

Fator-g em pontos quânticos duplos de CdTe/ZnTe

Silvio José Prado, sprado@ufu.br

Professor Doutor do Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal - ICENP - UFU

Recebido em: 26 de Fevereiro de 2021; Aprovado em: 25 de Março de 2021

RESUMO

Neste trabalho foi estudado o Zeeman splitting e o fator giromagnético ou fator-g dos níveis de energia da banda de condução em pontos quânticos cilíndricos duplos de CdTe/ZnTe, submetidos a um campo magnético externo. O modelo teórico usado nos cálculos foi o modelo **k.p** 8×8 Kane-Weiler. Os resultados calculados do fator-g foram apresentados em função do campo magnético externo, dos parâmetros estruturais como o raio, a altura e a separação entre os pontos quânticos. Também foi simulado a obtenção do fator-g através da técnica de magneto-absorção óptica, usando as configurações complementares da luz incidente, σ^\pm . Os resultados mostram que é possível controlar a magnitude e o sinal do fator-g ajustando os parâmetros estruturais e o campo magnético externo.

Palavras-chave: Pontos quânticos duplos. Fator-g, Método **k.p**, Propriedades magneto-ópticas.

g-Factor in CdTe/ZnTe double quantum dots

ABSTRACT

In this work I studied the Zeeman splitting and the gyromagnetic factor or g-factor of the energy levels of the conduction band in CdTe/ZnTe double cylindrical quantum dots, submitted to an external magnetic field. The theoretical model used in the calculations was the **k.p** 8×8 Kane-Weiler model. The calculated results of the g-factor were presented as a function of the external magnetic field, structural parameters such as radius, height and the separation between quantum dots. I also simulated how to obtain the g-factor using the magneto-absorption technique, using the complementary configurations of the incident light, σ^\pm . The results show that the Zeeman splitting and the associated g-factor vary in magnitude and signal, as well as these characteristics can be controlled by adjusting the structural parameters and the external magnetic field.

Keywords: Double quantum dots. g-factor. **k.p** method. Magneto-optical properties.

Introdução

O estudo do fator- g que está associado ao Zeeman splitting, que é a separação dos níveis de energia quando o sistema está sob a ação de um campo magnético externo, e o seu controle por meio de um campo magnético externo permite uma melhor compreensão dos efeitos de spin sobre a resposta óptica em sistemas de baixa dimensão, como os pontos quânticos (PQs).

O fator- g em nanocristais é de grande interesse devido à importância da manipulação do spin para usos em aplicações como, transporte de carga (PENGQIN, 2016), qubits (bits quânticos) de estado sólido, com a carga ou o spin do portador (POORNAPRAKASH, 2020; BORDOLOI, 2020; RANCIC, 2019), detectores de luz de estado sólido (MAUNE, 2012) e em processamento e computação quântica (VELDHORST, 2015; PRADO, 2003), onde neste último caso é necessário ter controle sobre o tempo e a distância em que o spin se mantém coerente.

Em PQs os níveis de energia dos elétrons e dos buracos dependem fortemente das condições de confinamento quântico a

que estão submetidos, portanto o fator- g também deve depender do confinamento.

Neste trabalho foram estudados os seguintes tópicos em pontos quânticos duplos de CdTe/ZnTe, submetidos a um campo magnético externo: *a)* Zeeman splitting devido a interação entre o momento angular e o campo magnético externo, *b)* o fator- g na banda de condução e *c)* a influência dos parâmetros estruturais como o raio (R), a altura (h_z) e a distância (d) de separação entre os PQs sobre o Zeeman e o fator- g .

O modelo $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 8×8 Kane-Weiler, considera de forma precisa os efeitos das dimensões dos PQs e das interações entre os elétrons e os buracos. O modelo está discutido na referência (PRADO, 2003) para PQs esféricos com campo magnético e na referência (PRADO, 2016) para PQs cilíndricos, portanto da combinação das teorias das duas referências calculei as energias dos elétrons na banda de condução (BC) e dos buracos na banda de valência (BV) na presença de um campo magnético externo.

Material e Método

A Figura 1 mostra o perfil das bandas de energia dos elétrons e dos buracos, em PQs duplos cilíndricos de CdTe/ZnTe. O cilindro grande que contém os dois PQs cilíndricos menores tem tamanho de 400Å na direção z , onde $H_z=200\text{Å}$. Para os PQs usei três valores de h_z , que são 60Å , 70Å e 80Å . O cilindro grande e os PQs têm o mesmo raio, que variou entre 20Å e 90Å . À distância, d , entre os PQs por sua vez variou entre 40Å e 100Å .

As energias ΔE_c e ΔE_v , na Figura 1, são os band-offsets da banda de condução e de valência, respectivamente e representam a diferença de energia na interface entre o CdTe e o ZnTe, e assumem os seguintes valores, $\Delta E_c = 80\%(E_{g,\text{ZnTe}} - E_{g,\text{CdTe}})$ e $\Delta E_v = 20\%(E_{g,\text{ZnTe}} - E_{g,\text{CdTe}})$, medidas em meV.

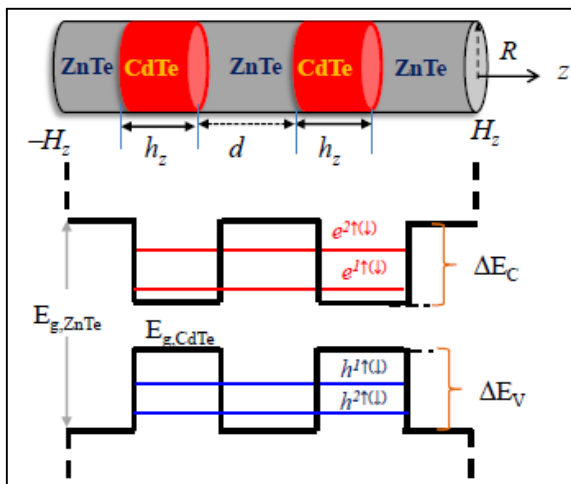


Figura 1 - Representação das bandas de energia dos dois materiais e os offsets das bandas de condução (ΔE_c) e de valência (ΔE_v).

Neste tipo de estrutura as condições de contorno a serem satisfeitas pelas funções de onda são as seguintes, na interface CdTe/ZnTe, o potencial é finito na direção- z e é dado pelos offsets ΔE_c e ΔE_v , nos limites

do cilindro grande, em H_z e R , o potencial é infinito e as função de onda devem se anular.

Outro ponto importante sobre o Hamiltoniano \mathbf{k}, \mathbf{p} , é que ele apresenta uma simetria inerente que permite separar o espaço de Hilbert em quatro subespaços ortogonais, denominados de I, II, III e IV. Portanto as funções de onda de oito-componentes $\psi(\rho, \phi, z)$ são expandidas em cada subespaço de Hilbert, em termos das soluções exatas em campo magnético nulo.

A função de onda espacial, ou função envelope de cada componente do espinor tem a seguinte forma, $F_{n,L,m}^{\pm}(\rho, \phi, z) = A_{n,L} J_L(k_n^L \rho) \frac{e^{\pm iL\phi}}{\sqrt{2\pi}} f_m^{\pm}(z)$, onde $A_{n,L}$ é uma constante de normalização, $J_L(\mu_n^L \rho/R)$ é a função de Bessel, L é o momento angular orbital e $f_m^{\pm}(z) = \frac{1}{\sqrt{H_z}} \text{sen} \left[m\pi \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_z} \right) \right]$ (PRADO, 2016). O sinal de mais e menos em $f_m^{\pm}(z)$ corresponde ao número quântico m par e ímpar, respectivamente.

Assim as funções de onda $\psi_{I(IV)}$ e $\psi_{II(III)}$, foram escritas com uma sequência especial de paridade determinada pela simetria inerente ao método \mathbf{k}, \mathbf{p} ,

$$\begin{aligned}
|\psi_{I(IV)}\rangle &= \sum_{n,L,m} \begin{pmatrix} C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |e^\uparrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^- |hh^\uparrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^+ |lh^\uparrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^+ |so^\uparrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^+ |e^\downarrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^+ |hh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^- |lh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^- |hh^*\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |lh^\uparrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |so^\uparrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^- |e^\downarrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |hh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^+ |lh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^+ |so^\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (1), \\
|\psi_{II(III)}\rangle &= \sum_{n,L,m} \begin{pmatrix} C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |lh^\uparrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |so^\uparrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^- |e^\downarrow\rangle \\ C_{2L(2L+1)}^{n,m} F_{2L(2L+1)}^n f^- |hh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^+ |lh^\downarrow\rangle \\ C_{2L+1(2L)}^{n,m} F_{2L+1(2L)}^n f^+ |so^\downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (2),
\end{aligned}$$

onde $C_{n,L}^m$ são constantes a serem determinadas.

Os subespaços I e IV assim como II e III são degenerados na ausência de campo magnético. Os níveis de energia por sua vez, são indexados da seguinte forma: $mX^{N,s}$, sendo m o número quântico na direção- z , s é o número quântico de spin [spin up (\uparrow) ou down (\downarrow)] e $N = 1, 2, \dots$ enumera os níveis em ordem crescente de energia. Os portadores são identificados pela letra X como, e (elétron), lh (buraco leve), hh (buraco pesado) e so (spin-órbita). Usando essa notação, identifiquei os portadores considerando o maior valor absoluto dos

coeficientes $C_L^{n,m}$ em campo magnético nulo (PRADO, 2003).

O fator- g efetivo da banda de condução pode ser definido em termos do Zeeman, ou seja, da diferença de energia entre os níveis com spin up e down, da seguinte forma (PRADO, 2004),

$$g_e \mu_B B = E(e \uparrow, 1, N) - E(e \downarrow, 2, N), \quad (3)$$

sendo μ_B o magnéton de Bohr, e $E(e \uparrow(\downarrow), m, N)$ representado a energia do estado $m e^{N \uparrow(\downarrow)}$.

Usando luz incidente nas configurações complementares com polarização circular à esquerda (σ^-) e a direita (σ^+), o Zeeman e o fator- g podem ser obtidos experimentalmente através da magneto-absorção óptica (PRADO, 2003 e 2016). Neste caso, as regras de seleção a serem obedecidas nas transições ópticas são aquelas cujos estados iniciais e finais pertencem a subespaços de Hilbert diferentes, de I (de IV) para II (para III), e vice-versa, devido à diferença de simetria dos momentos angulares entre os elétrons e os buracos. Já os números quânticos L e m , obedecem as seguintes regras de seleção: $\Delta m = \pm 1$ e $\Delta L = \pm 1$ para a luz incidente com polarização circular à direita e a esquerda, σ^\pm (PRADO, 2003).

O coeficiente de absorção óptica envolvendo transições da BV para a BC foi escrito como (PRADO, 2003),

$$\alpha(\hat{e}^\pm, \omega) = \frac{\alpha_0 \Gamma}{\pi} \sum_{N_e, N_h, m} \frac{|F_{N_e, m_e}^{N_h, m_{h\pm 1}}(\text{I}, \text{II})|^2}{[(E_{N_e, m_e}(\text{I}) - E_{N_h, m_{h\pm 1}}(\text{II}) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]} + \frac{|F_{N_e, m_e}^{N_h, m_{h\mp 1}}(\text{II}, \text{I})|^2}{[(E_{N_e, m_e}(\text{II}) - E_{N_h, m_{h\mp 1}}(\text{I}) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]}, \quad (4)$$

Onde:

$$F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(\text{I}, \text{II}) = \sum_{n, L, m} \{ C_{n, \beta}^{e\pm} C_{n, \beta}^{hh\pm} - C_{n, \beta}^{e\mp} \left[C_{n, \beta}^{lh\mp} + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{n, \beta}^{so\mp} \right] \},$$

é a força do oscilador óptico para as transições permitidas, com $\beta = 2L + 1/2 \mp 1/2$. Da mesma forma as transições $\text{I(IV)} \rightarrow \text{II(III)}$ podem ser obtidas trocando $2L + 1/2 \mp 1/2$ por $\beta = 2L + 1/2 \pm 1/2$.

Assim como foi definido um fator- g na equação (3) com base no efeito Zeeman, também pode ser definido um fator- g baseado nas energias de transição interbanda usando as configurações complementares σ^\pm , como (PRADO, 2004),

$$g_e \mu_B B = \Delta E(\sigma^+) - \Delta E(\sigma^-). \quad (5)$$

As transições nesta equação envolvem o mesmo nível de energia da banda de valência para níveis finais na banda de condução com spins diferentes.

Resultados e Discussão

Os parâmetros usados no modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 8×8 Kane-Weiler para calcular os níveis de energia foram retirados das referências (PRADO, 2004) para o CdTe e (SADOWSKI, 1996) para o ZnTe. O valor do offset da banda de condução (ΔE_c) é de

630 meV e o da banda de valência (ΔE_v) é de 157,5 meV.

Os resultados calculados para os níveis de energia da BC em função do campo magnético são apresentados em três situações diferentes; Figura 2, com h_z e d fixos e o raio assumindo dois valores diferentes, Figura 3 com R e d fixos e h_z variando e na Figura 4, h_z e R fixos e d variando. Estas Figuras mostram um resultado comum e importante que é a inversão do primeiro e do segundo nível da BC, como explicitado nas Figuras. Os resultados das Figuras 2 e 3 podem ser explicados no fato de que variei parâmetros que afetam o confinamento quântico dos portadores, aumentar R e h_z diminuiu a energia dos elétrons, como esperado, mas também muda a posição dos níveis de energia referentes aos subespaços II e III. Na Figura 4, ao variar a distância d ocorre uma diminuição na interação entre os elétrons dos dois PQs levando novamente a uma inversão dos níveis de energia.

A importância da inversão dos dois primeiros níveis da BC, nas Figuras 2, 3 e 4, está no fato que de acordo com a equação (3) aplicada a estes resultados o fator- g passa de positivo Figuras 2(A), 3(B) e 4(A) para negativo Figuras 2(B), 3(A) e 2(B).

As Figuras menores inseridas, nas Figuras 2, 3 e 4, mostram o fator- g em função do campo magnético, e como

esperado ele é independente do campo, pois os dois primeiros níveis apresentam um fraco acoplamento entre eles, evidenciando o pequeno grau de hibridização do estado fundamental.

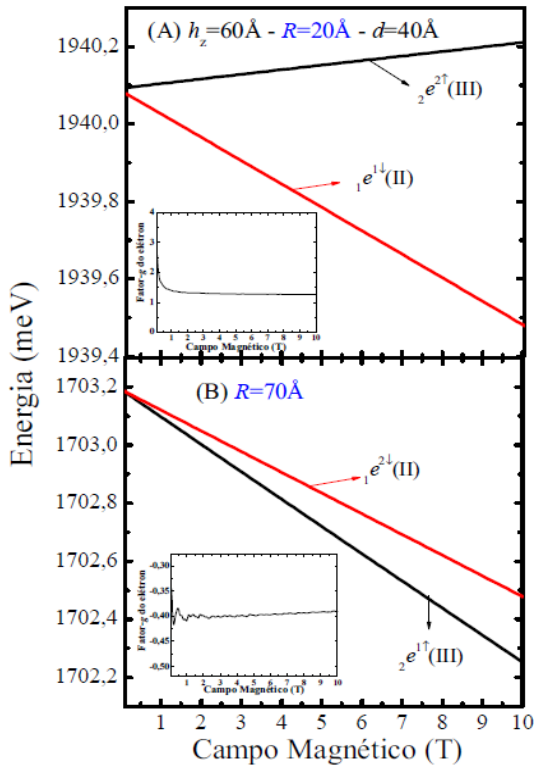


Figura 2 - Níveis de energia da banda de condução em função do campo magnético, para PQs duplos com $h_z=60\text{Å}$, $d=40\text{Å}$ e raios, (A) 20Å e (B) 70Å .

A figura 5 mostra o fator-g dos elétrons na BC como função da razão entre a distância d e o raio R dos PQs. A Figura (A) é para $h_z=60\text{Å}$, a Figura (B) para $h_z=70\text{Å}$ e a Figura (C) para $h_z=80\text{Å}$, onde os valores de d e R usados estão mostrados na Figura (A).

Destes resultados observa-se que para um dado valor da distância d , à medida que o raio aumenta (a razão d/R diminui) o fator-g passa de positivo para negativo, pois como mencionado o confinamento e a interação

entre os elétrons e os buracos diminuem, levando ao cruzamento dos dois

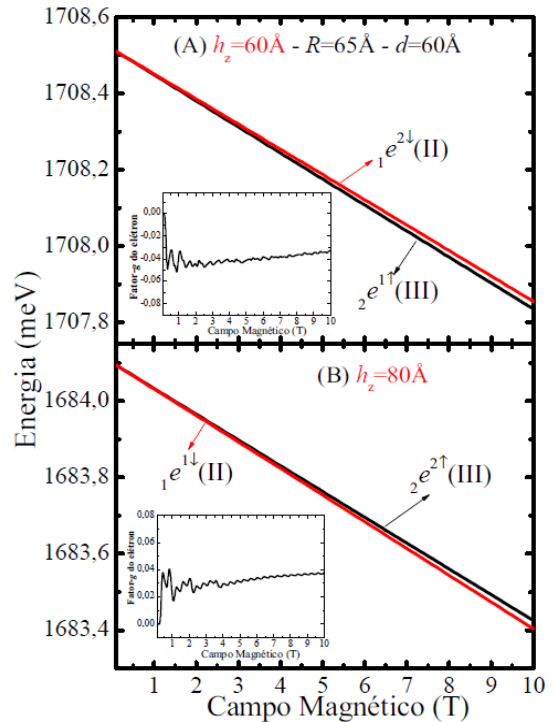


Figura 3 - Níveis de energia da banda de condução em função do campo magnético, para PQs duplos com $R=65\text{Å}$, $d=60\text{Å}$ e alturas, (A) 60Å e (B) 80Å .

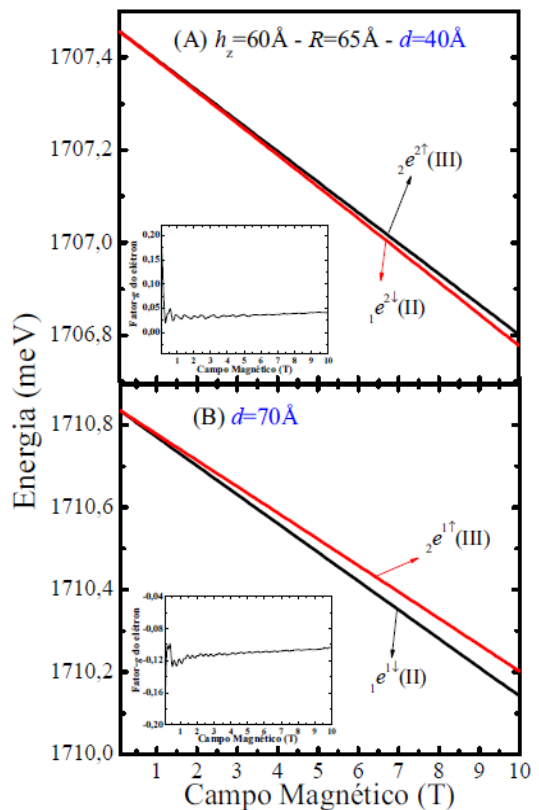


Figura 4 - Níveis de energia da banda de condução em função do campo magnético, para PQs duplos com $h_z=60\text{\AA}$, $R=65\text{\AA}$ e distância entre os PQs de (A) 40\AA e (B) 70\AA .

primeiros níveis da BC e conseqüentemente a mudança de sinal. Estas características são comuns aos três valores de h_z da Figura 5.

Da mesma forma, aumentar o valor de h_z também afeta o confinamento e a interação entre os portadores mas como mostrados nas Figuras 5(A), (B) e (C) as mudanças no comportamento e nos valores do fator-g são relativamente pequenas.

Os resultados apresentados para os níveis de energia e conseqüentemente para o fator-g refletem a complexa interação entre os portadores devido as mudanças nos parâmetros estruturais, h_z , R , d e do campo magnético, levados em consideração no método **k.p.** Entretanto justamente as possíveis combinações destes fatores abrem as portas para a manipulação e o controle do fator-g da forma mais conveniente para futuras aplicações práticas.

Com objetivo de verificar as mudanças de sinal no Zeeman e conseqüentemente no fator-g, simulei espectros de magneto-absorção óptica nas configurações σ^\pm da luz incidente. Aplicando a equação (5) a estes resultados de absorção óptica pode-se calcular o valor do fator-g.

Três casos diferentes de magneto-absorção foram simulados: (i) com h_z e d fixos e R variando, (ii) com h_z e R fixos e d

variando e (iii) com R e d fixos e h_z variando, os espectros foram calculados em $B=8\text{T}$ e os valores numéricos usados foram escolhidos de forma a se obter uma melhor resolução do espectro.

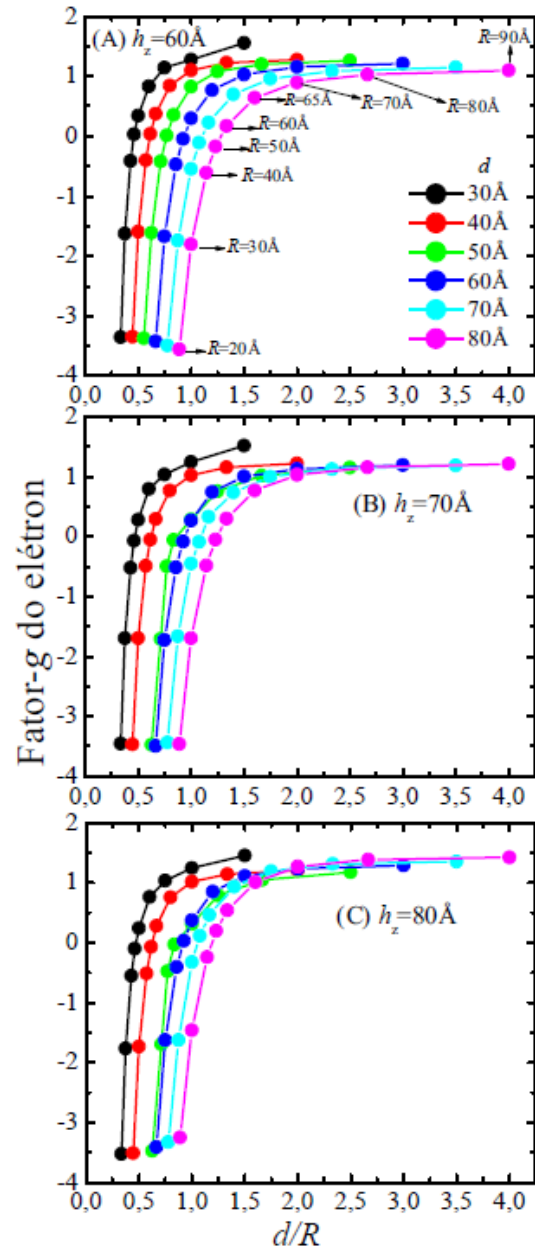


Figura 5 - Fator-g do elétron em função da razão d/R . Figura (A) para $h_z=60\text{\AA}$, (B) para $h_z=70\text{\AA}$ e (C) $h_z=80\text{\AA}$.

A Figura 6 mostra o espectro de magneto-absorção calculado na situação (i),

onde as transições da BV para a BC nas configurações com luz polarizada a direita, σ^+ (pico A) e a esquerda, σ^- (pico B) estão indicadas nas Figuras. Na Figura (A) o fator-g é positivo em $R=50\text{\AA}$, pois o nível $2e^{1\uparrow}(\text{III})$ é maior do que o nível $1e^{2\downarrow}(\text{II})$ e consequentemente o Zeeman é positivo, ao aumentar o raio, Figuras (B) e (C), o fator-g se torna negativo devido à diminuição do confinamento dos elétrons, o que leva a inversão dos níveis de energia acima citados.

Os resultados para o caso (ii) estão mostrados na Figura 7, onde o fator-g é negativo em $d=40\text{\AA}$, Figura (A), e nas Figuras (B), $d=70\text{\AA}$ e (C) $d=100\text{\AA}$ ocorre à inversão dos níveis de energia devido à diminuição da interação entre os portadores nas bandas de condução e de valência, fazendo com que fator-g passe a ser positivo.

Finalmente os resultados para o caso (iii) estão na Figura 8, onde $h_z=60\text{\AA}$, 70\AA e 80\AA , respectivamente para as Figuras (A), (B) e (C). Nas Figuras (A) e (B) o fator-g é positivo e na figura (C) é negativo, assim como no caso dos resultados da Figura 6 onde o aumento do raio levou a diminuição do confinamento dos portadores causando a inversão dos dois primeiros níveis da BC, o mesmo ocorre ao aumentar o tamanho do PQ na direção z.

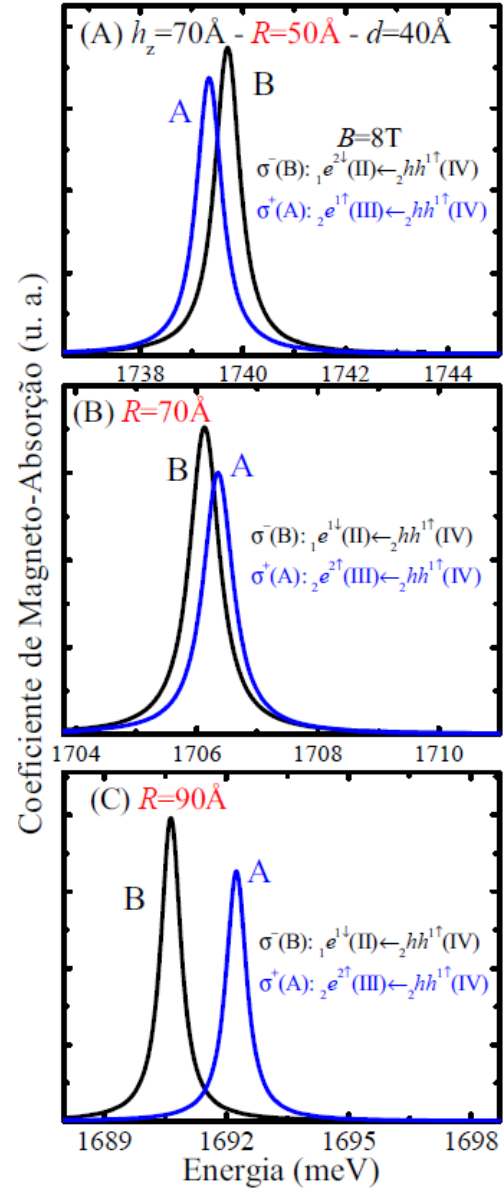


Figura 6 - Espectros de absorção óptica para $h_z=70\text{\AA}$, $d=40\text{\AA}$ e $R=90\text{\AA}$, figura (A), $R=70\text{\AA}$, figura (B) e $R=50\text{\AA}$, figura (C).

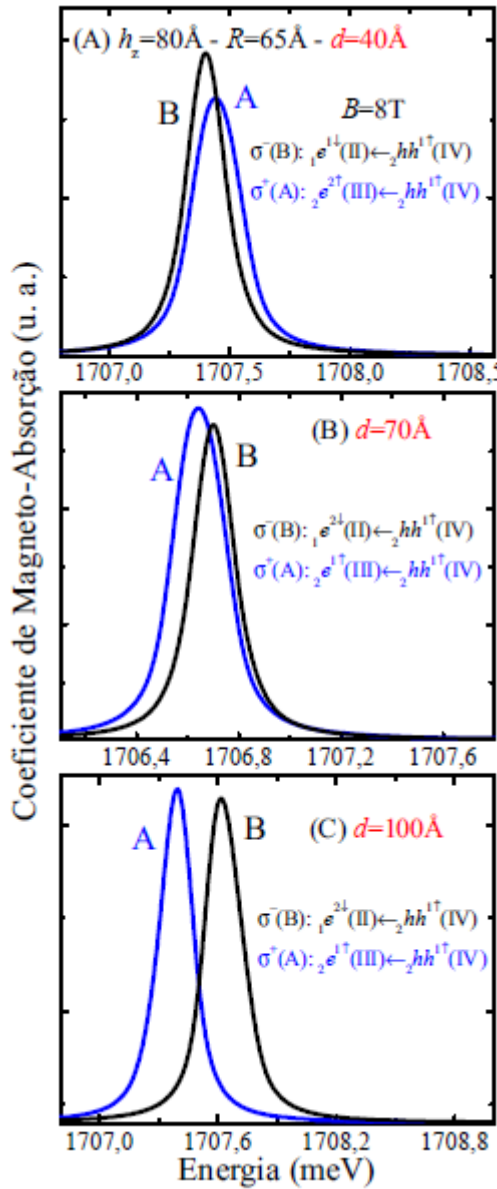


Figura 7 - Espectros de absorção óptica para $h_z=80\text{Å}$, $R=65\text{Å}$ e $d=40\text{Å}$, figura (A), $d=40\text{Å}$, figura (B) e $d=100\text{Å}$, figura (C).

Conclusão

Neste trabalho calculou-se a estrutura eletrônica de PQs duplos de CdTe/ZnTe, usando o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 8×8 com campo magnético. Com os níveis de energia estudei o Zeeman splitting e o fator-g variando os parâmetros estruturais como o raio, a altura e a distância entre os PQs.

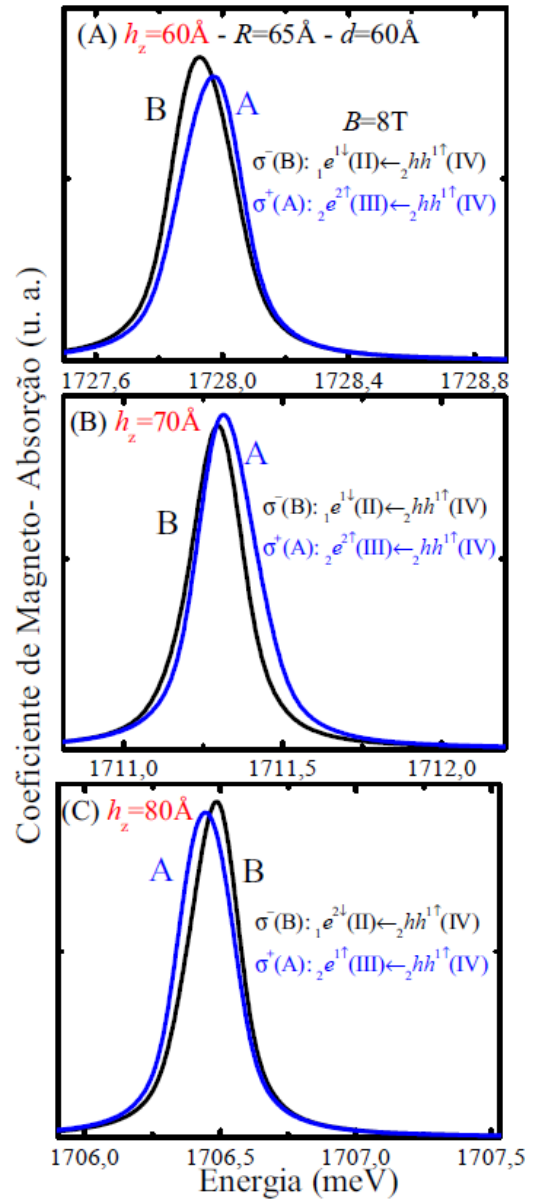


Figura 8 - Espectros de absorção óptica para $R=65\text{Å}$, $d=60\text{Å}$ e $h_z=60\text{Å}$, figura (A), $h_z=70\text{Å}$, figura (B) e $h_z=80\text{Å}$, figura (C).

Os resultados mostram que é possível controlar as propriedades magneto-ópticas, como o valor e o sinal do fator-g dos elétrons, manipulando os parâmetros estruturais.

Também simulou-se o espectro de absorção óptica com campo magnético em três situações diferentes, visando verificar um importante resultado para aplicações

tecnológicas que é mudança de sinal do fator- g , a qual indica uma inversão do spin dos dois primeiros níveis da BC. Os resultados de magneto-absorção óptica mostram que os espectros estão na região do infravermelho e que esta estrutura de PQs duplos, além das possíveis aplicações já citadas também poderia ser usada em detectores de luz polarizada circularmente.

Agradecimentos

O autor gostaria de agradecer ao apoio fornecido pelo ICENP, Instituto de Ciências Exatas e Naturais Pontal, UFU.

Referências

BORDOLOI A.; ZANNIER V.; SORBA L.; SCHÖNENBERGER C. E BAUMGARTNER A.; A double quantum dot spin valve, **Commun. Phys.** 3, 135 2020.

MAUNE, B. M.; BORSELLI, M. G.; HUANG,; LADD, T. D.; DEELMAN, P. W.; HOLABIRD, K. S.; KISELEV, ; ALVARADO-RODRIGUES, I.; ROSS, R. S.; SCHMITZ, A. E.; SOKOLICH, M.; WATSON, C. A.; GYURE, M. F.; e HUNTER, A. T., Coherent singlet-triplet oscillations in a silicon-based double quantum dot, **Nature** 481, p. 344, 2012.

PENGQIN SHI; MENGHAN HU; YAOFENG YING e JINSHUANG JIN; Noise spectrum of quantum transport through double quantum dots: Renormalization and non-Markovian effects, **AIP Advances** 6, p. 095002, 2016.

POORNAPRAKASH B.; U. CHALAPATHI; KUMAR M.; RAJITHA B.; VATTIKUTI S. V.; PARK S.; Tailoring the optical, magnetic, and photocatalytic properties of ZnS quantum dots by rare-earth ion doping, **Chemical Physics Letters**, p. 147609, 2020.

PRADO, S. J.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A. M. V.; LÓPEZ-RICHARD, V. e MARQUES, G. E., Magneto-optical properties of nanocrystals: Zeeman splitting, **Physical Review B**, Vol. 67, p. 165306-1-165306-10, 2003.

PRADO, S. J.; LÓPEZ-RICHARD, V.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A. M. e MARQUES, G. E., Effective g -factor in II-VI quantum dots: morphological effects, **Physics Status Solid (c)**, p. 1, 2004.

PRADO, S. J., Estudo das propriedades eletrônicas e ópticas em pontos quânticos duplos, **Revista Ciências Exatas e Naturais (Recen)**, Vol. 18 (2), p. 282, 2016.

RANCIC, M. J.; HOFFMAN S.; SCHRADER, C.; KLINOVAJA, J.; LOSS, D.; Entangling spins in double quantum dots and Majorana bound states, **Physical Review B**, 99, p. 165306, 2019.

SADOWSKI, J., Excitonic luminescence in strained quantum wells, **Opto-Electronics Review**, Vol. 4, p. 135, 1996.

VELDHORST, M.; YANG, C. H.; HWANG, J. C. C.; HUANG, W.; DEHOLLAIN, J. P.; MUHONEN, J. T.; SIMMONS, S.; LAUCHT, A.; HUDSON, F. E.; ITOH, K. M.; MORELLO, A. e DZURAK, A. S., A two-qubit logic gate in silicon, **Nature** 526, p. 410, 2015.