{mc} \right) \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r^3}.$$

Confrontando, però, questa espressione teorica, inerente l'interazione spin-orbita, con quella realmente osservata, si nota che l'intensità eccede di un fattore 2, ossia è doppia di quella effettivamente riscontrata. La spiegazione quanto-meccanica di questa incongruenza si basa sulla teoria relativistica di Dirac; ma non è questa la sede preposta per dipanare la questione in quanto esula dagli obiettivi. Sembra però doveroso indicare che la ragione riguarda il fatto che l'altra parte dell'elettrone non ha una velocità fissa relativa al centro di massa dell'atomo dal momento che il moto dell'elettrone non è rettilineo. Il merito della osservazione e della scoperta del fattore correttivo spetta a Thomas⁸.

⁸L.H. Thomas- NATURE **117**, 574 (1926).

In ultima analisi perciò, si ha che la relazione corretta, relativa all'interazione spin-orbita, è rappresentata dalla seguente equazione:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} . \quad (3.13)$$

Questa relazione rivelerà meglio tutto il suo valore in seguito, nella sezione dedicata all'analisi dettagliata dell'effetto Rashba, dal momento che questo viene di fatto ricondotto proprio ad un'interazione di tipo spin-orbita.

3.6.1 *Ulteriore Formulazione dell'Interazione Spin Orbita*

Oltre all'equazione (3.13), appena dedotta, esiste una formulazione alternativa dell'espressione d'interazione spin-orbita, che lega lo spin di un elettrone con il suo momento angolare orbitale.

Le due relazioni sono del tutto equivalenti, ma l'una si dimostra particolarmente vantaggiosa rispetto all'altra, a seconda del contesto in cui è chiamata ad operare.

Evitando di approfondire tutti i dettagli relativi, che seppure interessanti possono tuttavia essere tralasciati in questa sede, si riporta di seguito esclusivamente l'equazione:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \left((\nabla V) \mathbf{r} \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.14)$$

in cui figurano esplicitamente, a meno delle solite costanti, il gradiente del potenziale, il vettore posizione, la quantità di moto e le matrici di Pauli.

Non si pretende certamente di fornire una dimostrazione rigorosa dell'equivalenza delle due relazioni, (3.13) e (3.14), che peraltro non interessa

l'obiettivo del presente lavoro; ma comunque, per una sorta di completezza, si desidera riportare quanto dedotto dall'analisi e dal confronto delle due formulazioni dell'interazione spin-orbita.

Esprimendo la (3.14) in coordinate sferiche, ciò che si ottiene risulta

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \left(\mathbf{r} \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

Da quest'ultima equazione, dopo semplici passaggi algebrici, si può pervenire alla forma

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \left(\mathbf{r} \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}.$$

Ricordando la definizione di momento angolare orbitale e quella di momento angolare di spin, si giunge all'equazione

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S},$$

$$\text{avendo posto } \lambda = \frac{\frac{dV}{dr}}{2m^2c^2r}.$$

3.7 Effetto Zeeman

In questa sezione si procede analizzando più in dettaglio il fenomeno fisico noto come effetto Zeeman, in quanto l'effetto Rashba può essere modellato proprio come un suo caso particolare e per la trattazione di quest'ultimo occorre applicare i risultati della metodologia generale di approssimazione nota in letteratura come *TEORIA PERTURBATIVA*.

Per un'analisi dettagliata del problema, risulta pertanto necessario fornirne una trattazione, che anche se non completamente esaustiva da un punto di vista strettamente rigoroso, permetta comunque di dare una giustificazione al tipo di indagine analitica che si appresta ad essere intrapresa.

Si è accennato alla incompletezza formale, dal momento che si concentra la discussione seguente sul caso non degenere della *teoria perturbativa indipendente dal tempo*, tralasciando sia il caso degenere indipendente dal tempo, sia quello dipendente dal tempo.

Definendo rigorosamente l'effetto Zeeman, esso può essere considerato un fenomeno che riguarda il comportamento di atomi di idrogeno o comunque idrogenoidi all'interno di un campo magnetico uniforme; consiste, in particolare, in un aumento del numero di righe spettrali dovuto allo splitting dei livelli. Laddove in origine esiste un solo livello, a seguito dell'effetto Zeeman se ne riscontrano più di uno, posti tra loro ad una distanza che può essere variata variando l'intensità del campo magnetico.

Pur avendo intuitivamente già capito che il fenomeno in esame trae origine dall'interazione tra lo spin dell'elettrone ed il campo magnetico prodotto dall'elettrone stesso, si procede ora con ordine, riportando i passaggi essenziali che permettono di dedurre l'esistenza della differenziazione dei livelli.

Si consideri ancora una volta l'Hamiltoniana $\mathcal{H} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}$, supponendo che sia tale da poterla inquadrare nel caso degenere della teoria perturbativa e pertanto che sia separabile nei due termini

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_V.$$

Si assuma ora che la perturbazione sia proprio quell'interazione spin-orbita già ricavata (cfr. § 3.6 (3.16)). In totale, l'Hamiltoniana compare allora nella forma

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_V = \mathcal{H}_0 - \mathcal{H}_{\text{SO}}.$$

Si consideri, in particolare, la perturbazione \mathcal{H}_{SO} nella forma in cui compare esplicitamente il campo magnetico \mathbf{B} , proprio per rimarcare la sua presenza nel fenomeno in esame.

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B},$$

avendo ricordato il legame noto tra momento angolare magnetico e momento angolare orbitale (1.4). L'Hamiltoniana assume così la forma definitiva:

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = \mathcal{H}_0 - \frac{e}{2m_e c} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B}. \quad (3.15)$$

Ricordando la procedura della teoria perturbativa, si ha che gli elementi diagonali della perturbazione $\mathcal{H}_{\mathcal{V}}$ forniscono le variazioni di energia al primo ordine, che poi sono proprio l'oggetto d'interesse. Si può così calcolare il valore di aspettazione della perturbazione e dedurre direttamente le variazioni di energia relative al primo ordine.

L'equazione agli autovalori diventa:

$$\mathcal{H} | a \rangle = \mathcal{E} | a \rangle, \quad (3.16)$$

$$\left(\mathcal{H}_0 - \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \right) | a \rangle = \mathcal{E} | a \rangle. \quad (3.17)$$

Scegliendo la direzione di \mathbf{B} come la direzione dell'asse z ,

$$\left(\mathcal{H}_0 - \frac{e}{2mc} B l_z \right) | a \rangle = \mathcal{E} | a \rangle \quad (3.18)$$

In definitiva, dopo aver applicato la teoria perturbativa nel caso degenere, si ha

$$\mathcal{E}_{nlm} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{me\hbar}{2m_e c} B. \quad (3.19)$$

Avendo calcolato la variazione di energia relativa al primo ordine, si assiste proprio all'effetto Zeeman, in quanto si scopre che lo stato fondamentale, che risultava degenere per ciò che attiene allo spin down ed allo spin up,

subisce ora lo splitting in due livelli. Ecco che si conclude che esiste un numero di linee spettrali aumentato, a seguito dello splitting dei livelli ed a tale fenomeno ci si riferisce con la denominazione di effetto Zeeman.

Il campo magnetico rimuove, infatti, la degenerazione nel numero quantico m . Il livello degenerare il cui momento angolare è l , (così è $(2l + 1)$ -volte degenerare), si separa in $(2l + 1)$ livelli distinti ed equidistanti, con distanza reciproca pari a $\frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{B}$. Talvolta, la quantità $\frac{e\hbar}{mc} \mathbf{B}$ è riferita in letteratura come *separazione dei livelli di Landau*.

3.8 Effetto Rashba

3.8.1 Effetto Rashba ed Effetto Zeeman a Confronto

Una volta affrontato l'effetto Zeeman, si riconduce a questo l'effetto Rashba come caso speculare. Infatti, così come il primo esiste per lo splitting dei livelli energetici, con conseguente aumento del numero di linee spettrali, in modo analogo trae origine il secondo all'interno delle sottobande di conduzione.

Per quanto concerne l'effetto Zeeman, si ha che la rottura della degenerazione di Kramers è imputabile all'interazione tra momento magnetico $\boldsymbol{\mu}$, associato al momento angolare di spin \mathbf{S} , e campo magnetico effettivo \mathbf{B} , di cui l'elettrone avverte la presenza a causa del campo \mathbf{E} e del fatto che è in movimento con velocità \mathbf{v} . Per quanto attiene, invece, l'effetto Rashba, le condizioni per la degenerazione vengono rimosse in presenza di SIA, che, come si è già discusso, è una tra le due possibili cause di asimmetria d'inversione.

Riassumendo schematicamente, la sequenza risulta essere la seguente:

- la sequenza degli strati che formano l'eterostruttura non è simmetrica
 $\Rightarrow \exists$ SIA;
- $\Rightarrow \nexists$ degenerazione di spin;
- $\Rightarrow \exists$ spin splitting nelle sottobande di conduzione ed è proprio questo fenomeno che viene riportato come effetto Rashba.

3.8.2 *Descrizione del Fenomeno*

Si consideri un gas elettronico bidimensionale, che si è soliti indicare con l'acronimo 2DEG (*two Dimensional Electronic Gas*); si supponga anche ideale e non interagente. Considerando valide queste condizioni iniziali, del resto del tutto generali, si pone il problema di studiare gli stati elettronici di tale gas in riferimento allo spin.

In mancanza di indicazioni in merito, è necessario avvalersi dell'ipotesi per cui non si prevede applicato alcun campo magnetico esterno. Ma allora si riconduce l'analisi in corso al caso previsto dalla definizione della degenerazione di spin, perchè niente impedisce di poter ritenere soddisfatte entrambe le condizioni relative alla simmetria di inversione spaziale e temporale. Gli stati elettronici, per quanto attiene lo spin, risultano in definitiva, doppiamente degeneri.

Una descrizione come quella appena delineata [20], comunque, appare eccessivamente semplicistica per la maggior parte dei sistemi 2DEG reali, in quanto le ipotesi assunte non possono essere ragionevolmente soddisfatte. Gli elettroni, infatti, non solo interagiscono tra loro, ma risultano anche influenzati dalle proprietà elettroniche del sistema in cui si trovano.

Si procede, di conseguenza, cercando di acquisire una conoscenza più dettagliata ed esaustiva dei fenomeni che generano lo spin splitting in condizione di assenza di campo magnetico esterno.

3.8.3 *Origine dello Spin-Splitting a Campo Nullo: SIA e BIA.*

Spin-splitting a campo nullo. *L'esistenza di uno splitting spin-orbita, relativo agli elettroni di conduzione nei livelli energetici confinati all'interno di una buca di potenziale di un'eterostruttura a semiconduttore, viene riferita con la denominazione SPIN-SPLITTING A CAMPO NULLO (zero-field spin-splitting problem).*

La presenza di tale fenomeno è stata oggetto di una controversia che si è protratta per più di un ventennio, dal momento che nella stessa problematica si inseriscono questioni quali il ruolo svolto dal campo elettrico d'interfaccia e la trattazione del passaggio brusco da un'interfaccia all'altra, coinvolgendo così anche l'effetto Rashba.

Evitando di addentrarsi nell'evoluzione della diatriba⁹, si riporta solo il risultato definitivamente riconosciuto, in base al quale si ha che lo splitting relativo alle buche di potenziale asimmetriche, costituite con semiconduttori III-V, presenta due contributi distinti:

- un contributo dovuto all'asimmetria d'inversione del bulk del materiale ospite (BIA);

⁹A questo proposito, si è rintracciato, in letteratura, parte della contestazione, riportata nell'articolo [17].

- un contributo che scaturisce dall'asimmetria nel potenziale di confine, macroscopico, (SIA) e che va sotto il nome di effetto Rashba.

In particolare, entrambe le cause sopraindicate hanno la natura di un campo elettrico. In linea di principio, si ha che con un meccanismo fisico del tutto analogo all'interazione spin-orbita, si manifesta il comportamento per cui il campo elettrico viene avvertito come un campo magnetico effettivo. Gli elettroni di conduzione, infatti, sono in movimento e lo stesso campo elettrico determina così lo spin-splitting ΔE_c in banda di conduzione. L'effetto del campo magnetico effettivo, del resto, che ha direzione perpendicolare rispetto a quella del moto degli elettroni, si concretizza nella precessione degli spin attorno alla direzione del campo, con una frequenza pari a $\Omega = \frac{\Delta E_c}{2\hbar}$.

Si vuol ancora ribadire il legame che unisce la simmetria d'inversione nel tempo con quella d'inversione nello spazio e la relazione con le rispettive cause. Per evidenziare l'aspetto di parallelismo, si pone l'accento sul fatto che così come la simmetria d'inversione nel tempo è annichilita dalla presenza di un campo magnetico esterno, in modo analogo l'intervento di un campo magnetico effettivo, generato da un campo elettrico, annulla di fatto la simmetria d'inversione nello spazio.

La relazione di dispersione dell'energia degli elettroni può essere espressa mediante:

$$\mathcal{E}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm \alpha k \quad (3.20)$$

Della relazione di dispersione ciò che riveste un ruolo decisamente importante è la degenerazione degli spin per $\mathbf{k} = 0$ e la proprietà in base alla quale lo spin-splitting incrementa in modo lineare con \mathbf{k} .

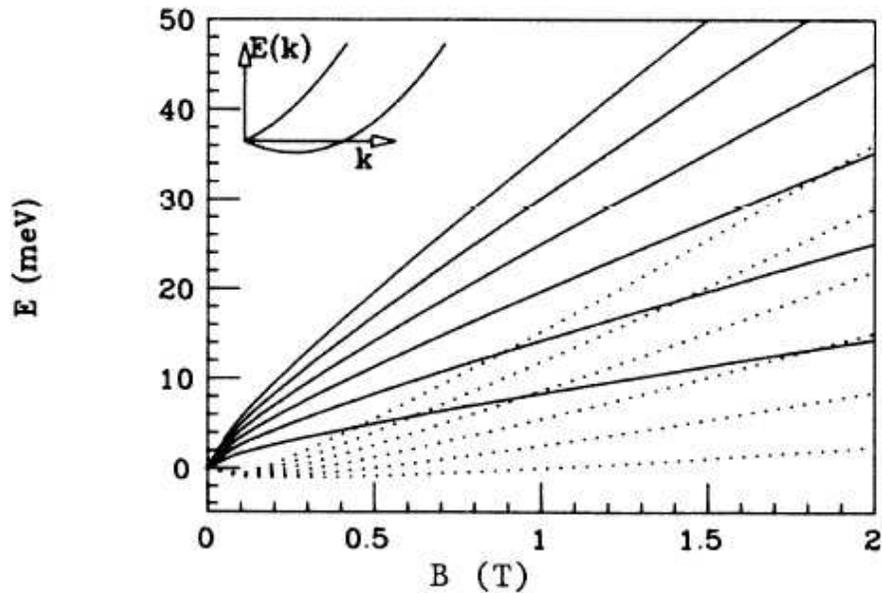


Figura 3.6: Spettro energetico del modello di Rashba. (L'immagine è tratta da [20].)

Lo spin splitting aumenta all'aumentare del campo magnetico esterno applicato; ma quando il campo magnetico esterno è piccolo in confronto all'intensità del campo magnetico interno effettivo (quello che viene avvertito come tale, anche se deriva dalla presenza di un campo elettrico superficiale), allora lo spin splitting totale è fondamentalmente basato sugli effetti dell'accoppiamento spin-orbita. Ne consegue che ha una piccola dipendenza dal campo magnetico esterno.

Se si considerano campi magnetici esterni dell'ordine di 0.5-1.5 T per una buca di potenziale di ampiezza pari 0.75\AA , allora si riscontra che lo splitting dovuto all'effetto Zeeman è trascurabile per valori così modesti di campo magnetico esterno applicato. Lo spin splitting totale è allora dominato dal contributo proveniente dal termine relativo al campo elettrico superficiale.

In definitiva, anche per $\mathbf{B} = 0$, lo spin splitting non svanisce ed aumenta in modo non lineare all'aumentare del campo magnetico applicato dall'esterno. Questo risultato scaturisce dall'effetto combinato tra lo spin splitting dovuto al campo elettrico superficiale e lo spin splitting indotto per effetto Zeeman dal campo magnetico applicato dall'esterno.

Per semplificare e schematizzare, la situazione che si viene a creare risulta inquadrabile in un contesto di causa-effetto così riassunto:

- se sono soddisfatte le seguenti condizioni
 1. simmetria di inversione nel tempo;
 2. simmetria di inversione nello spazio $\Rightarrow \exists$ degenerazione di spin.
- Per rimuovere la degenerazione di spin, è sufficiente non verificare almeno una delle due condizioni e, pertanto, si ha che:
 1. \nexists simmetria di inversione nel tempo
se \exists campo magnetico applicato dall'esterno $\mathbf{B} \neq 0$;
 2. \nexists simmetria di inversione nello spazio
se \exists SIA o BIA.

In altri termini:

• **DEGENERAZIONE DI SPIN** $\mathcal{E}(\mathbf{k}, \uparrow) = \mathcal{E}(\mathbf{k}, \downarrow)$

1. simmetria d'inversione temporale:

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}, \uparrow) = \mathcal{E}(-\mathbf{k}, \downarrow);$$

2. simmetria d'inversione spaziale:

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}, \uparrow) = \mathcal{E}(-\mathbf{k}, \uparrow).$$

• **ASIMMETRIA D'INVERSIONE** $\mathcal{E}(\mathbf{k}, \uparrow) \neq \mathcal{E}(\mathbf{k}, \downarrow)$

La notazione adottata indica, rispettivamente, con la freccia rivolta verso l'alto lo stato di spin up, verso il basso lo stato di spin down.

Una volta rimossa la degenerazione di spin, il diagramma di dispersione che ne consegue assume la forma seguente.

In generale, entrambi i termini afferenti al SIA ed al BIA risultano presenti ed interagenti tra loro; ed è proprio a questa doppia azione che si riconduce l'asimmetria d'inversione spaziale totale che conduce allo splitting spin-orbita a campo nullo.

In un sistema del tipo InAs/GaSb, ad esempio, ambedue le cause d'asimmetria sono riscontrate sperimentalmente. Ripensando a quanto esposto a proposito delle strutture a cristallo, si capisce come questo risultato non sia affatto avulso da un contesto teorico che ne fornisce una giustificazione del tutto adeguata.

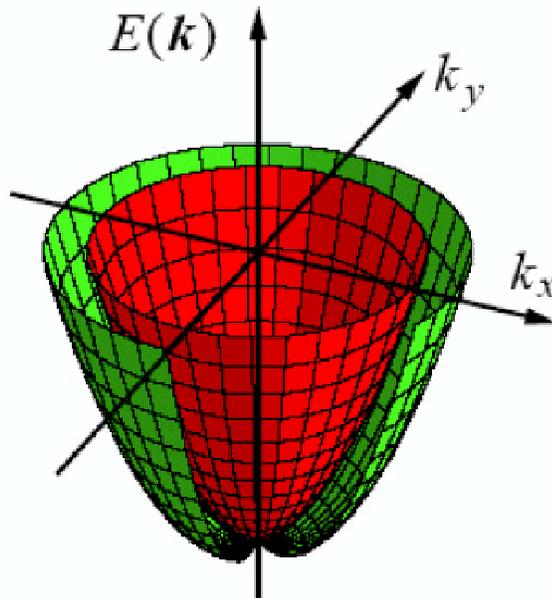


Figura 3.7: Diagramma di dispersione in condizioni di asimmetria d'inversione. Si nota, in particolare, come sia rimossa la degenerazione di spin. (L'immagine è disponibile, in rete, all'indirizzo <http://www.nano.uni-hannover.de/~winkler>.)

Infatti, InAs, essendo contraddistinto da una struttura a zincoblenda, non può che essere intrinsecamente dotato di asimmetria d'inversione e, del resto, si accetta anche un certo grado di asimmetria nella buca di potenziale, che può essere ricondotto all'accrescimento non perfettamente simmetrico del campione di semiconduttore.

3.8.4 SIA e BIA a Confronto: Analogie e Differenze.

Nelle eterostrutture a semiconduttore, come si è avuto modo di mettere in luce finora, si è individuata la presenza del fenomeno dello spin-splitting, anche nel caso in cui non sia applicato alcun campo magnetico dall'esterno.

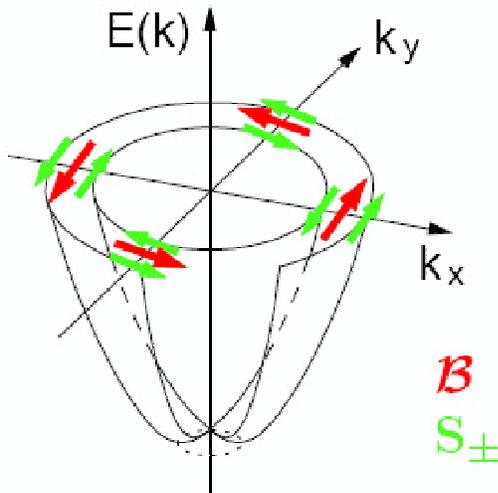


Figura 3.8: Diagramma di dispersione in presenza di effetto Rashba. (L'immagine è disponibile, in rete, all'indirizzo <http://www.nano.uni-hannover.de/~winkler.>)

Le cause sono state rintracciate nel SIA e nel BIA.

Tra i fattori che li accomunano, si può annotare la asimmetria d'inversione nello spazio che entrambi generano, come effetto, nonché la natura di campo elettrico, che ne è all'origine, come causa.

Esistono, tuttavia, aspetti peculiari, che li contraddistinguono e che implicano una diversa trattazione in ambito numerico. Si riportano, di seguito, i principali elementi discordanti.

Tipologia d'inversione. Tra questi, si inserisce innanzitutto l'ambito operativo in cui si manifestano. Il BIA, infatti, è dovuto sostanzialmente alla struttura del bulk, cioè del cristallo vero e proprio, ossia della asimmetria tipica della zincoblenda. Il SIA, invece, può essere interpretato come dipendente dalla geometria del dispositivo, dal momento che sca-

turisce dall'asimmetria nel potenziale di confine. Il suo significato è interpretabile come un'interazione spin-orbita dell'elettrone costretto a muoversi all'interno della buca di potenziale quantistica [21].

Come già annunciato, è questo che desta il maggior interesse, all'interno di questo lavoro, innanzitutto perchè direttamente associabile all'effetto Rashba ma, soprattutto, perchè interpretabile come possibile controllo di gate, in un transistor ad effetto di spin, implementabile in un prossimo futuro.

Esiste comunque un'ulteriore modalità per differenziare i due termini di asimmetria d'inversione, che si riporta per completezza, ma che in questa sede risulta meno appropriata e conveniente rispetto a quella analizzata che tiene conto della rispettiva origine fisica dei due campi elettrici di base.

La strategia alternativa proposta in letteratura prevede di studiare la diversa dipendenza del BIA e del SIA dalla densità dei portatori. Si rileva, infatti, che l'Hamiltoniana relativa al campo spin-orbita ha una dipendenza quadratica dalla densità dei portatori, per quanto concerne il termine attinente al BIA, mentre ne è del tutto indipendente per il termine pertinente all'effetto Rashba. In questo caso, infatti, si ha una relazione del tipo $\mathcal{H}_{LS} \propto \langle E_z \rangle^2$, con $\langle E_z \rangle$ valore d'aspettazione del campo elettrico d'interfaccia¹⁰.

¹⁰Tale dipendenza merita un'osservazione specifica. Se si è in presenza di una buca perfettamente simmetrica, allora il valore di aspettazione del campo d'interfaccia risulta nullo. Ecco così che l'asimmetria dell'eterostruttura deve necessariamente essere introdotta al fine di evidenziare un valore d'aspettazione del campo diverso da zero e poter ottenere, di conseguenza, come risultato finale, un certo spin-splitting.

Dipendenza da \mathbf{k} . Un'ulteriore discordanza tra SIA e BIA, si scopre nella dipendenza tra i termini rispettivamente associati ed il vettore d'onda \mathbf{k} . L'asimmetria d'inversione relativa al bulk si ripercuote in una dipendenza cubica, mentre se ne rintraccia una semplicemente lineare per quanto concerne l'effetto Rashba.

Tutto ciò può essere dedotto dalla relazione di dispersione dell'energia di un elettrone in sottobanda di conduzione. Nel primo caso, si individua un fattore correttivo del tipo $\propto \alpha_1 \mathbf{k}_{\parallel} + \alpha_2 \mathbf{k}_{\parallel}^2 + \alpha_3 \mathbf{k}_{\parallel}^3$, mentre nell'altro si giunge all'equazione di Rashba, che presenta una dipendenza da \mathbf{k} al primo ordine, essendo espressa dalla relazione:

$$\mathcal{H}_R = \alpha_R \left(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} \right) \cdot \mathbf{z}.$$

Quando una buca di potenziale è costruita su un'eterostruttura di semiconduttori, il vettore d'onda dell'elettrone perpendicolare al layer è quantizzato come $k_z \sim \left(\frac{\pi}{d_z} \right)$, con d_z ampiezza del layer.

Se la buca di potenziale è sufficientemente sottile, in modo tale che il vettore d'onda risulti $k \ll \left(\frac{\pi}{d_z} \right)$, allora lo spin-splitting causato dall'asimmetria del bulk risulta dominato dal termine

$$\Delta_{bulk} \sim \gamma \left(\frac{\pi}{d_z} \right)^2 k$$

Il coefficiente $\left(\frac{\pi}{d_z} \right)^2$ dipendente dall'ampiezza della buca di potenziale indica che lo spin-splitting che si origina dalla asimmetria d'inversione del bulk può essere aumentata dal confinamento quantistico.

Lo spin splitting associato con l'asimmetria della buca di potenziale, d'altra parte, non ha una dipendenza esplicita dallo spessore della buca.

Una buca asimmetrica è accompagnata da un campo elettrico d'interfaccia, che è diretto lungo la normale al piano della buca e che revoca, come visto, la degenerazione di spin delle bande d'energia del 2DEG attraverso l'accoppiamento tra lo spin dell'elettrone ed il movimento orbitale. Questo accoppiamento spin-orbita è descritto dall'hamiltoniana di Rashba.

Prevalenza di una componente rispetto all'altra. Nelle eterostrutture formate da semiconduttori wide-band-gap¹¹, a cui possono essere ricondotti gli strati d'inversione nel GaAs, il termine relativo al BIA svolge un ruolo predominante rispetto a quello connesso al SIA, dal momento che è prevalente sul termine di Rashba [15]. Quest'ultimo, infatti, incrementa il suo valore molto più rapidamente dell'altro al diminuire del gap di banda. Un tale comportamento giustifica il fatto per cui, nei materiali a narrow-band-gap, il termine di Rashba diventa decisamente quello più significativo.

¹¹Con la denominazione (*WBG*) *wide-band-gap semiconductors*, si intendono semiconduttori dotati di energia di gap "letteralmente" ampia. In termini più rigorosi, si assume, come discriminante, un valore di energia di gap pari a 2 eV. Nella classificazione (*WBG*) rientrano, quindi, materiali con energia di gap che tipicamente supera il valore di soglia stabilito. A questa categoria, appartengono i nitruri del III gruppo, come il nitruro di gallio (GaN) ed il nitruro di alluminio (AlN), il carbonato di silicio (SiC) ed il seleniuro di zinco (ZnSe). I semiconduttori (*WBG*) sono materiali che recentemente hanno assunto un'importanza fondamentale nell'impiego di sistemi elettronici sottoposti a particolare stress termico, come satelliti, motori automobilistici, jet. Infatti, la caratteristica peculiare che li contraddistingue è rappresentata dalla possibilità di implementazione di dispositivi elettronici mirati al conseguimento di specifiche prestazioni, in termini di elevata potenza, alte frequenze e, soprattutto, elevate temperature di impiego.

3.8.5 Equazione di Rashba

Se un cristallo possiede un singolo asse di simmetria e lungo questo asse è orientato un vettore invariante $\boldsymbol{\nu}$, allora l'Hamiltoniana del sistema, relativa all'interazione spin-orbita, sempre riferita ad un singolo elettrone, si esprime mediante la relazione:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \alpha_R \left(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} \right) \boldsymbol{\nu}, \quad (3.21)$$

con $\boldsymbol{\sigma}$ matrici di Pauli ed α_R coefficiente ricavato sperimentalmente¹².

In generale, considerando come vettore unitario lungo la direzione del campo superficiale l'asse \mathbf{z} , si giunge alla formulazione:

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \alpha_R \left(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} \right) \mathbf{z}, \quad (3.22)$$

La doppia degenerazione di spin dello spettro, relativo al gas elettronico 2D, viene ad essere rimossa dalla perturbazione rappresentata proprio dall'operatore \mathcal{H}_{SO} nella zona $k \neq 0$, e determina lo splitting spin-orbita delle zone vicine a $k = 0$ [18] [19].

L'Hamiltoniana completa assume così soluzione esatta nella forma riportata di seguito [20]:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{SO}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha_R \left(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k} \right) \mathbf{z}. \quad (3.23)$$

Il termine imperturbato dell'hamiltoniana può essere espresso anche in termini di quantità di moto \mathbf{p} , invece che di vettore d'onda \mathbf{k} , esplicitando quest'ultimo come $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$, così che si ha:

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{p^2}{2m}.$$

¹²A questo proposito, si può rintracciare in letteratura l'articolo di D. Stein, K. v. Klitzing, G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **51**, 130, (1983).

Il parametro più importante del modello è sicuramente il coefficiente di Rashba α_R perchè misura l'intensità dell'accoppiamento spin-orbita. Nel modello di Rashba la costante di accoppiamento spin-orbita α_R è l'unica variabile e lo spin-splitting a campo nullo non entra nei calcoli.

La costante α_R di accoppiamento spin-orbita è implicitamente proporzionale alla intensità del campo elettrico di superficie di built-in (E_{surf}). Lo spin-splitting risultante è proporzionale al vettore d'onda ed al campo elettrico superficiale secondo la relazione

$$\Delta_R \sim E_{surf} k.$$

Il parametro di accoppiamento spin-orbita nel termine di Rashba viene di solito considerato proporzionale al valor medio del campo elettrico effettivo

$$\langle E \rangle = \left\langle - \left(\frac{1}{e} \right) \left(\frac{d}{dz} \right) (E_c + V) \right\rangle,$$

avendo indicato con E_c il profilo della banda di conduzione, con V l'energia potenziale elettrostatica applicata e/o quella di carica spaziale, con z la direzione di accrescimento del cristallo.

L'espressione riportata, però, non è formalmente corretta, perchè il profilo di banda E_c ed il potenziale elettrostatico V non giocano lo stesso ruolo. Infatti, come si scoprirà meglio anche in seguito, in generale il termine di spin-orbita riferito all'effetto Rashba, in una eterostruttura, è composto da due diversi contributi.

Le difficoltà alla base della determinazione del termine di accoppiamento spin-orbita di Rashba sono strettamente correlate con quella che, in letteratura, è nota come *l'argomentazione di Ando*. La motivazione essenziale che viene mossa da quest'ultima sostiene che l'entità dello splitting dovrebbe in realtà risultare estremamente modesta, addirittura nulla al primo ordine

della teoria perturbativa, a causa del fatto che scaturisce dall'effetto relativistico in base al quale un elettrone che si muove con vettore d'onda non nullo¹³, avverte l'effetto del campo elettrico presente all'interfaccia come se fosse prodotto da un campo magnetico. Tutto ciò spiega il fatto per cui gli elettroni confinati si accorgono di un campo elettrico effettivo medio pari a zero.

Questo tipo di spiegazione è stata successivamente falsificata da esperimenti più dettagliati e da misurazioni più accurate, che hanno effettivamente messo in evidenza splitting apprezzabili. Tra l'altro è stato suggerito anche che l'argomentazione di Ando fallisce in quanto il campo elettrico effettivo medio avvertito da un elettrone localizzato è non nullo quando la *massa efficace*¹⁴ non è costante attraverso l'interfaccia. Infatti, la discontinuità nella massa efficace conduce alla presenza all'interfaccia di una forza impulsiva. In definitiva, l'argomentazione di Ando decade per due motivi: primo, perchè esiste una correzione spin-orbita che deriva da un cambiamento nelle condizioni al contorno, di cui si accenna soltanto la presenza, dato che esula dagli scopi di quest'analisi; in secondo luogo, perchè il termine principale dello splitting spin-orbita in banda di conduzione dovuto all'interazione con la banda di valenza non è semplicemente proporzionale al campo elettrico effettivo.

¹³Considerare un elettrone con vettore d'onda non nullo equivale a considerarlo dotato di una quantità di moto \mathbf{p} , o ancora caratterizzato da una certa massa ed una certa velocità, dal momento che sussiste l'equivalenza tra vettore d'onda \mathbf{k} e quantità di moto \mathbf{p} , che può essere esplicitata come $\mathbf{k} = \frac{\mathbf{p}}{\hbar}$.

¹⁴Si definisce *massa efficace* il parametro equivalente alla massa inerziale, che viene introdotto quando, al posto di una particella libera, se ne considera una quantistica in moto all'interno di un potenziale periodico (cfr. § 6.1).

Il parametro di accoppiamento spin-orbita di Rashba può essere espresso anche come

$$\alpha_R = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta}{\mathcal{E}_g} \frac{2\mathcal{E}_g + \Delta}{(\mathcal{E}_g + \Delta)(3\mathcal{E}_g + 2\Delta)} \quad (3.24)$$

indicando con m^* la massa efficace, con \mathcal{E}_g l'energia di gap, con Δ lo splitting spin-orbita in banda di valenza.

3.8.6 *Hamiltoniana Effettiva di Spin-Orbita*

Si presenta qui l'Hamiltoniana totale [22], che contiene tanto la componente di energia potenziale e cinetica, quanto quella d'interazione spin-orbita. La denominazione *effettiva* denota l'implicita approssimazione di *massa efficace*.

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m^*} + V + \alpha_R \left((\nabla V) \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.25)$$

con

$\frac{p^2}{2m^*} + V$ energia potenziale e cinetica;

$\alpha_R \left((\nabla V) \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ termine di Rashba.

L'ipotesi assunta di massa efficace permette di considerare l'elettrone come una particella libera, che si muove nello spazio libero, anche se muovendosi in un potenziale periodico¹⁵ risulterebbe a tutti gli effetti una particella quantistica. Questa semplificazione costituisce proprio l'enorme vantaggio fornito dall'introduzione del parametro *massa efficace*, che si associa ad una particella quantistica in modo equivalente a quanto accade per la massa inerziale di una particella libera. Infatti, grazie alla massa efficace, si tiene conto

¹⁵Per la definizione rigorosa di *potenziale periodico*, con relativa trattazione, si veda più avanti la sezione § 6.1.

degli effetti prodotti dal potenziale periodico sull'elettrone. In particolare, la massa efficace giustifica, in termini rigorosi, l'approssimazione tra la relazione di dispersione $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\mathbf{k})$, che lega l'energia ed il vettore d'onda, e la relazione di dispersione dello spazio libero.

Parte II

*Analisi del Dispositivo ed
Implementazione Numerica
dell' Effetto Rashba*

Capitolo 4

Concetti Fondamentali di Tunneling Risonante ed Applicazioni

L'analisi che segue in questo capitolo intende passare in rassegna le questioni fisiche alla base del principio di funzionamento del diodo tunneling interbanda risonante, ottenuto a partire da una eterostruttura asimmetrica a doppia barriera di potenziale, realizzata con InAs/GaSb/AlSb, evidenziando le analogie e le peculiarità che lo contraddistinguono con altre tipologie di dispositivi quantistici.

Si esordisce con una trattazione sintetica dei concetti fondamentali che contraddistinguono il tunneling risonante, per poi procedere con l'esame di alcune tipologie di dispositivi che implementano questo fenomeno. In particolare, si intende fornire una visione generale dei RTD (Resonant Tunneling Diode) e dei RITD (Resonant Interband Tunneling Diode), che risulta conveniente nell'ottica dell'analisi del diodo tunneling interbanda risonante, oggetto dell'indagine specifica proposta nel proseguio.

4.1 *Tunneling Risonante*

4.1.1 *Tunneling e Tunneling Risonante a Confronto*

Tunneling: Definizione e Descrizione Essenziale

Con il termine *tunneling* si intende un fenomeno che appartiene esclusivamente alla meccanica quantistica, in base al quale una particella, proveniente da $-\infty$, dotata di energia potenziale pari al valore \mathcal{E} , può penetrare una barriera di potenziale di altezza pari ad U_0 , con $U_0 > \mathcal{E}$, [24].

Questo equivale ad affermare che esiste una probabilità di transizione non nulla associata all'onda viaggiante da $-\infty$ a $+\infty$, corrispondente alla particella in esame, che appunto ha superato la barriera. Da un punto di vista di trattazione fisica classica del problema, un caso del genere non è contemplato: una particella con $U_0 > \mathcal{E}$ non può assolutamente penetrare la barriera, in quanto all'interno avrebbe energia cinetica negativa; pertanto, sarebbe riflessa completamente nella direzione da cui è provenuta.

L'implementazione di questa proprietà si ritrova nel diodo tunnel, noto anche come *diodo Esaki*, in cui gli elettroni effettuano il tunneling tra i due lati di una giunzione p-n a drogaggio degenere, passando dalla banda di conduzione (lato n) alla banda di valenza (lato p) e viceversa.

Equazione di Schrödinger

La trattazione analitica muove a partire dall'*equazione di Schrödinger* stazionaria, che viene di seguito riportata:

$$\nabla^2 \Psi(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\mathcal{E} - U(\mathbf{r}) \right) \Psi(\mathbf{r}) = 0$$

avendo indicato con

\hbar costante di Planck normalizzata;

m massa della particella;

\mathbf{r} coordinata spaziale; in sostanza è il vettore posizione in un sistema di riferimento di assi cartesiani;

$U(\mathbf{r})$ energia potenziale;

\mathcal{E} energia totale della particella, pari a $\mathcal{E} \doteq \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r})$;

$\Psi(\mathbf{r})$ *FUNZIONE DI STATO*.

La funzione di stato è tale che dalla sua conoscenza è possibile ricavare il valore delle variabili dinamiche del sistema, cioè di tutte quelle intrinseche quali energia e quantità di moto. Partendo dalla funzione di stato associabile, si ricavano tutte le informazioni sulle entità misurabili relative alla particella. L'equazione di Schrödinger riveste un ruolo di importanza fondamentale, dal momento che descrive l'evoluzione nel tempo e la distribuzione nello spazio della funzione d'onda Ψ , che viene associata al moto dell'elettrone.

4.1.2 Tunneling Risonante: Definizione.

L'idea del tunneling risonante in super-reticoli finiti a semiconduttore fu proposta per la prima volta da Tsu ed Esaki nel 1973 [32] [33]. Questo fenomeno di tunneling specifico fu analizzato e predetto per una eterostruttura con doppia barriera di potenziale, costituita da AlGaAs/GaAs/AlGaAs, in cui si ha risonanza dell'elettrone, in modo analogo a ciò che accade nell'interferometro di Fabry-Perot nell'ambito dell'ottica della fisica classica [35].

Così come la barriera di potenziale (*RECTANGULAR BARRIER*) evidenzia il fenomeno del tunneling, il tunneling risonante è una proprietà tipica

di strutture in cui esistono almeno due barriere ed una buca di energia potenziale, che separano le regioni esterne, in cui l'elettrone invece si comporta come una particella libera. La forma più semplice di struttura con due barriere ed una buca è indicata in letteratura con l'acronimo **DBQW**, *Double Barrier Quantum Well*.

Double Barrier Quantum Well.

La doppia barriera rettangolare di potenziale è la struttura basilare in cui si riscontra tunneling risonante ed annovera tra le proprietà quantistiche principali quella in base a cui esistono uno o più valori di energia in corrispondenza dei quali la probabilità di attraversamento dell'intera struttura, designata con τ , diventa estremamente elevata (al limite tendente al valore unitario).

Il valore di τ dipende dalle caratteristiche delle barriere, cioè l'altezza U_0 , la larghezza W e l'energia \mathcal{E} associata all'elettrone incidente, ma la vera peculiarità consiste nel fatto che, la condizione $\tau = 1$, raggiunta nella singola barriera solo nella condizione limite $\mathcal{E} = U_0$ oppure $W = 0$, nella doppia barriera è soddisfatta per valori distinti di energia \mathcal{E} .

Ciò significa che, in condizioni di risonanza, la barriera diventa "trasparente" per l'elettrone incidente, cioè il moto dell'elettrone non risente affatto della presenza dell'ostacolo costituito dal salto di energia potenziale. Variando la struttura delle barriere, può cambiare il numero delle possibili condizioni di risonanza; ma, indipendentemente dai valori scelti per i parametri propri della barriera, si può dimostrare che

- esiste sempre almeno un valore di energia $\mathcal{E} = \mathcal{E}_0$ nell'intervallo $(U; U_0)$ tale che soddisfa la condizione di risonanza;
- tale valore di energia corrisponde a quello del primo stato legato dentro la buca di potenziale.

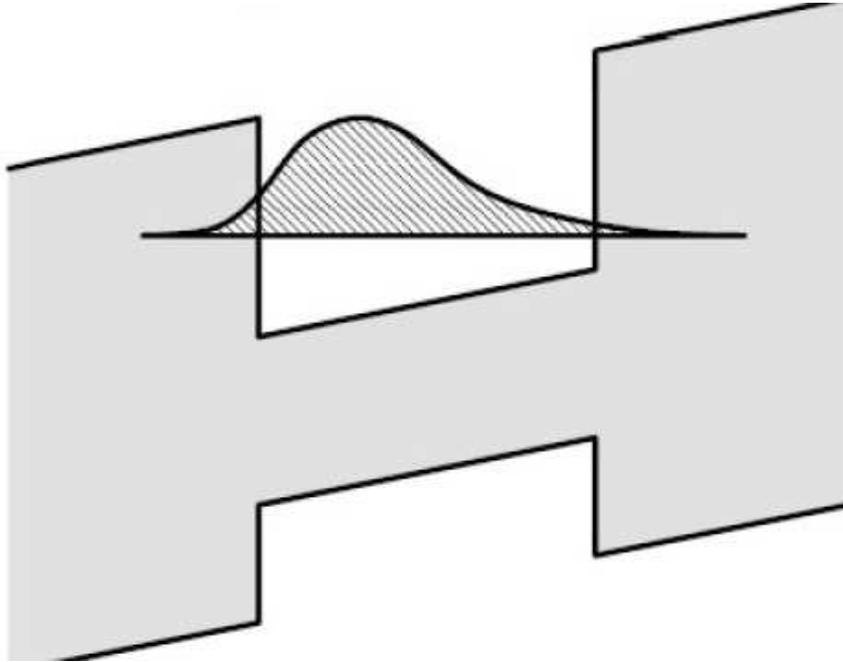


Figura 4.1: Effetto tunnel risonante in una doppia barriera rettangolare di potenziale. (L'immagine è tratta da alcune slides utilizzate durante il corso *Spin-Orbit Coupling in 2D Systems*, tenuto da R. Winkler presso l'Università di Hannover, e disponibili, in rete, all'indirizzo <http://www.nano.uni-hannover.de/~winkler/>.)

Dispositivi a Tunneling Risonante.

La proprietà del tunneling risonante trova impiego nell'implementazione di dispositivi che si distinguono in due categorie principali:

1. **RTD** (Resonant Tunneling Diode). L'elettrone attraversa la barriera di energia potenziale rimanendo sempre in banda in conduzione. Sono dispositivi a resistenza differenziale negativa, in cui il processo di conduzione interessa la sola banda di conduzione.
2. **RITD** (Resonant Interband Tunneling Diode). L'attraversamento della barriera di potenziale comporta anche il passaggio dalla banda di

conduzione a quella di valenza e viceversa. Sono dispositivi in cui l'attraversamento della serie barriera-buca-barriera implica anche il passaggio da una banda all'altra. La risonanza viene sfruttata anche per aumentare la corrente di picco e ridurre quella di valle così da ottenere un incremento del rapporto picco-valle.

Tra le caratteristiche principali, se ne rintraccia una specifica, che non solo accomuna le due tipologie, ma soprattutto che desta particolare interesse, da un punto di vista strettamente ingegneristico: tale proprietà consiste nel presentare una resistenza differenziale negativa all'interno di un preciso range di valori del potenziale applicato.

Tunneling Risonante in RTD.

Un RTD, in generale, è costituito da una buca quantistica non drogata, che si trova all'interno di due strati non drogati, che si comportano da barriere di potenziale, e di regioni di contatto, fortemente drogate, che funzionano da emettitore e da collettore.

Un RTD è considerato un sistema quantistico aperto, con stati elettronici visti come stati scattering con una distribuzione continua nello spazio energetico, piuttosto che stati legati con uno spettro energetico discreto. In questo contesto, gli stati quasi-legati (*STATI RISONANTI*) si formano nella buca di potenziale, che accoglie gli elettroni per un tempo che è caratteristico della struttura in esame.

Il sistema a doppia barriera più comune è formato da $Al_xGa_{1-x}As$ (*barriera*)/ $GaAs$ (*buca*)/ $Al_xGa_{1-x}As$ (*barriera*). Il fenomeno del tunneling risonante attraverso la struttura a doppia barriera accade quando l'energia degli elet-

troni che fluiscono dall'emettitore coincide con il valore \mathcal{E}_0 , energia del primo stato quasi-legato, nella buca di potenziale.

La corrente di tunneling risonante inizia a scorrere quando \mathcal{E}_0 raggiunge il livello di quasi-Fermi \mathcal{E}_F nella zona di emettitore e cessa quando \mathcal{E}_0 cade sotto l'estremo della banda di conduzione.

Capitolo 5

Analisi Numerica

5.1 *Proprietà Generali di un Elettrone in un Potenziale Periodico*

5.1.1 *Potenziale Periodico*

Una struttura a cristallo teoricamente perfetta è costituita da ioni disposti in un array periodico regolare, che è stato definito *reticolo di Bravais* (§ 3.3.1 pag.42 del presente testo). Si è supposto anche come il cristallo fisico possa essere considerato come una porzione finita del reticolo infinito ideale di Bravais, trascurando l'effettiva dipendenza dalla temperatura, la probabilità di trovare posizioni del reticolo non occupate, cioè di avere ioni delocalizzati, ed infine la caratteristica non-stazionarietà degli ioni stessi, che oscillano continuamente intorno alle rispettive collocazioni perchè sottoposti a vibrazioni termiche.

Questa problematica, di carattere prettamente reale, giustifica la necessità di allargare l'analisi e di indagare anche in linea teorica riguardo al caso

di un elettrone che si trovi all'interno di un potenziale $U(\mathbf{r})$ caratterizzato dalla stessa periodicità del reticolo di Bravais sottostante, cioè proprio della struttura a semiconduttore in esame.

Si indichi con \mathbf{R} il vettore posizione di ciascun punto costituente il reticolo di Bravais, mentre con \mathbf{r} si intende la coordinata spaziale. Il potenziale, a cui è sottoposto l'elettrone, assume così la forma:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}). \quad (5.1)$$

Si scopre, però, che, in generale, la periodicità del potenziale $U(\mathbf{r})$ risulta pari, come ordine di grandezza, a $\sim 10^{-8}cm$. Questo è il valore tipico riscontrato in un reticolo di una struttura a semiconduttore, su cui si implementano normalmente i dispositivi elettronici. La stessa dimensione, del resto, è quella che viene di solito assunta come discriminante per la lunghezza d'onda di De Broglie di un elettrone, modellato come particella libera.

Tale coincidenza è di importanza fondamentale, anche perchè implica l'inevitabile adozione della meccanica quantistica per lo studio dell'effetto periodico prodotto dal moto dell'elettrone.

L'aspetto peculiare del potenziale periodico appena analizzato $U(\mathbf{r})$ risiede nel fatto che tiene conto delle reciproche interazioni tra i vari elettroni costituenti una generica struttura a cristallo. Nella Hamiltoniana completa, infatti, si individuano due componenti principali, che rappresentano, rispettivamente, l'interazione tra ogni elettrone ed il nucleo e quella tra i vari elettroni.

Per questa sua funzione specifica, il potenziale periodico $U(\mathbf{r})$ viene spesso indicato con l'attributo *effettivo*.

5.1.2 Teorema di Bloch

In questa sezione, si concentra l'attenzione sull'esame delle proprietà generali dell'equazione di Schrödinger riferita ad un singolo elettrone.

Si consideri il potenziale periodico $U(\mathbf{r})$ nella forma (6.1) e l'equazione generale di Schrödinger, riportata di seguito:

$$\mathcal{H}\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \Psi = \mathcal{E}\Psi \quad (5.2)$$

con \mathcal{E} energia.

Gli elettroni, la cui funzione d'onda soddisfa all'equazione appena vista, sono noti come *elettroni di Bloch*, appellativo che rimarca il vincolo al quale sono sottoposti, che è costituito appunto dal potenziale periodico e che li rimuove dalla condizione di elettroni liberi. Il caso, infatti, ideale, in cui si approssimano gli elettroni a particelle libere, equivale ad un caso degenerare di quello attualmente in esame, con l'ipotesi che il potenziale periodico sia nullo.

Gli stati stazionari degli elettroni di Bloch sono caratterizzati da una proprietà fondamentale, direttamente deducibile dalla periodicità del potenziale periodico e nota come *teorema di Bloch*¹, di cui si riporta l'enunciato.

Teorema di Bloch. Sia data l'Hamiltoniana seguente, valida per un singolo elettrone,

$$\mathcal{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right) \quad (5.3)$$

con $U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r})$ per tutti gli \mathbf{R} del reticolo di Bravais.

¹Nel caso monodimensionale, il teorema di cui si appresta a fornire l'enunciato fu dimostrato, per la prima volta, da Floquet: per questo motivo, spesso, si trova in letteratura sotto il nome di *teorema di Floquet*.

Gli autostati Ψ , soluzioni dell'equazione precedente, possono essere espressi nella forma di un'onda piana moltiplicata per una funzione dotata della stessa periodicità del reticolo di Bravais.

$$\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (5.4)$$

con $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ per tutti gli \mathbf{R} del reticolo di Bravais². Le due equazioni (6.3-6.4) precedenti implicano che la funzione d'onda possa essere esplicitata come

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Psi(\mathbf{r}) \quad (5.5)$$

In base al teorema di Bloch, si è introdotto un vettore d'onda \mathbf{k} , che gioca, nel contesto del moto dell'elettrone in un potenziale periodico, lo stesso ruolo svolto dal vettore d'onda "tradizionale" \mathbf{k} , all'interno della teoria approssimata in cui l'elettrone è considerato come se fosse una particella libera³.

Per un certo n assegnato, gli autostati e gli autovalori $\Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ e $\mathcal{E}_{n\mathbf{k}}$ risultano funzioni periodiche in \mathbf{k} all'interno del *reticolo reciproco* di Bravais⁴. L'informazione apportata dalla conoscenza di tali funzioni viene definita *struttura a banda* del cristallo. Per ogni valore di n , l'insieme dei livelli elettronici specificati da $\mathcal{E}_n(\mathbf{k})$ è riferito come *banda di energia*.

²L'indice n è definito *indice di banda*, necessario perchè, per un dato \mathbf{k} esiste più di un autostato, l'uno indipendente dall'altro.

³Per ulteriori approfondimenti riguardo alla questione, si può trovare interessante l'analisi svolta da Ashcroft-Mermin, nel testo già citato e riportato in bibliografia.

⁴Si consideri un insieme di punti \mathbf{R} , costituenti un reticolo di Bravais, ed un'onda planare, $e^{j\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. Per \mathbf{k} generico, non è assicurato che l'onda abbia la periodicità del reticolo di Bravais, ma la possiede sicuramente per particolari valori di \mathbf{k} . L'insieme di tutti quei vettori d'onda \mathbf{K} , che contiene onde planari con la periodicità di un dato reticolo di Bravais, è noto come *reticolo reciproco*.

5.1.3 *Analisi di un Elettrone Incidente su una Struttura Monodimensionale*

Si esamini il caso generale di un elettrone che incide contro una struttura a potenziale periodico monodimensionale, indicato con $U(x)$, considerato come una successione di barriere di potenziale $v(x)$ di ampiezza a , centrate nei punti $x = \pm na$.

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x - na).$$

L'elettrone viene ad essere immaginato come una particella, che incide da sinistra verso destra, contro la barriera di potenziale $v(x)$ estrapolata a partire dalla successione appena definita, con energia pari a $\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Per un modello monodimensionale, che presuppone una struttura a banda parabolica, con l'approssimazione di massa efficace m^* , si ricava un'Hamiltoniana associata di equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right) + U(x) \Psi(x) = \mathcal{E} \Psi(x).$$

All'interfaccia tra due diversi semiconduttori, costituenti l'eterostruttura, si necessita la continuità fisica della funzione d'onda e della corrente, condizioni che si ripercuotono, matematicamente, nell'imposizione della condizione di continuità sulla funzione d'onda e sulla sua derivata prima. In definitiva, devono risultare continue all'interfaccia sia la funzione $\Psi(x)$, che la funzione $\left(\frac{1}{m^*} \frac{d\Psi(x)}{dx} \right)$.

Nei problemi di tunneling quantistico, le condizioni al contorno non perdono assolutamente la propria importanza, dato che anche in questo caso assicurano la validità fisica delle soluzioni.

In particolare, si possono riassumere nell'imposizione di tre vincoli, che prevedono, rispettivamente [36]:

- uno stato d'onda piana incidente dalla regione a sinistra dell'interfaccia, che si suppone noto;
- l'assenza di stati incidenti dalla regione a destra dell'interfaccia;
- stati d'onda piana, incogniti, che risultano, rispettivamente, trasmessi nella regione a destra e riflessi in quella a sinistra.

Tutto quanto esposto, riguardo alle condizioni al contorno richieste, si schematizza come riportato di seguito.

La funzione d'onda $\Psi_s(x)$, dove il pedice s indica la provenienza della particella da sinistra, assume la forma data dall'espressione:

$$\begin{cases} x \leq \frac{a}{2}, & \Psi_s(x) = e^{jk_x} + r e^{-jk_x}; \\ x \geq \frac{a}{2}, & \Psi_s(x) = t e^{jk_x}, \end{cases} \quad (5.6)$$

avendo indicato con r il *coefficiente di riflessione* e con t il *coefficiente di trasmissione*. Questi coefficienti assumono il significato di distribuzioni di probabilità (*probability amplitude*), che l'elettrone possiede in merito alla sua riflessione e trasmissione, per effetto tunnel, attraverso la barriera di potenziale.

Per pura semplicità, si ipotizza che la funzione $v(x)$ sia pari, cioè tale da soddisfare la condizione

$$v(x) = v(-x).$$

Questa proprietà matematica, del resto, tiene conto della simmetria d'inversione della struttura fisica.

Sempre come conseguenza della parità della funzione $v(x)$, si deduce una proprietà relativa alla funzione d'onda associata all'elettrone considerato come particella che incide sulla destra della barriera di potenziale, che poi non è altro che il caso speculare di quello appena esaminato.

Tale funzione d'onda, indicata con il pedice d per la provenienza della particella da destra, è ancora soluzione dell'equazione di Schrödinger (), ed è esprimibile nella forma:

$$\Psi_d(x) = \Psi_s(-x).$$

La situazione che si viene a creare può essere schematizzata nel sistema seguente:

$$\left\{ \begin{array}{l} x \leq \frac{a}{2}, \quad \Psi_d(x) = te^{-jkx}; \\ x \geq \frac{a}{2}, \quad \Psi_d(x) = e^{-jkx} + re^{jkx}. \end{array} \right. \quad (5.7)$$

Dal momento che $\Psi_s(x)$ e $\Psi_d(x)$ sono a tutti gli effetti due soluzioni *indipendenti* della stessa equazione di Schrödinger, afferente alla barriera di potenziale con la stessa energia, si evince che tali funzioni d'onda costituiscono una base e, di conseguenza, qualunque altra soluzione può essere espressa come loro combinazione lineare.

$$\Psi(x) = A\Psi_s(x) + B\Psi_d(x).$$

Risulta interessante mettere in evidenza il legame che intercorre tra la funzione d'onda e la sua derivata prima.

A tal scopo, si torni a considerare la relazione generale della funzione d'onda:

$$\Psi(x) = e^{jkx} + re^{-jkx} \quad (5.8)$$

In base all'espressione precedente, si ha che la funzione d'onda valutata in $x = 0$ assume la forma

$$\Psi(0) = 1 + r.$$

Sempre con riferimento alla equazione (5.8), avendo applicato l'operatore di derivazione, segue che

$$\left. \frac{d}{dx} \Psi(x) \right|_0 = \Psi'(0) = jk[2 - \Psi(0)] \quad (5.9)$$

Le due relazioni rappresentano il legame che sussiste tra la funzione d'onda e la sua derivata prima, entrambe valutate nello stesso punto $x = 0$.

Qui si conclude la digressione riguardo all'analisi di un elettrone incidente su una struttura monodimensionale, che pur non essendo certamente esaustiva, permette comunque di avere un'idea sulla metodologia da adottare nel risolvere problematiche di questo tipo. Già nella sezione immediatamente seguente, si ricorre a questo procedimento.

5.2 Equazioni del Modello Numerico

Alla base del modello numerico che ci si appresta a proporre, si rintracciano le seguenti equazioni, che sono note in letteratura con l'appellativo di *EQUAZIONI STAZIONARIE*:

$$\begin{cases} \mathcal{E}\Psi_c(x) = \left(\mathcal{E}_c + U(x, t) \right) \Psi_c(x) - \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \Delta \Psi_c(x) - \nabla U(x, t) \frac{P\hbar^2}{m_o \mathcal{E}_g} \Psi_v(x), \\ \mathcal{E}\Psi_v(x) = \left(\mathcal{E}_v + U(x, t) \right) \Psi_v(x) - \frac{\hbar^2}{2m_v^*} \Delta \Psi_v(x) - \nabla U(x, t) \frac{P\hbar^2}{m_o \mathcal{E}_g} \Psi_c(x), \end{cases} \quad (5.10)$$

avendo indicato con

Ψ_c funzione d'onda in banda di conduzione;

Ψ_v funzione d'onda in banda di valenza;

\mathcal{E}_c energia in banda di conduzione;

\mathcal{E}_v energia in banda di valenza;

m_c^* massa efficace dell'elettrone in banda di conduzione;

m_v^* massa efficace dell'elettrone in banda di valenza;

$U(x, t)$ profilo della barriera di potenziale;

\mathcal{E}_g energia di gap;

\mathcal{E} energia⁵;

P profilo di drogaggio.

⁵Si noti, in particolare, come tra k ed \mathcal{E} intercorra il legame dato dalla relazione di dispersione. In realtà, \mathcal{E} è un parametro variabile, ma, in questo contesto, è trattato come una costante.

Dopo aver effettuato un'operazione di scalatura, rispetto alle costanti, con ε parametro di scalatura, si ottiene il sistema:

$$\begin{cases} \varepsilon \left(\mathcal{E}_c + U(x, t) - \mathcal{E} \right) \Psi_c(x) - \frac{m_o}{2m_c^*} \Delta \Psi_c(x) - \nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \Psi_v(x) = 0, \\ \varepsilon \left(\mathcal{E}_v + U(x, t) - \mathcal{E} \right) \Psi_v(x) + \frac{m_o}{2m_v^*} \Delta \Psi_v(x) - \nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \Psi_c(x) = 0. \end{cases} \quad (5.11)$$

Nella precedente operazione di scalatura, si è adottato il *formalismo di Green*, in base al quale si hanno le seguenti grandezze di riferimento:

GRANDEZZE DI RIFERIMENTO	VALORI NUMERICI
lunghezza	$L = 0.1 \text{ nm} = 10^{-8} \text{ m}$
carica dell'elettrone	$q = 1.610^{-19} \text{ C}$
massa dell'elettrone	$m_e = 9.110^{-31} \text{ kg}$
massa efficace dell'elettrone	$m_e^* = 0.0667 m_e$
costante di Boltzmann	$K_B = 1.3810^{-23} \text{ JK}^{-1}$
costante adimensionale	$\varepsilon = \frac{q m_e^* L^2}{\hbar^2}$

Tabella 5.1: Grandezze di riferimento e valori numerici, secondo il formalismo di Green.

Risolvere il sistema di equazioni proposto significa determinarne le soluzioni, rappresentate dalle due funzioni d'onda $\Psi_c(x)$ e $\Psi_v(x)$; ma, per far ciò, è necessario impostare prima le condizioni al contorno del problema.

Analizzando la possibile casistica che si può presentare, si individuano i seguenti quattro casi. Ognuno di essi prende in considerazione il comportamento di un elettrone, che attraversa, per effetto tunnel, una barriera di potenziale, modellata come una struttura che si estende nello spazio nell'intervallo $[0, L]$, e che si trova ad essere in parte trasmesso ed in parte riflesso.

L'elettrone può essere iniettato in corrispondenza di $x = 0$ ed arrivare a destinazione in prossimità di $x = L$, oppure, in modo del tutto speculare, può essere immesso nella struttura in $x = L$ e fuoriuscirne in $x = 0$. In ogni caso, comunque, il problema può essere ricondotto a quello generale di un elettrone che incide contro una struttura a potenziale periodico monodimensionale, affrontato nella sezione immediatamente precedente, trattando sostanzialmente l'elettrone come un'onda piana viaggiante.

1. Iniezione dell'elettrone in $x = 0$ (banda di conduzione).

In questo caso, la soluzione del sistema (5.11), per $x < 0$, viene ad essere rappresentata dalla funzione d'onda Ψ , espressa nella forma:

$$\Psi = \mathbf{e}_c(e^{jk_ix} + r_c e^{-jk_ix}) + \mathbf{e}_v r_v e^{-jk_v x},$$

avendo indicato con

$$\mathbf{e}_c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{e}_v = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Questi due vettori costituiscono una base dello spazio in esame. I coefficienti r_c ed r_v rappresentano, rispettivamente, il coefficiente di riflessione in banda di conduzione e quello in banda di valenza.

Dalla relazione riportata, si evince immediatamente che la funzione d'onda Ψ risulta esprimibile come somma di tre termini, di cui i primi due afferenti alla banda di conduzione, l'altro riconducibile alla banda di valenza.

In particolare, si nota come, mentre in conduzione si registra sia una componente trasmessa, sia una riflessa, se ne rintraccia soltanto una riflessa in valenza. Questa mancanza di perfetta simmetria all'interno di ogni banda è imputabile al fatto che l'elettrone, per ipotesi, viene ad essere iniettato solo in banda di conduzione.

Il legame, analizzato già nel caso monodimensionale (5.9), tra la funzione d'onda e la sua derivata prima, assume la forma riportata di seguito, dovuta al contesto a due bande in cui si trova ad operare.

$$\Psi'(\mathbf{0}) = \begin{pmatrix} -jk_i & 0 \\ 0 & -jk_{rv} \end{pmatrix} \cdot \Psi(\mathbf{0}) + \begin{pmatrix} 2jk_i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

La forma scelta risulta particolarmente conveniente, dal momento che ha eliminato ogni dipendenza esplicita dai coefficienti di riflessione r_c ed r_v , così che la funzione d'onda $\Psi(\mathbf{0})$ risulta espressa in funzione soltanto della sua derivata prima $\Psi'(\mathbf{0})$ e di

$$k_i = \sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_c(0)] \frac{m_c^*}{m_o}} ;$$

$$k_{rv} = -j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(0)] \frac{m_v^*}{m_o}} .$$

2. Iniezione dell'elettrone in $x = L$ (banda di conduzione).

Questo caso è del tutto analogo a quello precedente, a meno di un segno, dovuto alla specularità del punto in cui l'elettrone si immette nella struttura.

In questo caso, la soluzione del sistema (5.11), per $x < 0$, viene ad essere rappresentata dalla funzione d'onda Ψ , espressa nella forma:

$$\Psi = \mathbf{e}_c(e^{-jk_i(x-L)} + r_c e^{jk_i(x-L)}) + \mathbf{e}_v r_v e^{jk_{rv}(x-L)}.$$

La relazione tra la funzione d'onda e la sua derivata prima diventa esprimibile nella forma:

$$\Psi'(0) = \begin{pmatrix} jk_i & 0 \\ 0 & jk_{rv} \end{pmatrix} \cdot \Psi(L) + \begin{pmatrix} -2jk_i \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

avendo indicato con

$$k_i = \sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_c(0)] \frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{rv} = -j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(0)] \frac{m_v^*}{m_o}}.$$

3. **Arrivo dell'elettrone in $x = L$.** Questo caso rappresenta il complementare di quello analizzato al punto 1. La soluzione del sistema (5.11), per $x > L$, cioè al di fuori della struttura proposta, viene ad essere espressa come:

$$\Psi = \mathbf{e}_c t_c (e^{jk_{tc}(x-L)} + e_v t_v e^{jk_{tc}(x-L)}).$$

Il legame tra la funzione d'onda e la sua derivata prima assume la forma

$$\Psi'(L) = \begin{pmatrix} jk_{tc} & 0 \\ 0 & jk_{tv} \end{pmatrix} \cdot \Psi(L) \quad (5.14)$$

avendo indicato con

- **banda di conduzione:**

$$k_{tc} = \sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_c(L)] \frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)] \frac{m_v^*}{m_o}};$$

- **gap:**

$$k_{tc} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E}_c(L) - \mathcal{E}] \frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)] \frac{m_v^*}{m_o}};$$

- **banda di valenza:**

$$k_{tc} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E}_c(L) - \mathcal{E}] \frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = -\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)] \frac{m_v^*}{m_o}};$$

4. **Arrivo dell'elettrone in $x = 0$.** Questo caso rappresenta il complementare di quello analizzato al punto 2. La soluzione del sistema (5.11), per $x < 0$, cioè al di fuori della struttura proposta, viene ad essere espressa come:

$$\Psi = e_c t_c (e^{-jk_{tc}x} + e_v t_v e^{-jk_{tv}x}).$$

Il legame tra la funzione d'onda e la sua derivata prima assume la forma

$$\Psi'(\mathbf{L}) = \begin{pmatrix} -jk_{tc} & 0 \\ 0 & -jk_{tv} \end{pmatrix} \cdot \Psi(\mathbf{L}) \quad (5.15)$$

avendo indicato con

- **banda di conduzione:**

$$k_{tc} = \sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_c(L)] \frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)] \frac{m_v^*}{m_o}};$$

- gap:

$$k_{tc} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E}_c(L) - \mathcal{E}]\frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = -\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)]\frac{m_v^*}{m_o}};$$

- banda di valenza:

$$k_{tc} = j\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E}_c(L) - \mathcal{E}]\frac{m_c^*}{m_o}};$$

$$k_{tv} = -\sqrt{2\varepsilon[\mathcal{E} - \mathcal{E}_v(L)]\frac{m_v^*}{m_o}}.$$

5.3 Metodo di Runge-Kutta

Questa sezione è dedicata ad una breve introduzione al metodo numerico noto in letteratura come metodo di Runge-Kutta [37], che permette di determinare la soluzione di qualsiasi problema fisico riconducibile ad un'equazione del tipo

$$\frac{d}{dx}f(x) = h(x) f(x) \quad (5.16)$$

con $h(x)$ funzione che viene supposta nota.

La soluzione che si ottiene è senz'altro approssimata, dal momento che il metodo è numerico, ma risulta comunque un grado di approssimazione sufficientemente buono, dato che si può arrivare fino al quarto ordine.

Il metodo muove da una discretizzazione dello spazio in cui si opera, inteso come regione occupata fisicamente dal dispositivo, che si traduce trasformando l'equazione (5.16) nella forma seguente:

$$\frac{d}{dx}f(x_i) = h(x_i) f(x_i). \quad (5.17)$$

Applicando il metodo di Runge Kutta al caso del problema oggetto di questa tesi, si ha la necessità di definire un vettore, indicato come $\mathbf{T}(\mathbf{x})$, in

modo tale che l'equazione associata possa essere ricondotta alla forma (5.16) prevista dal metodo stesso. In definitiva, si arriva ad operare con l'equazione:

$$\frac{d}{dx}\mathbf{T}(\mathbf{x}) = h(x) \mathbf{T}(\mathbf{x}), \quad (5.18)$$

avendo definito

$$\mathbf{T}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \Psi_c(x) \\ \Psi_v(x) \\ \Psi'_c(x) \\ \Psi'_v(x) \end{pmatrix}.$$

Il nodo da sciogliere di tutta la questione riguarda il fatto che non è dato conoscere il valore $\mathbf{T}(\mathbf{0})$, assunto dal vettore $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ appena definito in corrispondenza di $x = 0$.

Indagando il motivo per cui non si può conoscere il tanto desiderato valore $\mathbf{T}(\mathbf{0})$, si scopre che la ragione risiede nella mancanza di disponibilità dei valori in $x = 0$ delle funzioni d'onda $\Psi_c(x)$ e $\Psi_v(x)$, componenti costitutive del vettore $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ stesso. Infatti, ciò su cui si può far conto è il legame che intercorre tra le due funzioni d'onda, perché è noto, ma non altrettanto si può dire a proposito dei coefficienti r_c ed r_v , che sono incogniti.

In definitiva, è proprio dalla mancata conoscenza di questi ultimi che scaturisce la definizione incompleta di $\Psi_c(x)$ e $\Psi_v(x)$, che poi si ripercuote sulla impossibilità di arrivare alla definizione di $\mathbf{T}(\mathbf{0})$.

Si consideri di nuovo il sistema delle equazioni stazionarie scalate, rappresentato dalla (5.11), ma si riscriva nella forma matriciale seguente:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon[\mathcal{E}_c + U(x) - \mathcal{E}] \frac{2m_c^*}{m_o} - \frac{d^2}{dx^2} & -\nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \frac{2m_c^*}{m_o} \\ \nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \frac{2m_v^*}{m_o} & -\varepsilon[\mathcal{E}_v + U(x) - \mathcal{E}] \frac{2m_v^*}{m_o} - \frac{d^2}{dx^2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi_c(x) \\ \Psi_v(x) \end{pmatrix} = 0$$

Disponendo della relazione precedente, si può esprimere la derivata del vettore $\mathbf{T}(\mathbf{x})$ e l'equazione assume la forma

$$\mathbf{T}'(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ \varepsilon[\mathcal{E}_c + U(x) - \mathcal{E}] \frac{2m_c^*}{m_o} - \frac{d^2}{dx^2} & -\nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \frac{2m_c^*}{m_o} & 0 & 0 \\ \nabla U(x, t) \frac{P}{\mathcal{E}_g} \frac{2m_v^*}{m_o} & -\varepsilon[\mathcal{E}_v + U(x) - \mathcal{E}] \frac{2m_v^*}{m_o} - \frac{d^2}{dx^2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{T}(\mathbf{x})$$

A questo punto, con le equazioni scritte nella forma matriciale appena riportata, si è in grado di applicare l'algoritmo di Runge Kutta. L'obiettivo da raggiungere si traduce ora nella ricerca di due funzioni linearmente indipendenti, che siano entrambe soluzioni del solito sistema oggetto d'indagine.

A tal scopo, per quanto concerne l'iniezione da sinistra, si impone la condizione al contorno nel punto di discontinuità in cui termina la struttura, cioè in $x = L$. Il caso speculare di iniezione da destra prevede, in modo del tutto analogo, l'imposizione della condizione al contorno in $x = 0$.

Si imponga il valore della funzione d'onda, in $x = L$, pari ad un valore noto, dato dalla condizione $\Psi(L) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e si indichi con Ψ_1 la soluzione

numerica associata. Allo stesso modo, sia Ψ_2 la soluzione numerica relativa al valore assunto dalla funzione d'onda sempre in $x = L$, con la condizione $\Psi_2(L) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Una soluzione generica può essere espressa come combinazione lineare di Ψ_1 e Ψ_2 , che si traduce matematicamente nella forma

$$\Psi = \gamma_1 \Psi_1 + \gamma_2 \Psi_2.$$

Ora, le incognite sono rappresentate da γ_1 e da γ_2 , dal momento che sia Ψ_1 quanto Ψ_2 sono entrambe di valore noto, grazie alla condizione al contorno imposta in $x = L$. Per determinarle, allora, si può sfruttare la condizione ancora disponibile relativa ad $x = 0$.

Ricordando il caso, già analizzato, riguardante l'iniezione in $x = 0$, si ottiene l'espressione seguente:

$$\Psi'(0) = \begin{pmatrix} -jk_i & 0 \\ 0 & -jk_{rv} \end{pmatrix} \cdot \Psi(0) + \begin{pmatrix} 2jk_i \\ 0 \end{pmatrix}$$

Sostituendo i valori noti, si arriva alla formulazione:

$$\begin{pmatrix} \gamma_1 \Psi'_{c,1}(0) + \gamma_2 \Psi'_{c,2}(0) \\ \gamma_1 \Psi'_{v,1}(0) + \gamma_2 \Psi'_{v,2}(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\gamma_1 jk_i \Psi_{c,1}(0) - \gamma_2 jk_i \Psi_{c,2}(0) \\ -\gamma_1 jk_{rv} \Psi_{v,1}(0) - \gamma_2 jk_{rv} \Psi_{v,2}(0) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 2jk_i \\ 0 \end{pmatrix}$$

Mettendo in evidenza le incognite, si ottiene, infine, l'espressione:

$$\begin{pmatrix} \Psi'_{c,1}(0) + jk_i \Psi_{c,1}(0) & \Psi'_{c,2}(0) + jk_i \Psi_{c,2}(0) \\ \Psi'_{v,1}(0) + jk_{rv} \Psi_{v,1}(0) & \Psi'_{v,2}(0) + jk_{rv} \Psi_{v,2}(0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_1 \\ \gamma_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2jk_i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Capitolo 6

Filtri di Spin a Tunneling

Risonante

con Effetto Rashba

In questo capitolo si propone un'analisi dettagliata del dispositivo, che si è assunto a paradigma per il filtraggio di spin, iniziando dalla descrizione dell'eterostruttura che lo costituisce, per poi passare in rassegna gli aspetti del funzionamento vero e proprio.

6.1 *Eterostruttura Asimmetrica InAs/GaSb/AlSb*

Il sistema adottato è costituito da un'eterostruttura asimmetrica realizzata con semiconduttori non-magnetici convenzionali, posti nella successione InAs/GaSb/AlSb, in cui ha luogo il fenomeno del tunneling risonante ed a cui non viene applicato alcun campo magnetico esterno. Quest'ultima precisazione intende ribadire ulteriormente la proprietà peculiare dell'eterostruttura in esame, per cui l'effetto del campo magnetico scaturisce direttamente dalla

causa interna rappresentata dal SIA e non da una sorgente applicata esterna. Sempre dal SIA dipende, come già discusso nel capitolo precedente, la scelta obbligata dell'*asimmetria* dell'eterostruttura; in caso contrario, verrebbe a mancare, infatti, la condizione stessa dell'asimmetria d'inversione.

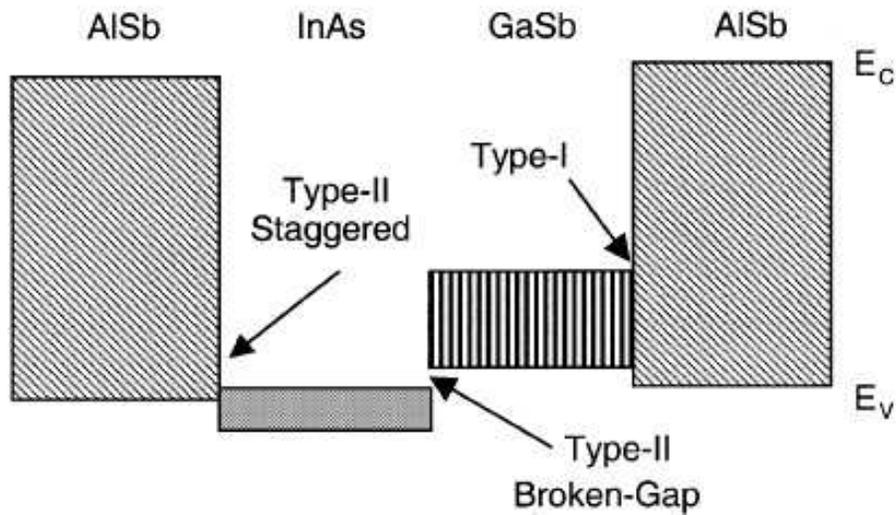


Figura 6.1: Eterostruttura asimmetrica per la realizzazione di un filtro di spin, ottenuta dalla successione di semiconduttori non-magnetici convenzionali InAs/GaSb/AISb. (Per gentile concessione di X. Cartoixà, [1].)

SCelta DEI SEMICONDUTTORI: MOTIVAZIONI DI BASE.

L'impiego di tali semiconduttori trae origine da specifiche motivazioni di ordine fisico. AISb, GaSb ed InAs appartengono alla categoria dei materiali definiti, nella letteratura di settore, *sistemi 6.1 Å*. Tra tutti i semiconduttori del gruppo III-IV, risultano quelli decisamente più adatti per la rilevazione dell'effetto Rashba, dal momento che, in primo luogo, sia nell'InAs che nel GaSb si riscontra una forte interazione spin-orbita ed inoltre per entrambi esiste la possibilità di costruire buche di potenziale altamente asimmetriche.

Questi fattori determinano, come si è avuto modo di illustrare, un pronunciato spin-splitting e, di conseguenza, la successione di semiconduttori, così come proposta, si presenta tra i migliori candidati possibili per l'implementazione di un filtro di spin ad effetto Rashba.

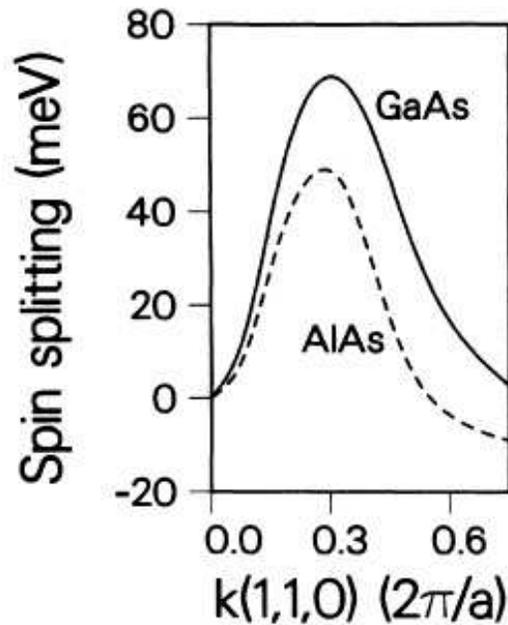


Figura 6.2: Spin splitting nella banda di conduzione di GaAs (linea a tratto continuo) ed AlAs (linea tratteggiata). L'immagine evidenzia il pronunciato spin splitting riscontrato sperimentalmente nel GaAs, che appartiene ai semiconduttori definiti *sistemi 6.1 Å*, così come AlSb, GaSb ed InAs, che costituiscono la successione nell'eterostruttura in esame. (L'immagine è tratta da [34].)

6.2 Funzionamento del Dispositivo

Il dispositivo preso in considerazione si comporta, come già anticipato, da diodo tunneling interbanda risonante, ottenuto a partire dall'eterostruttura asimmetrica a doppia barriera di potenziale, realizzata dalla successione InAs/GaSb/AlSb, con l'obiettivo precipuo di ottenere un filtro di spin, in conseguenza dello spin splitting che interviene in presenza dell'effetto Rashba.

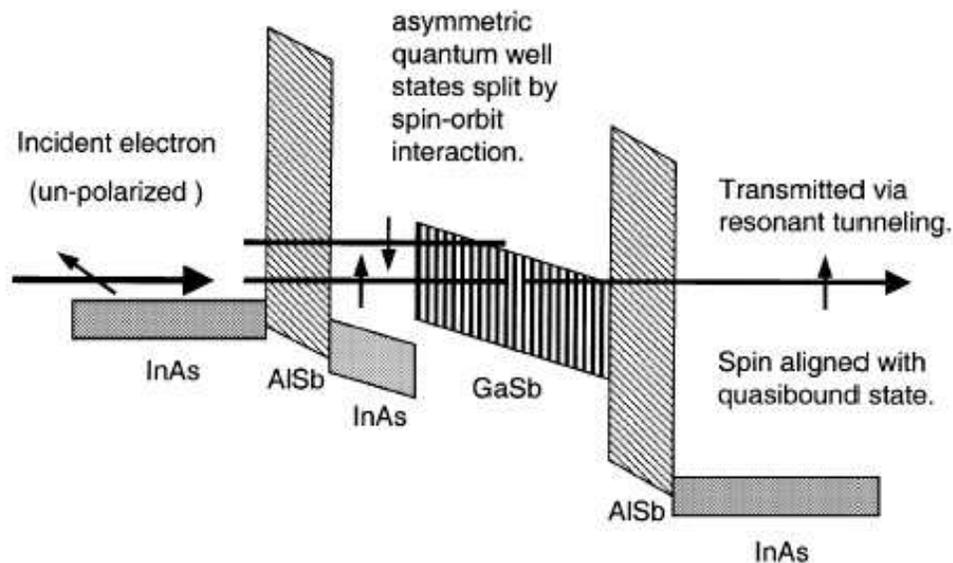


Figura 6.3: Principio di funzionamento del filtraggio di spin, in presenza di tunneling interbanda risonante. (Per gentile concessione di X. Cartoixà, [1].)

Si sono prese in considerazione tutte le caratteristiche di questo dispositivo, tranne che l'aspetto di filtraggio vero e proprio di spin, ottenuto sfruttando la proprietà del tunneling risonante.

La questione affrontata finora, infatti, può essere riassunta in questi termini. In base all'effetto Rashba, si è ottenuto come risultato lo splitting dell'elettrone in esame, che in origine appartiene alla banda di conduzione per ogni possibile livello di energia: in questa condizione, con una stessa quantità di energia si caratterizza sia lo stato di spin up che quello di spin down. La situazione si è venuta in seguito a modificare, dal momento che, per quanto concerne lo spin, con l'effetto di un campo elettromagnetico, e dunque di una perturbazione, si hanno a disposizione livelli di energia distinti: lo stesso elettrone, infatti, appartiene alla banda di conduzione spostata verso l'alto se il suo spin è up, oppure alla banda di conduzione spostata verso il basso se il suo spin è down. Questa è la situazione creata in conseguenza della rottura della degenerazione di spin.

In definitiva, la prima elaborazione compiuta sul fascio di elettroni iniettati nella struttura si esplica nello spin splitting e per ottenere ciò è sfruttato l'effetto Rashba. Per quanto riguarda l'azione di filtraggio che ne segue, si ha necessità di ricorrere al fenomeno fisico del tunneling risonante. Grazie a quest'ultimo, infatti, si è in grado di assicurarsi un coefficiente di trasmissione teoricamente unitario ed uno di riflessione nullo, così che la selezione della componente di spin desiderata può essere considerata un obiettivo raggiunto.

In questa sezione, si affronta proprio la problematica inerente il filtraggio di spin, che poi rappresenta il concetto innovativo e l'argomentazione portante di tutto il lavoro presente, mettendo in luce la dinamica effettiva che rende possibile il raggiungimento pratico di questo obiettivo.

6.3 *Indagine Quantistica del Principio di Funzionamento*

Dato il diodo tunneling in esame, si procede impostando la questione che concerne il filtraggio di spin da un punto di vista quantistico, evidenziando rigorosamente gli aspetti fisici che ne sono coinvolti.

Si ricordi l'equazione propria dell'interazione spin-orbita, vera chiave di volta del problema, esprimendola però in forma alternativa, rispetto a quella presentata nelle sezioni precedenti (3.13), riportata di seguito:

$$\mathcal{H}_{SO} = \left(\frac{\hbar}{2mc} \right) (\nabla U \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (6.1)$$

Questa espressione risulta vantaggiosa rispetto all'altra perchè più consona alla procedura matematica, che consente di rintracciare la soluzione del problema e che si appresta ad essere illustrata.

Si supponga di prendere in considerazione l'effetto prodotto esclusivamente dal SIA, trascurando, di conseguenza, la componente relativa al BIA. Con il termine U si è indicata la presenza di un potenziale esterno applicato. Sempre tra le ipotesi assunte implicitamente in questa trattazione, si inserisce quella per cui l'elettrone del modello viene ad essere studiato in una sola banda d'energia, che si suppone essere quella di conduzione. In altri termini, questo implica che la banda di valenza viene considerata come se non fosse caratterizzata dal fenomeno dello spin splitting, approssimazione semplificativa, che trae giustificazione dal fatto che è proprio nella banda di conduzione che si verifica la separazione delle componenti di spin.

Come prima considerazione, si richiama il fatto che per il momento sussiste la condizione di degenerazione di spin, dato che fino a quando non interviene esplicitamente l'effetto Rashba, nessuna informazione sullo spin può essere espressa riguardo al sistema; di conseguenza, si hanno autostati degeneri. In particolare, la funzione d'onda che risolve l'equazione agli autovalori risulta indistinguibile per quanto concerne lo spin.

Come si può immediatamente arguire, sorge un dubbio, che coinvolge la modalità con cui interviene lo spin. In altri termini, ciò che interessa è lo spin dell'elettrone, e dato che per ora non figura come parametro esplicito, occorre necessariamente studiare come esso scaturisca ed operi, per capire in seguito, cioè una volta che viene ad essere rimossa la condizione di degenerazione da parte dell'effetto Rashba, come può essere risolto il problema del filtraggio che si deve affrontare.

In soccorso però, sovviene l'idea per cui in effetti dall'esperimento di Stern-Gerlach è stato possibile individuare, matematicamente, la presenza dello spin attraverso la comparsa di un fattore numerico $\frac{1}{2}$, a parte la solita costante di proporzionalità \hbar . Infatti, come certo si ricorda, si è dedotta la relazione di quantizzazione del momento angolare di spin (2.1), generalizzata in seguito nella forma più compatta, che qui si riprende:

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}.$$

Intuitivamente, si pensa, dunque, che lo spin si manifesti anche in questo caso attraverso lo stesso fattore. Tutto ciò può essere espresso, rigorosamente, pensando la soluzione del problema come modificata di un fattore due nella sua dimensione, nel senso che risulta nella forma di un vettore, che per ora

si suppone del tipo

$$\begin{pmatrix} \Psi^+(x) \\ \Psi^-(x) \end{pmatrix}.$$

L'apice permette di individuare la funzione d'onda relativa allo spin up, per quanto riguarda il segno positivo, e lo spin down, associato al segno negativo.

Si apre qui una breve digressione, che riporta un postulato della meccanica quantistica, grazie al quale si possono giustificare le approssimazioni che tra poco saranno necessarie per proseguire nella trattazione.

Tra i postulati noti, si ricorda quello in base al quale, per ogni particella appartenente ad un dato sistema fisico esiste una funzione di stato associata, $\Psi(x, t)$, a partire dalla conoscenza della quale è lecito rintracciare tutte le informazioni sulla particella in esame.

Si riporta, però, anche un altro postulato, che qui interessa particolarmente, di cui segue l'enunciato.

Per ogni variabile dinamica classica esiste un operatore quantistico associato. Applicando quest'ultimo alla funzione di stato $\Psi(x, t)$, è possibile ricavare il valore della variabile dinamica associata.

Nella tabella proposta, si riassumono in breve le corrispondenze tra le principali variabili dinamiche ed i relativi operatori quantistici. Interessa in particolar modo notare l'ultima riga della tabella, in cui compare l'operatore quantità di moto, e tener presente come, a meno di un fattore moltiplicati-

vo, esso agisca in termini di derivata parziale rispetto alla coordinata della posizione.

VARIABILE DINAMICA	OPERATORE QUANTISTICO
posizione x	$\hat{x} = x$
energia totale \mathcal{E}	$\hat{\mathcal{E}} = -\frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial t}$
energia potenziale V	$\hat{V} = V(x)$
quantità di moto p	$\hat{p} = \frac{\hbar}{j} \frac{\partial}{\partial x}$

Tabella 6.1: Corrispondenze principali tra variabili dinamiche ed operatori quantistici.

Alla luce di quanto appena visto, si torni ora a studiare l'equazione d'interazione spin-orbita.

Se il problema fosse esclusivamente dovuto al moto dell'elettrone nello spazio libero, cioè fosse riferito solo al moto orbitale, allora si dovrebbe affrontare l'equazione data da:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + U \right) \Psi = \mathcal{E} \Psi. \quad (6.2)$$

La soluzione viene fornita dalla funzione d'onda, $\Psi(x, y, z)$, definita come

$$\Psi(x, y, z) : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R},$$

esprimibile nella forma

$$\Psi(x, y, z) = \varphi(z) e^{jk_x x} e^{jk_y y},$$

con $k = \sqrt{E}$.

Supponendo, ora, che la stessa struttura sia capace di rilevare anche la presenza dello spin, pur tenendo presente il fattore due che interviene a modificare la dimensione della soluzione, si giunge come conseguenza immediata

alla equazione di seguito riportata

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + U \right) \Psi^\pm(x) = \mathcal{E} \Psi^\pm(x). \quad (6.3)$$

Esprimendo tale equazione in forma matriciale, si ottiene

$$\begin{pmatrix} \frac{d^2}{dx^2} + U & 0 \\ 0 & \frac{d^2}{dx^2} + U \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Psi^+(x) \\ \Psi^-(x) \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} \Psi^+(x) \\ \Psi^-(x) \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

Osservando la matrice, si deduce una proprietà di fondamentale rilevanza: i termini non nulli sono soltanto quelli che appartengono alla diagonale principale; dunque, non compaiono quelli misti, legati cioè alla intercorrelazione.

Quest'aspetto si ripercuote in modo pesante sullo sviluppo del problema dello spin: infatti, dato che non si riscontra alcuna componente riferita all'interazione, si può concludere che ciascuno dei due spin può essere trattato in modo indipendente rispetto all'altro, ossia il problema può essere impostato come un sistema di due equazioni, ciascuna in un'incognita, ma soprattutto scorrelata l'una dall'altra.

In definitiva, si ottiene:

$$\begin{cases} \mathcal{H} \Psi_1 = \mathcal{E} \Psi_1, \\ \mathcal{H} \Psi_2 = \mathcal{E} \Psi_2. \end{cases}$$

Al momento in cui interviene lo spin, la soluzione diventa esprimibile come un vettore, cioè si passa ad uno spazio $\in \mathbb{C}^2$, in cui la base è rappresentata dai ket $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Sviluppando la funzione d'onda in termini della base χ , si ottiene

$$\Psi_\chi = \Psi \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \Psi \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Si passa ad analizzare, da un punto di vista strutturale, l'eterostruttura alla base del dispositivo e la si ipotizza scomponibile in una successione di piani omogenei, rispetto alle coordinate x ed y del sistema di riferimento all'interno del quale la si considera, così che l'unica variazione è ammessa lungo l'asse z .

In linea con l'assunzione appena proposta, si considerano separatamente anche le componenti dell'operatore quantità di moto, che viene così interpretato non come un "unicum", bensì come somma di un termine parallelo e di uno ortogonale rispetto alla struttura stessa.

Interpretando intuitivamente questi termini, si può concludere che la componente parallela rende conto del moto dell'elettrone¹ pensato come entrante nella struttura, mentre quella ortogonale può essere vista come relativa al moto dell'elettrone che si muove nel piano.

$$\begin{cases} p_x = \hbar k_x, \\ p_y = \hbar k_y. \end{cases}$$

Da quanto appena proposto, segue che l'operatore quantità di moto agisce sul vettore d'onda nel senso di moltiplicarlo per la solita costante di Planck normalizzata.

In definitiva, l'operatore quantità di moto risulta esprimibile nella seguente forma:

$$\mathbf{p} = p_x + p_y + p_z = -j \hbar \frac{d}{dz} \vec{z} + \hbar k_x \vec{x} + \hbar k_y \vec{y}. \quad (6.5)$$

¹Dalla definizione stessa, si evince che la quantità di moto dell'elettrone in esame esprime la sua velocità, ovviamente a meno della massa, che però in un contesto non relativistico, come quello in cui si opera in questa sede, può tranquillamente essere supposta costante.

Si introduce, a questo punto, un'ipotesi connessa con la scelta della direzione preferenziale, lungo la quale si intende misurare l'elettrone. Per quanto discusso a proposito dell'esperimento di Stern-Gerlach, si ricorda che la quantizzazione dello spin viene riferita alla direzione z . Nel caso che si appresta ad essere presentato, invece, si decide di assumere come direzione privilegiata una delle due lungo cui si definiscono i piani omogenei paralleli, piuttosto che la direzione z , che qui indica la variazione della struttura.

Si supponga che y sia proprio la direzione fissata, rispetto a cui si effettuano le misure di spin; ma allora k_y è un dato iniziale del problema.

Dato che k_y rientra tra i dati iniziali e dato che non si sono posti particolari vincoli a suo riguardo, allora si ha la libertà di esaminare il caso specifico di $k_y = 0$.

Sotto queste condizioni, si arriva alla equazione riportata di seguito, sempre relativa all'Hamiltoniana di spin-orbita.

$$\mathcal{H}_{SO} = \mathcal{E} k_x \sigma_y \quad (6.6)$$

L'Hamiltoniana totale risulta costituita da due termini: uno relativo al moto dell'elettrone, senza il parametro di spin; l'altro, inerente esclusivamente all'interazione spin-orbita.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{SO} \quad (6.7)$$

dove, con \mathcal{H}_0 , si intende la relazione già espressa dalle equazioni (6.3)-(6.4).

Riscrivendo la stessa equazione, in forma matriciale, si ha

$$\begin{pmatrix} \frac{d^2}{dx^2} + U + k & 0 \\ 0 & \frac{d^2}{dx^2} + U + k \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} \Psi_+ \\ \Psi_- \end{pmatrix}. \quad (6.8)$$

APPLICAZIONE DELLA TEORIA PERTURBATIVA. Si ricorre alla teoria perturbativa, non perchè sia necessaria alla determinazione della soluzione, bensì perchè rappresenta una metodologia nota ed utile, qui, a fornire una giustificazione teorica a quanto presentato.

La prima ipotesi del metodo da dover soddisfare prevede che l'Hamiltoniana totale del sistema sia esprimibile in una forma data dalla somma del termine imperturbato e di uno dato dalla perturbazione vera e propria.

L'Hamiltoniana imperturbata descrive il moto della particella libera, cioè nel caso in cui non si tiene in conto dello spin, mentre la perturbazione viene fornita dalla Hamiltoniana dell'effetto spin-orbita. Il termine perturbativo, del resto, soddisfa pienamente all'ipotesi per cui lo spin-splitting risulta piccolo rispetto al termine imperturbato.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \varepsilon \mathcal{H}_{SO} \quad (6.9)$$

Il parametro ε risulta proporzionale al campo elettrico e può essere utile interpretarlo come un termine gestibile dall'esterno, cioè che può assumere un valore impostabile.

Se ε è nullo, allora si è in presenza di degenerazione.

Se $\varepsilon \neq 0$, allora l'autovalore cambia e si rompe la condizione di degenerazione di spin, dando luogo a due distinti valori di energia, con split pari a $\Delta(\varepsilon)$, esprimibili dal sistema

$$\begin{cases} \mathcal{E}(k) + \Delta(\varepsilon) + o(\varepsilon^2); \\ \mathcal{E}(k) - \Delta(\varepsilon) + o(\varepsilon^2). \end{cases} \quad (6.10)$$

Lo split $\Delta(\varepsilon)$ può essere interpretato come il valore di aspettazione

$$\Delta^\pm = \langle \chi^\pm | \mathcal{H}_{SO} | \chi^\pm \rangle$$

con

$$\begin{cases} \Delta^+ = +\varepsilon; \\ \Delta^- = -\varepsilon. \end{cases}$$

Concludendo, si è dimostrato, in modo qualitativo, come la struttura in esame, con tutte le caratteristiche ipotizzate, sia soggetta ad uno splitting di energia per quanto concerne la banda di conduzione, che subisce un incremento ed un decremento, relativo allo spin, che autorizza poi al filtraggio della componente desiderata.

6.4 *Equazioni Finali del Modello*

In questa sezione si riportano le equazioni finali a cui si è giunti nella ricerca di un modello in grado di studiare l'effetto Rashba, per il caso specifico del diodo tunneling risonante interbanda che si assume come oggetto specifico d'indagine, e di riprodurre quanto ipotizzato in sede teorica in merito all'azione effettiva di filtraggio di spin.

A tal scopo, si ricorre al modello generale definito dall'acronimo **MEF** (Multiband Envelope Function model), impiegato nella simulazione del fenomeno del trasporto quantistico in dispositivi ad effetto tunnel risonante, in particolare proposto in [29].

Quello proposto appartiene alla categoria dei modelli multibanda, che risultano particolarmente adatti a descrivere il meccanismo di tunneling tra la banda di conduzione e quella di valenza.

Per quanto concerne la trattazione esaustiva della metodologia, si rimanda all'articolo precedentemente citato. Nel caso specifico, relativo a questa tesi, interessa mettere in luce la possibilità di applicarne i risultati al diodo in esame, che rientra a pieno titolo nella casistica contemplata dal modello, dato

che è un dispositivo che opera in condizioni di tunneling risonante interbanda.

6.4.1 *Approssimazioni ed Ipotesi*

Per poter trattare l'effetto Rashba con il MEF, sono necessarie alcune approssimazioni, tra cui quella di massa efficace (**EMA**), basata sul formalismo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ del modello di Kane, che permette di calcolare la struttura a bande dell'eterostruttura in esame. In base alla EMA, le funzioni d'onda vere e proprie sono approssimate dalle funzioni d'involuppo, dato che queste ultime rappresentano le corrette probabilità di conduzione e di valenza mediate sul passo reticolare del semiconduttore che costituisce l'eterostruttura di base.

Tra le ipotesi semplificative assunte, è d'obbligo riportare le seguenti:

- *il fenomeno dello spin-splitting è considerato presente esclusivamente in banda di conduzione.*

Questo significa non tenere conto della banda di valenza ai fini della separazione dello spin. Tutto ciò, del resto, trae giustificazione dal fatto che il MEF di per sé non contempla la presenza dello spin.

- *l'interazione spin-orbita non accoppia le due bande di conduzione, che si distinguono tra loro in base allo spin.*

Da ciò scaturisce immediatamente che l'effetto rimane presente solo nei termini che figurano sulla diagonale principale dell'Hamiltoniana in forma matriciale. Si riscontra, come conseguenza immediata, che il modello approssimato del MEF a quattro bande, (valenza e conduzione, ciascuna raddoppiata dalla presenza dello spin), viene approssimato con due modelli MEF distinti, ciascuno a due bande (conduzione e valenza), che tengono conto dello spin separatamente (uno per lo spin up

ed uno per lo spin down).

6.4.2 Sistema di Equazioni

La derivazione del modello, in sintesi, può essere basata direttamente sull'impianto delle equazioni stazionarie (5.10), tenendo presenti tutte le considerazioni effettuate in 6.3.

In particolare, l'equazione di conduzione assume la forma seguente:

$$\mathcal{E} \Psi_c(z) = \mathcal{E}_c \Psi_c(z) - \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} \Psi_c(z) + U(z) \Psi_c(z) - j \nabla U(z) \frac{\hbar P}{m \mathcal{E}_g} \Psi_v(z), \quad (6.11)$$

dove si è posto

$$\mathcal{E} = \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} + \mathcal{E}(p),$$

con p momento incidente lungo l'asse z , che è la direzione scelta.

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathcal{E}(p)\varphi^+(z) = \left(\mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \right) \varphi^+(z) - \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} \varphi^+(z) + U(z)\varphi^+(z) + \\ \quad + \left[|k_{\parallel}| \frac{\hbar^2}{(2mc)^2} \frac{dU}{dz} \right] \varphi^+(z) - j \frac{dU}{dz} \frac{\hbar P}{m \mathcal{E}_g} \varphi_v(z), \\ \mathcal{E}(p)\varphi^-(z) = \left(\mathcal{E}_c + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \right) \varphi^-(z) - \frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} \varphi^-(z) + U(z)\varphi^-(z) + \\ \quad + \left[|k_{\parallel}| \frac{\hbar^2}{(2mc)^2} \frac{dU}{dz} \right] \varphi^-(z) - j \frac{dU}{dz} \frac{\hbar P}{m \mathcal{E}_g} \varphi_v(z). \end{array} \right. \quad (6.12)$$

Capitolo 7

Discussione dei Risultati

La trattazione svolta finora ha permesso di inquadrare la problematica connessa con l'effetto Rashba da un punto di vista strettamente fisico e di presentare l'indagine specifica sull'eterostruttura asimmetrica a doppia barriera di potenziale, realizzata a partire dalla successione InAs/GaSb/AlSb, che implementa il fenomeno del tunneling risonante, sfruttando quello di Rashba per ottenere un filtraggio di spin. Adesso è giunto il momento di illustrare, graficamente, i risultati effettivamente ottenuti. Tutto questo per mostrare il riscontro sperimentale, che si potuto affiancare all'analisi teorica, e per confermare i comportamenti di filtraggio, che per adesso possono apparire solo ipotizzati.

I grafici che vengono riportati nelle sezioni seguenti sono stati conseguiti in ambiente MATLAB (versione 6.5).

7.1 *Diagramma a Bande dell'Eterostruttura*

L'eterostruttura asimmetrica presa in esame è costituita, come già noto, da una successione di InAs/GaSb/AlSb e presenta una doppia barriera di potenziale. Queste caratteristiche, finora presentate in via teorica, sono qui riassunte graficamente nel diagramma proposto di seguito, che evidenzia sia il profilo in banda di valenza quanto quello in banda di conduzione.

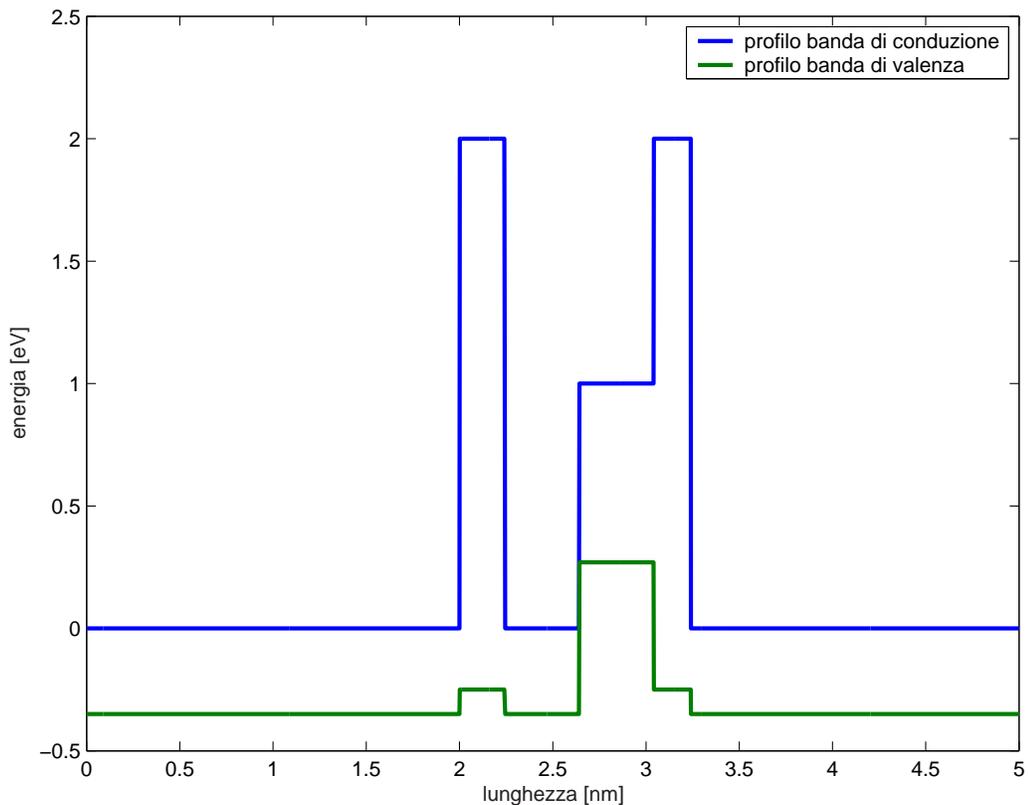


Figura 7.1: Diagramma a bande dell'eterostruttura. Si è simulato sia il profilo della banda di conduzione, sia quello della banda di valenza.

Dall'andamento del profilo delle bande, sia di conduzione che di valenza, si deduce immediatamente che il caso in esame non prevede alcuna polariz-

zazione esterna: non si riscontra, infatti, nessuna incurvatura dei profili.

7.2 *Caso Iniziale: Assenza di Risonanza*

Si considera adesso la simulazione relativa alla condizione che si viene a creare quando si inizia ad iniettare elettroni contro l'eterostruttura in esame. Il caso può essere direttamente ricondotto a quello trattato analiticamente nella sezione 5.2, con particolare riferimento all'iniezione di portatori di carica da sinistra.

Nel diagramma a bande dell'eterostruttura, è stato riportata anche l'energia che viene fornita agli elettroni iniettati nel dispositivo, nonché il modulo quadro della funzione d'onda in banda di conduzione. Si rispetta, infatti, l'ipotesi assunta in sede teorica, in base alla quale si ha iniezione di elettroni esclusivamente in banda di conduzione.

Nei grafici presentati, si riporta sia la componente della funzione d'onda in banda di conduzione (7.2), sia quella in banda di valenza (7.3).

Il meccanismo fisico che si evidenzia, per il momento, conferma quanto ipotizzato in sede teorica: per valori di energia nettamente inferiori a quello corrispondente al primo stato di risonanza la banda di valenza non viene eccitata e, di conseguenza, non permette alcun passaggio di elettroni oltre la doppia barriera che rappresenta l'eterostruttura. Questo, nel grafico, è rappresentato dall'assenza della funzione d'onda $|\Psi|^2$ nella parte destra, cioè oltre l'eterostruttura. Il suo valore, infatti, non si discosta da quello nullo.

Ciò che si riscontra, pertanto, è la normale incidenza degli elettroni iniettati, che si scontrano con la prima barriera ed in seguito vengono da essa

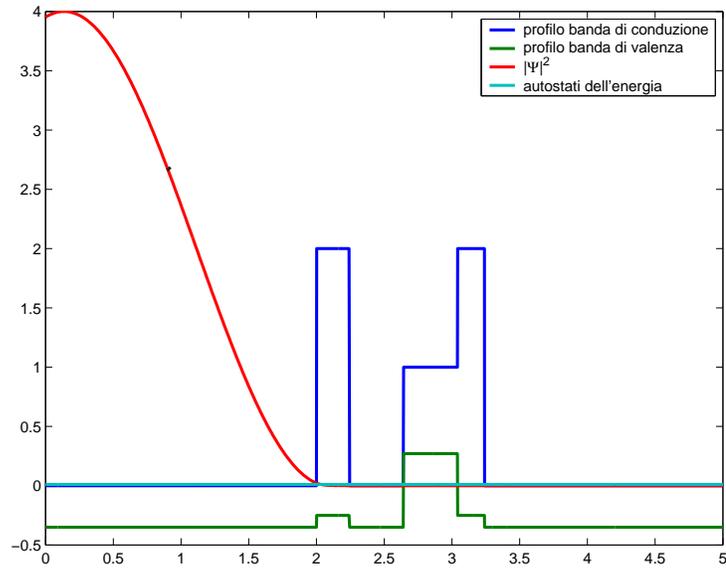


Figura 7.2: Funzione d'onda di conduzione relativa agli spin up.

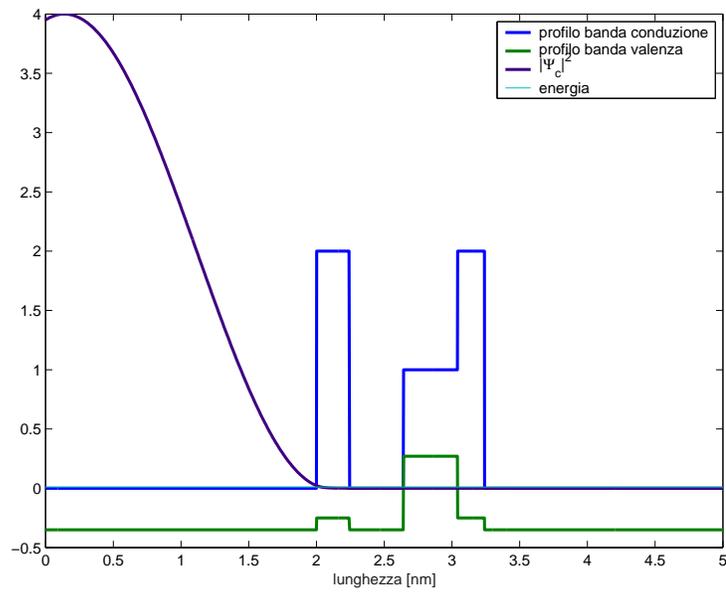


Figura 7.3: Funzione d'onda di conduzione relativa agli spin down.

riflessi, testimoniata dal tipico andamento sinusoidale della funzione d'onda a sinistra dell'eterostruttura.

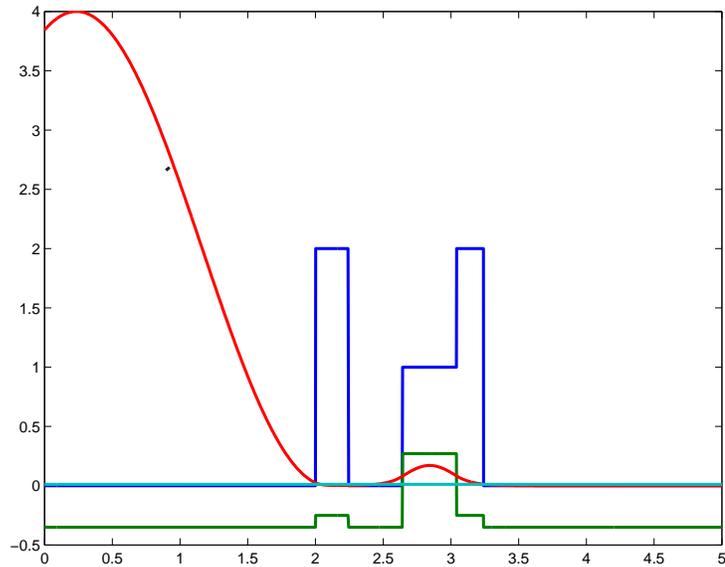


Figura 7.4: Funzione d'onda: evoluzione verso la risonanza (spin up).

Per quanto concerne gli elettroni dotati di spin down, il caso è, fino a questo momento, identico. Infatti, il grafico non risulta sensibilmente mutato da quello relativo agli elettroni dotati di spin up. L'interpretazione fisica collima, dato che gli elettroni che vengono iniettati non sono distinguibili in base allo spin: in assenza di effetto Rashba si ha totale degenerazione di spin.

Incrementando il valore dell'energia posseduta dagli elettroni incidenti, la situazione precedente inizia ad evolvere, dal momento che si riscontra la presenza della funzione d'onda di conduzione anche all'interno della buca di potenziale. L'altezza della gaussiana aumenta proporzionalmente all'energia fornita.

Lo stesso procedimento viene ripetuto per gli elettroni dotati di spin down. Il valore dell'energia fornito, di conseguenza, viene anche qui incrementato della stessa quantità, ma si riscontra una differenza sostanziale. In

questo contesto, infatti, non si rintraccia alcun cenno di gaussianiana all'interno della buca di potenziale, traccia del fatto che, per gli elettroni dotati di spin down, non esiste alcuna possibilità di transito oltre l'eterostruttura. La combinazione dell'effetto Rashba e del tunneling risonante, che fornisce, come risultato finale, l'azione di filtraggio di spin ipotizzata, riguarda esclusivamente gli elettroni con spin up. Sono questi, in definitiva, quelli che, in condizione di risonanza, saranno "autorizzati" ad attraversare la barriera. Graficamente, si nota come, a destra dell'eterostruttura, la funzione d'onda rimane comunque nulla, anche se il livello degli autostati dell'energia se ne discosta visibilmente.

7.2.1 Caso Risonante

La situazione illustrata nella sezione precedente muta radicalmente quando si raggiunge la condizione di risonanza. In questo contesto, la situazione che

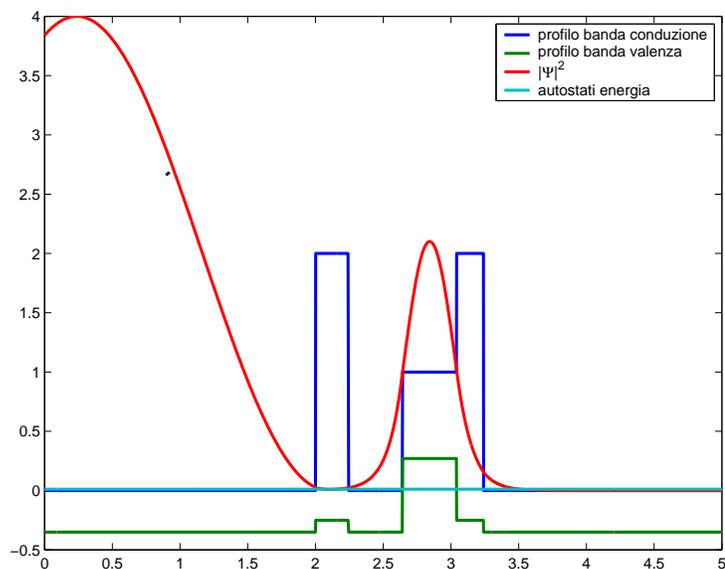


Figura 7.5: Funzione d'onda di conduzione in risonanza (spin up).

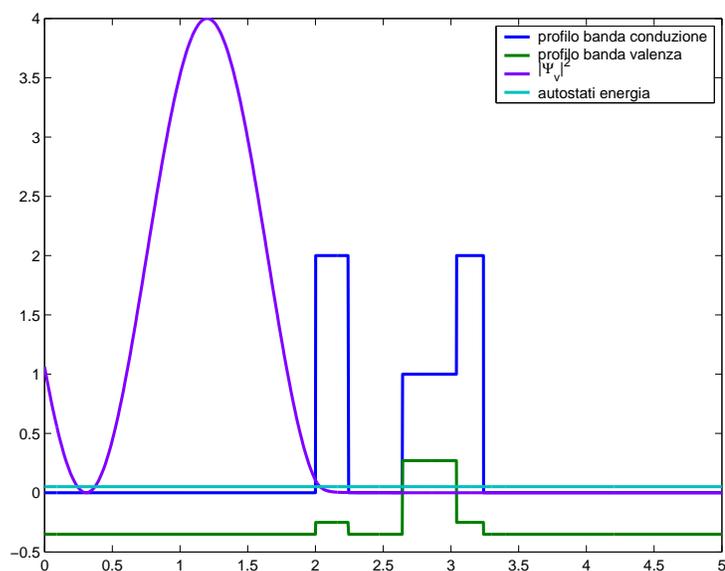


Figura 7.6: Funzione d'onda di conduzione relativa al valore di energia risonante (spin down). Si noti come non esista alcuna gaussiana all'interno della buca di potenziale.

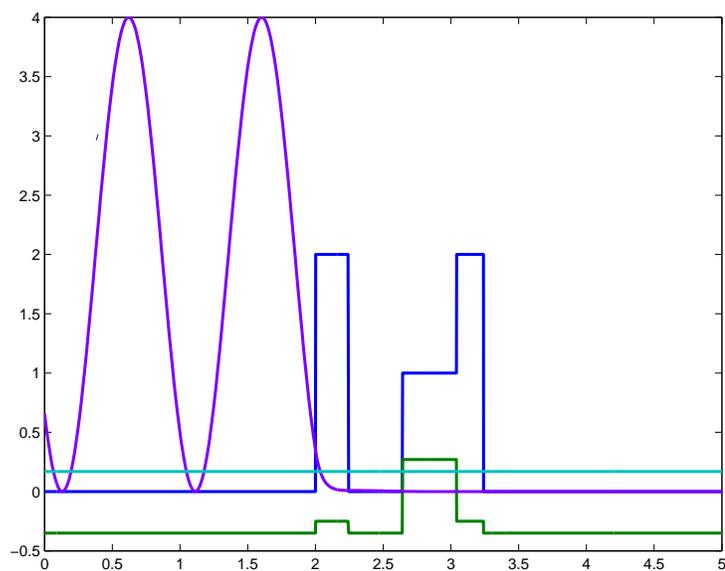


Figura 7.7: Funzione d'onda di conduzione relativo allo spin down (per alti valori dell'energia).

si crea è quella rappresentata dal grafico seguente, in cui si riporta la stessa eterostruttura, sottoposta ad un'energia esterna di valore confrontabile con quello del primo stato risonante. L'andamento della funzione d'onda in banda di conduzione, rappresentato dal tratto di colore rosso, risulta tipicamente gaussiano all'interno della buca di potenziale, laddove la situazione innescata dal raggiungimento del primo stato di risonanza viene ad essere descritta, qualitativamente, come segue.

Quando gli autostati dell'energia, corrispondenti agli elettroni iniettati, raggiungono un valore prossimo a quello dello stato risonante, allora gli stessi elettroni possono attraversare l'eterostruttura. Questa situazione favorevole è resa possibile dal fatto che vengono soddisfatte entrambe le condizioni necessarie, date dal valore dell'energia, che pur dovendo rimanere inferiore

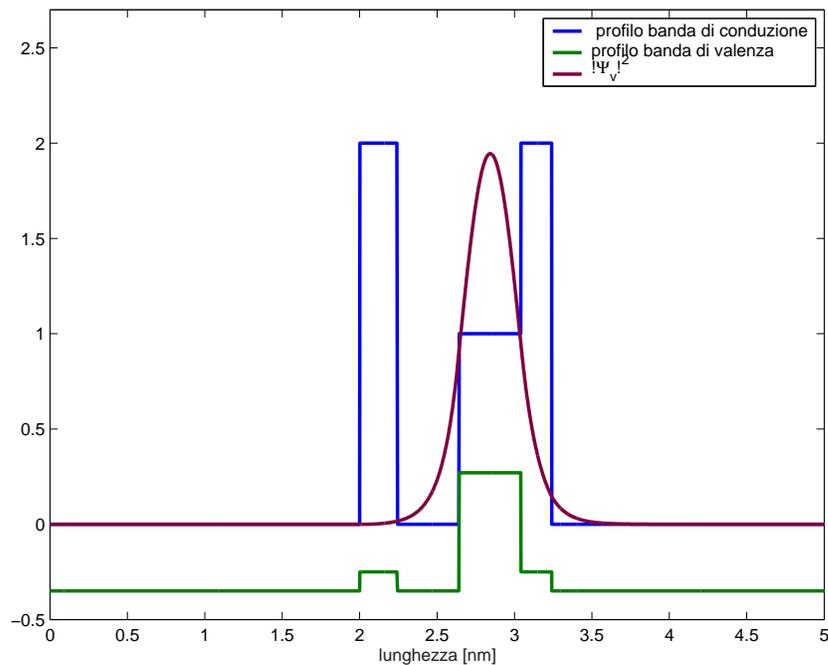


Figura 7.8: Componente di valenza della funzione d'onda relativa all'energia di risonanza (stato di ponte).

rispetto al profilo di valenza, diventa circa pari a quello di risonanza, e dagli autostati risonanti di valenza, che, essendo eccitati, permettono il passaggio degli elettroni, svolgendo il ruolo di *stati ponte* (vedi fig.7.8) [27].

7.3 *Diagramma del Coefficiente di Trasmissione*

Si riporta, con il diagramma seguente, la rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione, che costituisce un parametro importante per la valutazione finale dell'effettiva bontà del filtro in esame.

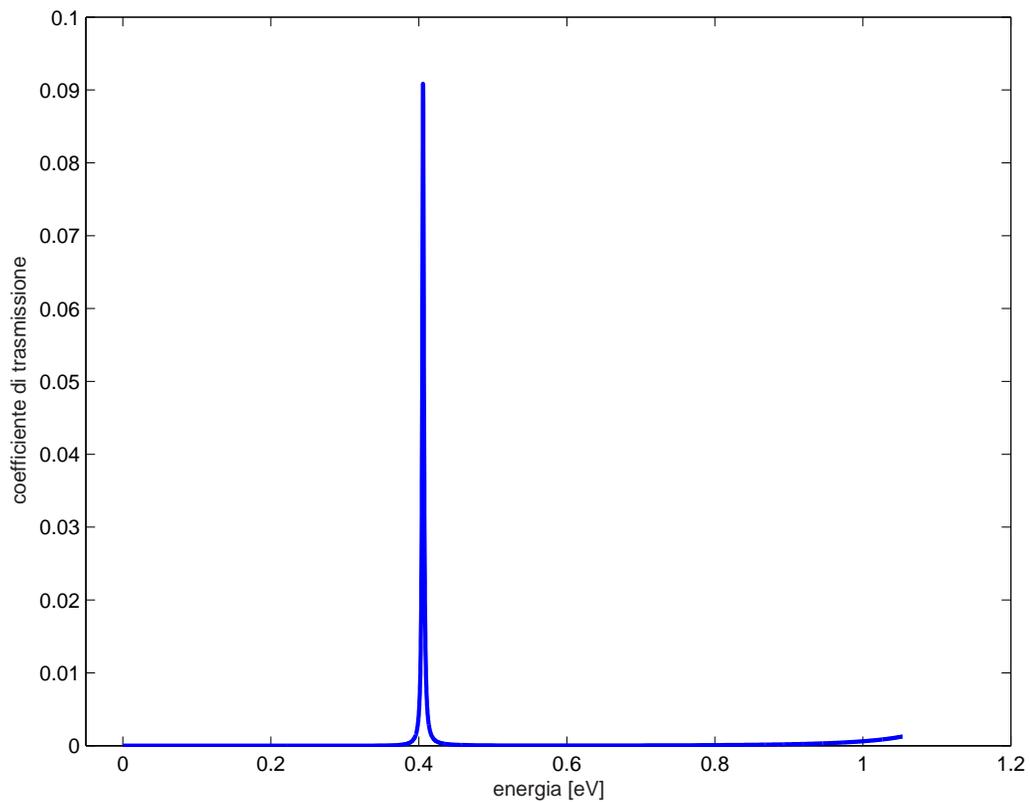


Figura 7.9: Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.

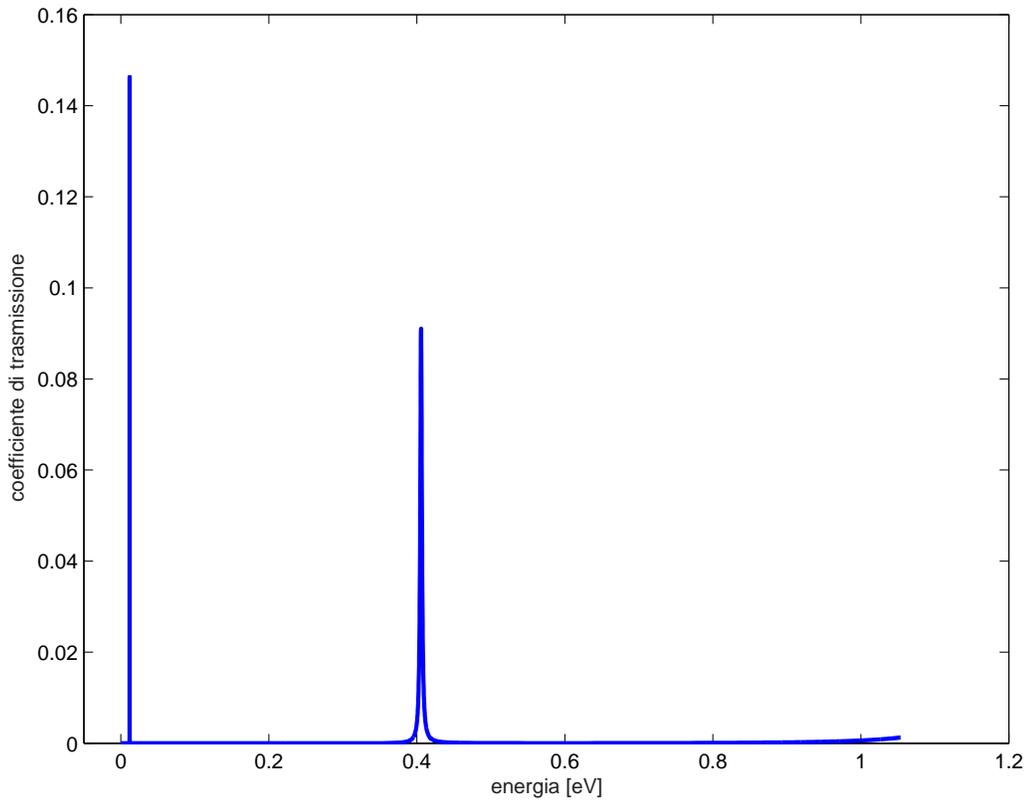


Figura 7.10: Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.

Si può evincere un andamento pressoché nullo ovunque, specie prima della condizione di risonanza, quando non si riscontra alcun accumulo significativo di elettroni oltre la barriera. In condizione di risonanza, invece, si ha un picco significativo, indice dell'effettivo passaggio degli elettroni oltre l'eterostruttura. Il valore massimo riscontrato si attesta intorno ad una percentuale pari al 15 del valore totale. Tale risultato può apparire, ad una prima analisi, non molto promettente. In realtà, il riscontro ricevuto dall'implementazione numerica risulta confortante, se inquadrato in un'ottica più generale. Quest'asserzione è basata sulle seguenti considerazioni.

- *Cancellazione tra le due sottobande contraddistinte dallo spin.*

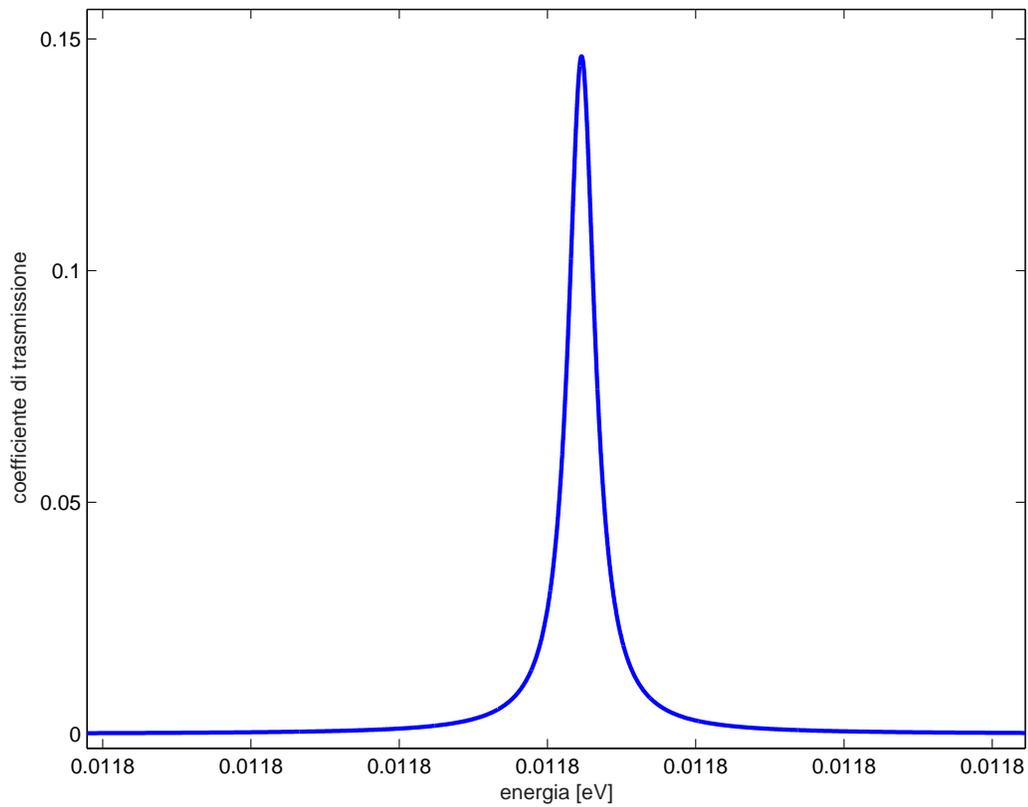


Figura 7.11: Rappresentazione grafica del coefficiente di trasmissione.

Esistono, infatti, delle componenti, caratterizzate da spin opposti, che si annullano a vicenda in una sorta di interazione distruttiva, non contribuendo, di conseguenza, al risultato finale del calcolo del coefficiente di trasmissione.

- *Cancellazione all'interno della stessa sottobanda.*

Occorre tener presente, inoltre, il fenomeno interbanda.

- *Problemi di natura numerica.*

Quest'aspetto presenta una duplice valenza, in quanto, sebbene da una parte esistano indubbi dettagli da perfezionare, al fine di migliorare il risultato finale, tuttavia si ha un riscontro palese sulla validità del

comportamento ipotizzato. In definitiva, pertanto, si può concludere che il filtro si comporta davvero come tale.

Conclusioni e sviluppi futuri

In sintesi, l'intento di questa tesi è stato raggiunto per quanto concerne la presentazione degli argomenti coinvolti nell'attuale ricerca in ambito di spintronics, con particolare attenzione alle problematiche connesse con la realizzazione di dispositivi basati fondamentalmente sullo spin mediante l'impiego di eterostrutture a semiconduttore.

In particolare, si è focalizzata l'attenzione sull'analisi fisico-matematica di un diodo tunneling interbanda risonante, costituito a partire da un'eterostruttura asimmetrica a doppia barriera di potenziale, realizzata mediante la successione InAs/GaSb/AlSb, con l'obiettivo precipuo di ottenere, come dispositivo circuitale, un filtro di spin.

A tal proposito, ha assunto notevole importanza lo studio del modello di Rashba, con conseguente interpretazione dell'equazione che ne è alla base, nell'ottica di una possibile implementazione prettamente ingegneristica.

È stato individuato, così come trattato dettagliatamente nella sezione § 3.8.3, un termine di asimmetria d'inversione strutturale (SIA), direttamente riconducibile all'effetto Rashba, che trae origine dall'asimmetria nel potenziale di confine e che si manifesta attraverso la natura di un campo elettrico. Quest'aspetto desta, come si può immediatamente intuire, il più vivo interesse nella ricerca degli ultimissimi anni, per non dire mesi, dal momento che risulta interpretabile come un controllo di gate, pensato all'interno di un

transistor ad effetto di spin, che viene intravisto come un possibile candidato alla successione degli attuali, come, ad esempio, quelli ad effetto di campo.

Il raggiungimento di un obiettivo di tale portata prevede tempi ancora difficilmente quantificabili. La ricerca teorica che si sta sviluppando intorno a tali tematiche, comunque, conduce a risultati altamente promettenti, testimoniati da una crescente attenzione rivolta a questa tipologia di elettronica, anche se, per il momento, la maggior parte delle risorse vengono investite nell'ambito di dispositivi implementati a partire da materiali ferromagnetici, piuttosto che semiconduttori. A tal proposito, esistono studi documentati condotti, ad esempio, da MOTOROLA¹.

Con riferimento esplicito alla tecnologia basata su semiconduttori, che è coinvolta in questa sede, occorre precisare che, a fronte delle indubbe prerogative, vantaggiose e certamente allettanti, si devono riportare le inevitabili problematiche ad esse connesse. Non si deve innanzitutto dimenticare la difficoltà sostanziale nel dover trattare fenomeni fisici spiegabili soltanto grazie alla meccanica quantistica, che implica l'abbandono dell'approccio classico. Superata la fase teorica, occorre far fronte a quella prettamente di laboratorio, laddove si riscontrano problemi che non sono previsti dai modelli attualmente a disposizione e che si ripercuotono sulla effettiva realizzabilità dei dispositivi.

¹IEEE International Solid State Circuits Conference (February 2001) on <http://www.motorola.com>

Grazie alla disponibilità accordata personalmente da X. Cartoixà, autore di [1] e [2], si è in grado di riferire direttamente sulle ricerche che si stanno conducendo presso i laboratori del Caltech (California Institute of Technology) di Pasadena. In base a quest'ultime, si possono rintracciare problematiche legate soprattutto alla questione della dispersione o meno degli elettroni nella buca di potenziale. In altri termini, il modello di base prevede una trattazione balistica degli elettroni; il punto cruciale, dunque, consiste nella comprensione dell'influenza dovuta agli urti, che inevitabilmente accadono.

I possibili sviluppi futuri, che si stanno così delineando, prevedono di proseguire nell'indagine teorica, al fine di raffinare e perfezionare gli strumenti d'analisi dei problemi fisici che si presentano in sede applicativa, per intraprendere, in definitiva, un percorso sperimentale che possa condurre all'implementazione di dispositivi effettivamente riproducibili su larga scala e, di conseguenza, commercializzabili.

Parte III

Appendici

7.4 Appendice A

Notazione

- h costante di Planck;
- $\hbar = h/2\pi$ costante di Planck normalizzata;
- q carica di una generica particella;
- e carica dell'elettrone;
- m_q massa di una particella carica q ;
- m_e massa dell'elettrone;
- m^* massa efficace dell'elettrone;
- \mathbf{r} raggio vettore;
- \mathbf{v} velocità;
- \mathbf{p} quantità di moto;
- c velocità della luce nel vuoto;
- \mathbf{S} momento angolare di spin;
- \mathbf{L} momento angolare orbitale;
- \mathbf{J} momento angolare totale;
- $\boldsymbol{\mu}$ momento angolare magnetico;
- $\boldsymbol{\sigma}$ matrici di Pauli;
- β magnetone di Bohr;

- α_R coefficiente di Rashba;
- n numero quantico principale;
- m numero quantico magnetico;
- l numero quantico orbitale;
- \mathbf{E} campo elettrico;
- \mathbf{B} campo magnetico;
- \mathbf{F} forza;
- V potenziale;
- \mathcal{E} energia;
- \mathcal{H} Hamiltoniana.

7.5 Appendice B

Relazioni fondamentali

- *MOMENTO ANGOLARE ORBITALE*

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

- *MOMENTO ANGOLARE TOTALE*

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} + \mathbf{L}$$

- *MOMENTO ANGOLARE MAGNETICO*

$$\left\{ \begin{array}{l} \boldsymbol{\mu}_L = \frac{e}{2mc} \mathbf{L} \\ \boldsymbol{\mu}_S = \frac{e}{mc} \mathbf{S} \end{array} \right.$$

- *MAGNETONE DI BOHR*

$$\beta = \frac{e\hbar}{2mc}$$

- *QUANTIZZAZIONE DEL MOMENTO ANGOLARE DI SPIN*

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$$

- *INTERAZIONE SPIN-ORBITA*

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{e^2}{m^2 c^2 r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$$

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m^2 c^2} \left((\nabla V) \mathbf{r} \times \mathbf{p} \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (7.1)$$

- *EFFETTO ZEEMAN*

$$\mathcal{E}_{nlm} = -\frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} - \frac{meh}{2m_e c} B$$

- *EFFETTO RASHBA*

$$\mathcal{H}_{\text{SO}} = \alpha_R [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}] \cdot \mathbf{z}$$

Parte IV

Bibliografia

Bibliografia

- [1] D. Z.-Y. Ting, X. Cartoixà, D. H. Chow, J. S. Moon, D. L. Smith, T. C. McGill, J. N. Schulman, *Rashba Effect Resonant Tunneling Spin Filters*, PROCEEDINGS OF THE IEEE, vol. 91, n. 5, (May 2003).
- [2] X. Cartoixà Soler, *Theoretical Methods for Spintronics in Semiconductors with Applications*, Thesis for Ph. D., California Institute of Technology, Pasadena, California, (2003).
- [3] S. A. Wolf, D. Treger, *Spintronics: A New Paradigm for Electronics for the New Millenium*, IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS vol. 32, n. 5, (September 2000).
- [4] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman *et al.* , *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*, Science **294** 5546 (2001).
- [5] M. A. Morrison, T. L. Estle, N.F. Lane, *Quantum States of Atoms, Molecules, and Solids*, New Jersey, Prentice-Hall (1976).
- [6] G. Zorpette, *The Quest for the Spin Transistor*, IEEE SPECTRUM (December 2001).
- [7] O. Stern, W. Gerlach, Z. Physik **7**, 249 (1921);
O. Stern, W. Gerlach, Z. Physik **8**, 110 (1922);

- O. Stern, W. Gerlach, *Z. Physik* **9**, 349 (1922);
O. Stern, W. Gerlach, *Ann. Physik* **74**, 673 (1924).
- [8] J. J. Sakurai, *Meccanica Quantistica Moderna*, Bologna, Zanichelli, (1996).
- [9] G. Kane, *Il Giardino delle Particelle*, Longanesi (1997).
- [10] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, Kluwer Academic Plenum Publishers, (1994).
- [11] J. Chahoud, *Meccanica Quantistica- Nascita e Sviluppo-*, Bologna, Pitagora Editrice, (1987).
- [12] G. Dresselhaus, *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*, *Phy. Rev.* **100**, 580, (1955).
- [13] I. Stewart, *L'altro segreto della vita*, Longanesi, (2002).
- [14] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Holt-Saunders International Editions.
- [15] G. L. Chen, T. T. Huang, S. Datt, D. B. Janes, *Observation of the Interfacial-Field-Induced Weak Antilocalization in InAs Quantum Structures*, *Phys. Rev. B* **47**, 7, (1993).
- [16] G. Lommer, F. Malcher, U. Rössler, *Spin Splitting in Semiconductor Heterostructures for $B \rightarrow 0$* , *Phys. Rev. Lett.* **60**, 8, (1988).
- [17] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, F. Bassani, *Spin-orbit Splitting of Electronic States in Semiconductor Asymmetric Quantum Wells*, *Phys. Rev. B* **55**, 24, (1997).

-
- [18] Y. A. Bychkov, E. I. Rashba, *Properties of a 2D Electron Gas with Lifted Spectral Degeneracy*, JEPT Lett. **39**, 2, (1984).
- [19] Y. A. Bychkov, E. I. Rashba, *Oscillatory Effects and magnetic Susceptibility of Carriers in Inversion Layers*, J. Phys. C: Solid State Phys. **17**, 6039-6045, (1984).
- [20] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, P. J. Stiles, *Effects of Inversion Asymmetry on Electron Energy Band Structures in GaSb/InAs/GaSb Quantum Wells*, Phys. Rev. B **41**, 11, (1990-I).
- [21] R. Winkler, *Spin Splitting in the Electron Subband of Asymmetric GaAs/Al_xGa_{1-x}As Quantum Wells: The Multiband Envelope Function Approach*, Phys. Rev. B, **58**, 23, (1998).
- [22] R. Winkler, *Rashba Spin Splitting in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Phys. Rev. B, **62**, 7, (2000).
- [23] R. Winkler, U. Rössler, *General Approach to the the Envelope-Function Approximation Based on a Quadrature Method*, Phys. Rev. B, **48**, 12, (1993).
- [24] G. Borgioli, *Appunti di Fisica Matematica*, Corso di Fisica Matematica Università di Firenze Facoltà di Ingegneria, Anno Accademico 1999-2000.
- [25] G. Ghione, *Dispositivi per la Microelettronica*, McGraw-Hill, (1998).
- [26] O. Morandi, *Analisi del Trasporto in Dispositivi ad Effetto Tunnel In-trabanda mediante l'Applicazione del Formalismo di Wigner*, Tesi di Laurea, Università degli Studi di Firenze, 19 Settembre 2002.

-
- [27] G. Ali, F. Frosali, O. Morandi, *Two-Band Quantum Models for Semiconductors Arising from the Bloch Envelope Theory*, to appear proceedings of the SIMAI 04 Conference, (2004).
- [28] G. Borgioli, O. Morandi, G. Frosali, M. Modugno, *Different Approaches for Multi-Band Transport in Semiconductors*, submitted to Ukrainian Math. J. (2004).
- [29] O. Morandi, M. Modugno *A Multiband Envelope Function Model for Quantum Transport in a Tunneling Diode* submitted to Phys. Rev. B., (2004).
- [30] M. Camprini, *Modellistica del Trasporto per Diodi Tunnel Double-Barrier-Quantum-Well Interbanda*, Tesi di Laurea, Università degli Studi di Firenze, Anno Accademico 1999-2000.
- [31] L. D. Landau, E. M. Lifšits, *Meccanica Quantistica-Teoria Non Relativistica*, Editori Riuniti Edizioni Mir, (1982).
- [32] R. Tsu, L. Esaki, *Tunneling in a Finite Superlattice*, Appl. Phys. Lett. **22**, 562, (1973).
- [33] Y. C. Chang, L. Esaki, R. Tsu, *Resonant Tunneling in Semiconductor Double Barriers*, Appl. Phys. Lett. **24**, 593, (1974).
- [34] R. Eppenga, M. F. H. Schuurmans, *Effect of Bulk Inversion Asymmetry on [001], [110], and [111] GaAs/AlAs Quantum Wells*, Phys. Rev. B, **37**, 10923, (1988).
- [35] H. Mizuta, T. Tanoue, *The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes*, Cambridge University Press, (1995).

-
- [36] Y. X. Liu, D. Z.-Y. Ting, T. C. McGill, *Efficient, Numerically Stable Multiband $k \cdot p$ Treatment of Quantum Transport in Semiconductor Heterostructures*, Phys. Rev. B, **54**, 8, (1996).
- [37] J. Kefi, *Analyse Mathématique et Numérique de Modèles Quantiques pour les Semiconducteurs*, Ph. D., Université Toulouse III "Paul Sabatier", 19 Sept. 2003.
- [38] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors*, Oxford, Clarendon Press, 4th. ed., (1999).