

# Estudo das propriedades magneto-ópticas em pontos quânticos semicondutores magnéticos diluídos de CdMnTe/ZnTe

## Study of magneto-properties in diluted magnetic semiconductor quantum dots of CdMnTe/ZnTe

Silvio José Prado

Professor Doutor do Instituto de Ciências Exatas e Naturais do Pontal - ICENP - UFU,  
[sprado@ufu.br](mailto:sprado@ufu.br)

Recebido em: 02 de Junho de 2021; Aprovado em: 13 de Dezembro de 2021

### RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo teórico das propriedades magneto-ópticas em pontos quânticos semicondutores magnéticos diluídos de CdMnTe/ZnTe. Estudou-se como o Zeeman splitting, o fator- $g$  dos níveis de energia da banda de condução e a energia de Coulomb, são afetados pelo confinamento espacial e pela presença dos íons de manganês na presença de um campo magnético externo. O modelo teórico usado nos cálculos foi o modelo  $\mathbf{k,p}$   $8 \times 8$  Kane-Weiler. Os resultados apresentados em função do campo magnético externo, da espessura da camada de ZnTe e da concentração de manganês, mostram que é possível manipular tanto o módulo quanto o sinal do fator- $g$  ajustando os parâmetros estruturais, a dopagem do elemento magnético e do campo externo. Através da magneto-absorção óptica, usando as configurações complementares da luz incidente,  $\sigma^\pm$  e  $\pi^z$ , demonstrou-se como é possível obter experimentalmente os resultados calculados.

**Palavras-chave:** Pontos quânticos semicondutores, Semicondutores magnéticos diluídos. Método  $\mathbf{k,p}$ , Propriedades magneto-ópticas.

### Abstract

This work presents a theoretical study of the magneto-optical properties in diluted magnetic semiconductor quantum dots of CdMnTe/ZnTe. It was studied how the Zeeman splitting,  $g$ -factor of the energy levels of the conduction band and Coulomb energy, are affected by the spatial confinement and the presence of the manganese ions in the presence of an external magnetic field. The theoretical model used in the calculations was the  $\mathbf{k,p}$   $8 \times 8$  Kane-Weiler. The results presented as a function of the external magnetic field, the thickness of the ZnTe layer and the concentration of manganese, show that it is possible to manipulate both the module and the  $g$ -factor signal by adjusting the structural parameters, the doping of the magnetic element and the field external. Through optical magneto-absorption, using the complementary configurations of incident light,  $\sigma^\pm$  and  $\pi^z$ , it was demonstrated how it is possible to obtain the calculated results experimentally.

**Keywords:** Semiconductor quantum dots. Dilute magnetic semiconductor,  $\mathbf{k,p}$  method. Magneto-optical properties.

## INTRODUÇÃO

Pontos quânticos (PQs) do tipo caroço-casca (core-shell) tem seu interesse voltado para uma grande variedade de aplicações, tais como, diodos emissores de luz (CAO, 2018; JI, 2020), células solares (PRADO, 2017), biomarcadores em biomedicina, fotodetectores ultrasensíveis (MING, 2018; SELOPAL, 2020; LIEN, 2019) e spintrônica (BALAKRISHNAN, 2021; ZHANG, 2019).

Em PQs com íons magnéticos incorporados no caroço e sob a ação de um campo magnético externo, torna-se possível a engenharia de spin em nanoestruturas semicondutoras com interesse em aplicações em magneto-eletrônica com spin polarizado e em computação quântica (PRADO, 2004).

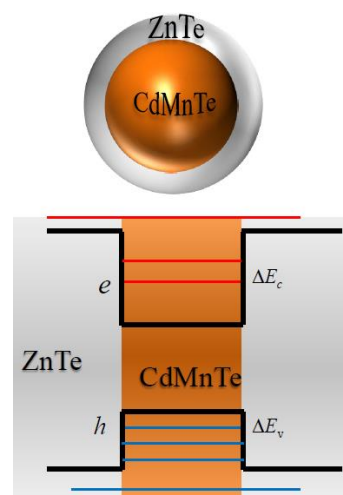
A análise do Zeeman splitting, relacionado ao fator-g de Landé, e os possíveis mecanismos de sintonia magnética são importantes para entender os efeitos do spin na resposta óptica de sistemas de baixa dimensão. A combinação do confinamento espacial e magnético em nanoestruturas produz uma dispersão dependente do campo magnético, diferente daquela obtida em semicondutores bulk. Outros elementos, como acoplamento entre bandas e mistura de estados, também

afetam e modificam o spin-splitting efetivo dos estados localizados.

O presente trabalho tem como objetivos analisar teoricamente como a presença dos íons de mangânes afetam juntamente com a variação da espessura da camada de ZnTe, o fator-g e a energia de Coulomb entre os elétrons e os buracos, e propor como estudar os resultados apresentados do ponto de vista experimental, usando a magneto-absorção óptica.

## MATERIAL E MÉTODO

Um esquema mostrando o PQ esférico de  $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}/\text{ZnTe}$ , assim como o perfil das bandas de energia estão na Figura 1. Nesta Figura também se pode ver os band-offset das bandas de condução e de valência.



**Figura 1** - Representação das bandas de energia dos dois materiais e os offsets das bandas de condução ( $\Delta E_c$ ) e de valência ( $\Delta E_v$ ).

O ajuste das propriedades dos pontos quânticos semicondutores magnéticos diluídos (PQSMDs) pode ser analisado com um método adequado de cálculo da estrutura eletrônica. Neste trabalho usou-se o Hamiltoniano  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$   $8\times 8$  Kane–Weiler (PRADO, 2006) o qual inclui os efeitos da interação de troca e da espessura da camada de ZnTe, dentro do mesmo referencial teórico. Assim, pode-se usar uma expansão da função de onda com base nas soluções analíticas dos termos da diagonal do Hamiltoniano  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  em  $B_0=0$ , para cada tipo de portador: elétron ( $e$ ), buraco pesado ( $hh$ ), buraco leve ( $lh$ ) e split-off ( $so$ ). Cada estado foi escrito como um espinor de oito componentes no espaço de funções de Bloch, sendo rotulado como  ${}_M\psi^{N,s}(I, (II))$ . O significado de cada índice é: (i)  $\psi$ , é o índice de banda que identifica o tipo de portador, como  ${}_M e^{N,s}$ ,  ${}_M hh^{N,s}$ ,  ${}_M lh^{N,s}$ ,  ${}_M so^{N,s}$ ; (ii)  $M = \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots$ , relacionado ao número magnético, o único número quântico bom de cada espinor; (iii)  $N$ , indica o nível de energia em ordem crescente; (iv)  $s$ , a polarização de spin de cada estado do portador. Finalmente, devido a simetria inerente ao Hamiltoniano  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ , pode-se separar o espaço de Hilbert em dois subespaços ortogonais, onde cada componente deve exibir uma paridade

adequada conforme determinado pelos operadores fora da diagonal no Hamiltoniano. Um estado spinor geral nestes subespaços (I e II) tem a forma

$$|\psi_M^{N,s}(I, (II))\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{L \geq |M|}^{\infty} \begin{pmatrix} C_{n,L}^M f_{n,2L(2L+1)}^M |e \uparrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^{M-1} |hh \uparrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^M |lh \uparrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^M |so \uparrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L(2L+1)}^{M+1} |e \downarrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^{M+2} |hh \downarrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^{M+1} |lh \downarrow\rangle \\ C_{n,L}^M f_{n,2L+1(2L)}^{M+1} |so \downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (1)$$

onde  $f_{N,L}^M(r, \Omega) = A_{N,L}^\psi j_L\left(\frac{\alpha_{N,L} r}{R}\right) Y_L^M(\Omega)$  e  $A_{N,L}^\psi$  são os coeficientes de normalização.

Além disso,  $Y_L^M(\Omega)$  é o harmônico esférico para o ângulo sólido  $\Omega$ ,  $j_L(\alpha_{N,L} r/R)$  é a função esférica de Bessel e  $\alpha_{N,L}$  é o enésimo zero de cada função  $j_L(x)$ . Finalmente,  $|u^{\uparrow(\downarrow)}\rangle$  representam os quatro estados de Bloch periódicos spin-up (spin-down) no ponto- $\Gamma$  de um cristal de blenda de zinco e  $C_{n,L}^m$  são constantes a serem determinadas.

Cada subespaço de Hilbert mistura diferentes estados de spin com certa geometria espacial, e esta mistura irá produzir mudanças significativas nos níveis de energia do portador, bem como na forma das funções de onda.

Ao adotar a aproximação de cristal virtual e de campo médio, a resposta magnética cooperativa do sistema pode ser facilmente descrita. A interação antiferromagnética entre o spin dos elétrons  $3d$  dos íons de magnanês com o spin dos elétrons da banda de condução tem a forma  $H_{troca} = -x\langle S_z(B, T, x) \rangle (N_0\alpha) s_z$ , onde  $\langle S_z(B, T, x) \rangle$  é a magnetização na temperatura  $T$ , em um amostra com  $N_0$  células unitárias e conteúdo de Mn,  $x$ .  $N_0\alpha$  é uma constante uniforme de troca entre a banda de condução-s dos estados de Bloch (Prado, 2006).

A presença da camada de ZnTe é levada em consideração calculando numericamente uma integral envolvendo as funções da equação (1), entre o raio do caroço ( $R_{CdMnTe}$ ) e o raio do ZnTe ( $R_{ZnTe}$ ), multiplicada pelo band-offset da banda de condução ( $\Delta E_c$ ), quando se tratar dos elétrons e pelo band-offset da banda de valência ( $\Delta E_v$ ) quando se tratar dos buracos.

A função de onda deve se anular no raio do PQ ( $R_{PQ}$ , raio do caroço mais a espessura da camada de ZnTe), já que neste nesta superfície o potencial é infinito, e finito interface CdMnTe/ZnTe.

Como complemento ao cálculo da estrutura eletrônica, as regras de seleção de transição óptica foram derivadas para as

configurações Faraday, com luz incidente nas polarizações circular a direita ( $\sigma^+$ ) e a esquerda ( $\sigma^-$ ), onde  $L$  e  $M$  obedecem as seguintes regras de seleção:  $\Delta M = \pm 1$  e  $\Delta L = \pm 1$ , respectivamente. Na configuração Voigt, com luz incidente com polarização linear ( $\pi^z$ ),  $L$  e  $M$  obedecem a seguinte regra de seleção:  $\Delta M = 0$  e  $\Delta L = \pm 1$ . (PRADO, 2003). Nas três configurações da luz incidente, as transições ópticas permitidas devem ocorrer entre estados iniciais e finais pertencentes a subespaços de Hilbert diferentes, de I para II, e vice-versa, devido à diferença de simetria dos momentos angulares entre os elétrons e os buracos.

Essas configurações complementares são ferramentas importantes para o estudo das propriedades ópticas e magnéticas. O coeficiente de absorção (Prado, 2021) foi então calculado com o objetivo de mostrar que todas as propriedades relatadas podem ser submetidas à confirmação experimental.

O fator- $g$  efetivo da banda de condução foi definido em termos do Zeeman splitting, ou seja, da diferença de energia entre os níveis com spin up e down, da seguinte forma (PRADO, 2021),

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

onde  $\mu_B$  é o magnéton de Bohr, e  $E(e^\uparrow(\downarrow), m, N)$  representa a energia do estado  $m e^{N\uparrow(\downarrow)}$ .

O fator- $g$  também pode ser obtido através das energias de transição interbanda usando as configurações complementares  $\sigma^\pm$ , da seguinte forma (PRADO, 2021),

$$g_e \mu_B B = \Delta E(\sigma^+) - \Delta E(\sigma^-). \quad (3)$$

As transições na equação (3) envolvem o mesmo nível de energia inicial na banda de valência e níveis finais na banda de condução com spins diferentes.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste trabalho o PQ de CdMnTe tem raio de  $20\text{Å}$ , e a casca formada pelo semiconductor ZnTe, tem uma espessura ( $(h_{\text{casca}} = R_{\text{ZnTe}} - R_{\text{CdMnTe}})$ ) que varia entre  $0,1$  e  $10\text{Å}$ . As energias dos band-offsets das bandas de condução ( $\Delta E_c$ ) e de valência ( $\Delta E_v$ ), mostradas na Figura 1, tem os seguintes valores em meV,  $\Delta E_c = 60\%(E_{g,\text{ZnTe}} - E_{g,\text{CdMnTe}})$  e  $\Delta E_v = 40\%(E_{g,\text{ZnTe}} - E_{g,\text{CdMnTe}})$ .

Os parâmetros para calcular os níveis de energia foram retirados das referências (PRADO, 2004) para o CdMnTe e (FURDYNA, 1988) para o ZnTe.

Na Figura 2 temos os resultados para o campo magnético crítico,  $B_c$ , que corresponde ao valor do campo magnético onde o fator- $g$  da banda de condução é nulo, ou seja, onde os dois primeiros níveis de energia da BC,  $0e^{1\uparrow}(\text{I})$  e  $-1e^{1\downarrow}(\text{I})$ , se cruzam. Na Figura 2(a) o  $B_c$  está em função da espessura da camada de ZnTe para  $x=2, 5$  e  $10\%$ , e na Figura 2(b) em função da concentração de manganês para cinco valores diferentes do  $R_{\text{PQ}}$ .

Na Figura 2(a) pode-se ver que o  $B_c$  aumenta com o aumento da espessura da casca, entre  $1,2$  e  $1,5\text{Å}$ , onde então atinge um valor máximo e depois começa a diminuir.

Na Figura 2(b), o  $B_c$  aumenta quase linearmente com  $x$ , como esperado pois a interação de troca depende diretamente da concentração de manganês. Nesta Figura também se pode ver que a menor espessura para a qual ocorre o cruzamento dos dois primeiros níveis da BC é de  $0,2\text{Å}$  e o menor valor de  $x$  que causa este cruzamento é de  $2\%$ .

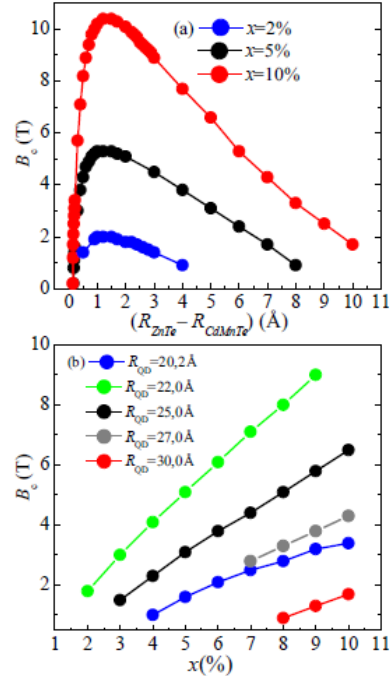
Os resultados para o Zeeman na Figura 3, ajudam a entender o comportamento apresentado pelo  $B_c$  na Figura 2(a). Nestes resultados está incluído o caso sem manganês, linha preta, que serve para comparação com  $x \neq 0$ . Quando a espessura

do ZnTe é pequena, Figura 3(a), não há cruzamento dos dois primeiros níveis da BC para nenhum valor de  $x$ , aqui estudado. Ao aumentar a espessura para  $5\text{\AA}$ , Figura 3(b), aparecem dois cruzamentos, em  $x$  igual a 5% ( $B_c=3,1\text{T}$ ) e 10% ( $B_c=6,6\text{T}$ ) e ao aumentar a espessura para  $10\text{\AA}$  há somente um cruzamento em  $x=10\%$  e o valor do  $B_c$  diminui para  $1,7\text{T}$ . Destes resultados observa-se que é necessário uma quantidade mínima de manganês para cada  $h_{\text{casca}}$  para que a interação de troca em conjunto com o confinamento levem a um Zeeman com inversão de sinal. Por exemplo, se no caso  $R_{\text{PQ}}=30\text{\AA}$  fosse incluído concentrações de Mn de 15 e 20%, o  $B_c$  seria de 2,7 e 2,9T, respectivamente.

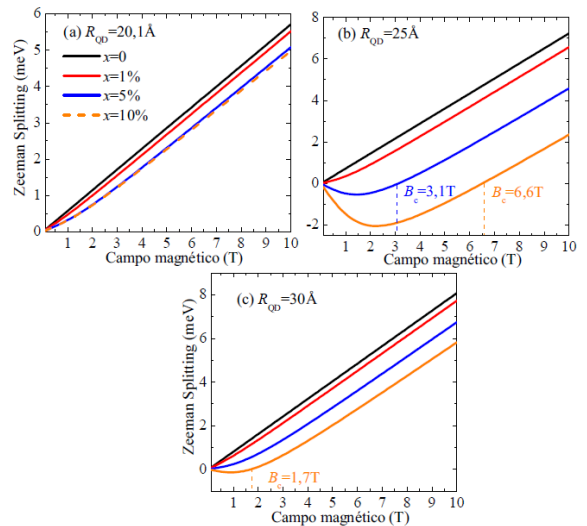
Outra forma de interpretar é dizer que é necessário uma espessura mínima de ZnTe para um dado valor de  $x$  para que a interação de troca passe a ter efeitos sobre o Zeeman, de acordo com os resultados das Figuras 2(b) e 3(a), (b) e (c). Estes cruzamentos acontecem devido à interação entre os elétrons do CdTe e os íons de manganês confinados no caroço.

Os resultados obtidos na Figura 3 para o Zeeman foram usados na equação (2) para calcular o fator- $g$  dos elétrons na BC e são mostrados na Figura 4 como função do campo magnético. No caso sem Mn, Figura 4(a) o fator- $g$  não depende do campo

magnético, como esperado devido à fraca interação dos dois primeiros níveis da BC com os níveis excitados.

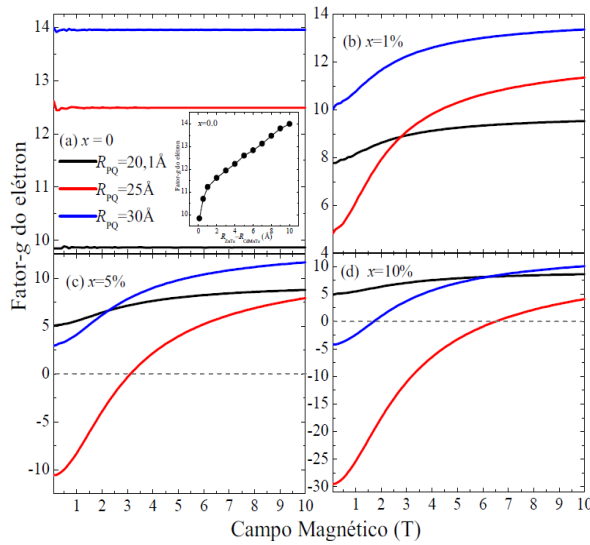


**Figura 2** – Campo magnético crítico em função da espessura da camada de ZnTe, Figura (a), e em função da concentração de manganês, Figura (b).



**Figura 3** – Zeeman splitting em função do campo magnético, para quatro valores de  $x$  e três valores do raio do ponto quântico, 20,1, 25 e  $30\text{\AA}$ , Figura (a), (b) e (c) respectivamente.

Ainda na Figura 4(a) o quadro menor mostra a dependência do fator-g em relação ao aumento da espessura do ZnTe, entre 0,1 e 10 Å, indicando um aumento do Zeeman como mostrado nos resultados da Figura 3, em linha preta ( $x=0$ ). Isso ocorre devido a diminuição do confinamento dos elétrons no caroço com a crescente penetração da função de onda na camada de ZnTe.

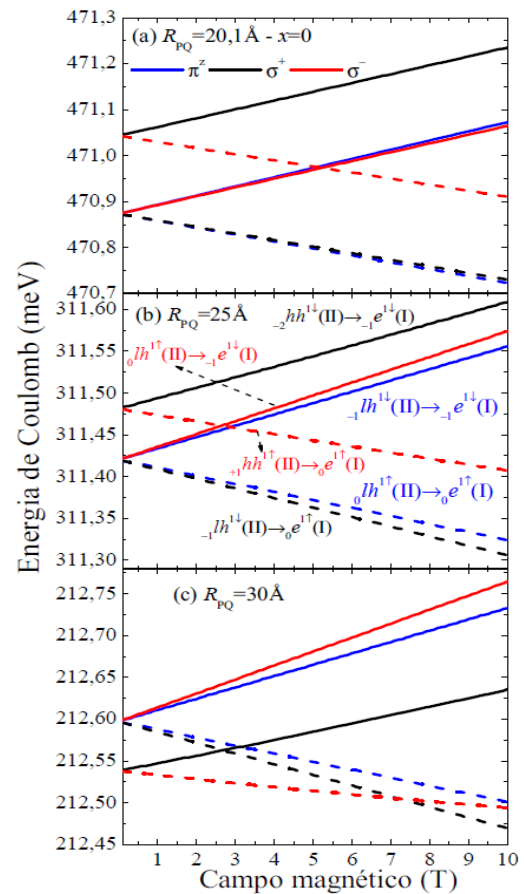


**Figura 4** – Fator-g da banda de condução em função do campo magnético, para  $x=0, 1, 5$  e  $10\%$ , Figuras (a), (b) e (c), respectivamente e três valores do raio do ponto quântico, 20,1, 25 e 30 Å.

Quando  $x$  aumenta de zero para 10% o fator-g muda de sinal, para determinados valores do  $R_{PQ}$  e do campo magnético, como pode ser visto na Figura 4. Essa mudança pode influenciar a discussão de várias propriedades físicas em PQs, tais como processos de defasagem do spin os quais são dependentes do fator-g (COGAN, 2018, HU, 2019) e a razão de relaxação do spin

intermediado por fônons (VAUGHAN, 2018, VARTANIAN, 2018).

As energias de Coulomb foram calculadas usando a equação (3) da ref. SEMINA2020. As energias dependem da polarização da luz incidente, a qual seleciona quais buracos podem acoplar com quais elétrons no espinor da equação (1).

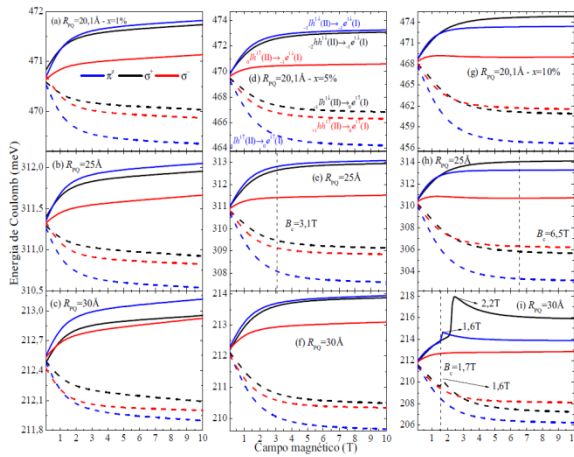


**Figura 5** – Energia de Coulomb em função do campo magnético, para  $x=0$ , raios dos PQs, 20,1, 25 e 30 Å, figuras (a), (b) e (c) respectivamente. As energias foram calculadas para luz incidente nas configurações  $\pi^z$ ,  $\sigma^+$  e  $\sigma^-$ .

Para a luz incidente na configuração Voigt,  $\pi^z$ , ocorrem os acoplamentos entre  $0lh^{1\uparrow}(II) \rightarrow 0e^{1\uparrow}(I)$  e  $-1lh^{1\downarrow}(II) \rightarrow -1e^{1\downarrow}(I)$ , na

luz incidente na configuração Faraday,  $\sigma^+$ ,  $-1lh^{1\downarrow}(\text{II}) \rightarrow 0e^{1\uparrow}(\text{I})$ ,  $-2hh^{1\downarrow}(\text{II}) \rightarrow -1e^{1\downarrow}(\text{I})$  e na  $\sigma^-$ ,  $+1hh^{1\uparrow}(\text{II}) \rightarrow 0e^{1\uparrow}(\text{I})$ ,  $0lh^{1\uparrow}(\text{II}) \rightarrow -1e^{1\downarrow}(\text{I})$ .

Quando a concentração de Mn é zero, Figura 5, a energia de troca é zero e como mencionado os dois primeiros níveis de energia da BC tem pouca influência dos demais níveis da BC, isso se reflete nas funções de onda usadas para calcular as energias de Coulomb, as quais são estados quase puros de spin.



**Figura 6** - Energias de Coulomb em função do campo magnético, calculadas para as configurações  $\pi^z$ ,  $\sigma^\pm$ . Os valores dos raios são 20,1, 25 e 30Å. As Figuras (a), (b) e (c) mostram os resultados para  $x=1\%$ , as figuras (d), (e) e (f) para  $x=2\%$  e as figuras (g), (h) e (i) para  $x=10\%$ .

A ordem das energias de Coulomb em  $B=0,1\text{T}$  é devido aos estados da BC serem degenerados na ausência de campo, por ex. os estados com  $M=0(\text{I}(\text{II}))$  e  $-1(\text{I}(\text{II}))$  tem a mesma energia, assim como  $M=+1(\text{I}(\text{II}))$  e  $-2(\text{I}(\text{II}))$ . Como esperado as energias diminuem com o aumento do  $R_{\text{PQ}}$ , pois diminui o confinamento espacial, com o

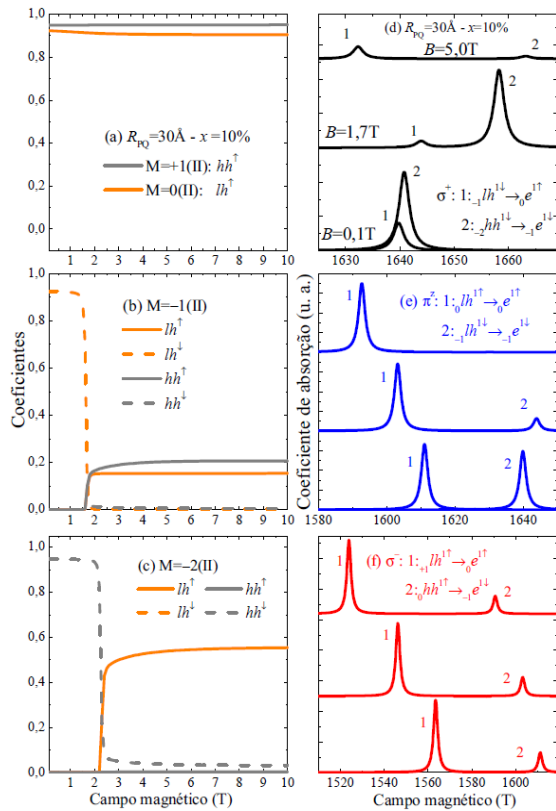
consequente aumento da penetração dos elétrons na camada de ZnTe, enquanto que os buracos ficam mais localizados no CdMnTe.

A diminuição da energia de Coulomb com o  $R_{\text{PQ}}$  também acontece para  $x=1, 5$  e  $10\%$ , Figura 6. A energia acompanha a saturação da magnetização, acima da qual se espera um significativo alinhamento dos íons magnéticos.

Na Figura 6(i), as energias de Coulomb referentes às transições  $-2hh^{1\downarrow}(\text{II}) \rightarrow -1e^{1\downarrow}(\text{I})$ ,  $-1lh^{1\downarrow}(\text{II}) \rightarrow 0e^{1\uparrow}(\text{I})$  para  $\sigma^+$  e  $-1lh^{1\downarrow}(\text{II}) \rightarrow -1e^{1\downarrow}(\text{I})$  para  $\pi^z$  apresentam um pico após o  $B_c$ , se desviando do comportamento dos demais resultados mostrados nesta Figura. Este pico está relacionado com a mudança no caráter dos níveis da BV destas transições, como pode ser visto nas Figuras 7(a), (b) e (c), que mostra os coeficientes  $C_{n,L}^m$  da equação (1) em função do campo magnético. Para  $M=0(\text{II})$  e  $+1(\text{II})$ , o caráter dominante do nível da BV é  $lh^\uparrow$  e  $hh^\uparrow$ , respectivamente, enquanto que para  $M=-1(\text{II})$  e  $-2(\text{II})$ , o caráter passa de  $lh^\downarrow$  para  $hh^\uparrow$  em  $B=1,6\text{T}$  e de  $hh^\downarrow$  para  $lh^\uparrow$  em  $B=2,2\text{T}$ , respectivamente. Os valores de campo onde ocorrem as trocas no caráter para  $M=-1$  e  $-2(\text{II})$  são os mesmo valores onde a energia de Coulomb tem o pico. Este efeito



acontece devido à combinação da interação dos íons magnéticos com os buracos junto com os efeitos do confinamento que leva a anti-cruzamentos entre os níveis da BV, pois níveis do mesmo subespaço não podem se cruzar, influenciando o caráter destes níveis.



**Figura 7** – Coeficientes dos níveis de energia de BV, para  $M=0, +1, -1$  e  $-2(II)$ , como função do campo magnético, Figuras (a), (b) e (c), para  $R_{PQ} = 30\text{Å}$  e  $x=10\%$ . Figuras (d), (e) e (f), coeficiente de magneto-absorção envolvendo os níveis da BV das Figuras (a), (b) e (c).

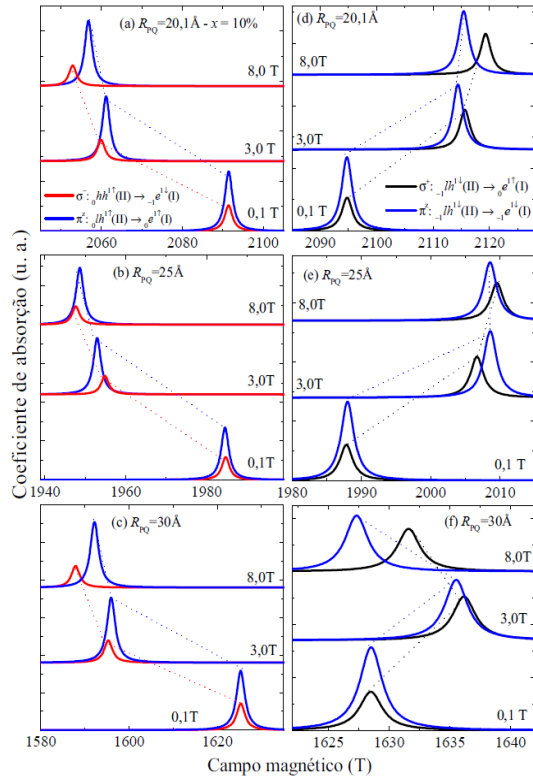
As Figuras 7(d), (e) e (f) mostram como o espectro de magneto-absorção, calculado usando a equação (4) pode ser usado para verificar as trocas de caráter dos níveis da BV e assim também confirmar os picos nas energias de Coulomb. Ao acompanhar as

transições 1 e 2 para  $\sigma^+$  e a transição 2 para  $\pi^z$  observa-se que elas praticamente desaparecem após o valor do campo magnético em que acontecem as trocas de caráter dos níveis da BV. Como comparação na Figura 7(f) tem-se o espectro de magneto-absorção para  $\sigma^-$  cujas transições não envolvem níveis da BV que apresentam troca de caráter e assim os dois picos mantém uma intensidade relativamente alta nos três valores de campo estudados.

O espectro de magneto-absorção da Figura 8 mostra como obter o fator-g, usando as configurações complementares da luz incidente,  $\sigma^-$  e  $\pi^z$ , Figuras (a), (b) e (c) e, nas Figuras (d), (e) e (f) usando as configurações complementares  $\sigma^+$  e  $\pi^z$ . Os resultados apresentados foram escolhidos para mostrar a troca de sinal do fator-g para o caso  $x=10\%$ .

Inicialmente para  $R_{PQ}=20,1\text{Å}$ , Figuras 8(a) e (d), não há troca de sinal e serve de comparação com os outros dois valores de  $R_{PQ}$ ,  $25\text{Å}$  e  $30\text{Å}$  onde a troca de sinal ocorre. As linhas tracejadas servem de guia para os olhos e permitem seguir os picos e observar a inversão destes quando o campo magnético é maior do que o campo crítico. Por exemplo, para  $R_{PQ}= 5\text{Å}$ , Figura 8(b) o pico vermelho passa a ter energia menor do

que o pico azul quando o campo passa de 3T para 8T, o  $B_c$  neste caso sendo de 6,5T. A mesma análise pode ser feita para os demais resultados.



**Figura 8** - Espectros de magneto-absorção óptica para  $x=10\%$ ,  $R_{PQ}=20,1, 25$  e  $30\text{Å}$ . As Figuras (a), (b) e (c) mostram os espectros para as configurações complementares,  $\sigma^-$  e  $\pi^z$  e as Figuras (d), (e) e (f) para as configurações complementares  $\sigma^+$  e  $\pi^z$ .

## CONCLUSÃO

Neste trabalho calculou-se a estrutura eletrônica de um PQ do tipo caroço-casca baseado em semicondutores magnético diluídos, no caso CdMnTe/ZnTe. O método teórico usado no estudo foi o **k.p**  $8 \times 8$  de Kane-Weiler, com campo magnético.

Com os níveis de energia calculados em função do campo magnético para

diferentes concentrações de manganês e diferentes espessuras da camada de ZnTe, estudei o Zeeman splitting, o fator-g e a energia de Coulomb do par elétron-buraco em função dos parâmetros mencionados.

Os resultados mostram que um ajuste fino dos parâmetros  $x$ ,  $R_{PQ}$  e do campo magnético, tornam possível o controle das propriedades magneto-ópticas, como o valor e o sinal do fator-g dos elétrons, além da energia de interação do par elétron-buraco.

Os espectros de magneto-absorção óptica calculados para a polarização da luz incidente nas configurações Faraday ( $\sigma^\pm$ ) e Voigt ( $\pi^z$ ), foram usados para 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.

É importante destacar que a física dos estados polarizados de spin, relacionada à busca por dispositivos spintrônicos, e o sucesso dos estudos que abordam a dinâmica do spin para a arquitetura de computação quântica, dependem de uma determinação precisa do fator-g de Landé e sua dependência de campos externos e confinamento espacial e neste caso de acordo com os resultados apresentados, também dependem da interação dos

elétrons com os íons de manganês. Espera-se que esta análise forneça novos insights sobre propriedades magnéticas e eletrônicas em nanoestruturas semicondutoras, contribuindo para as discussões de fenômenos relacionados ao spin em pontos quânticos semicondutores magnéticos diluídos.

## AGRADECIMENTOS

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

## REFERÊNCIAS

BALAKRISHNAN, A.; PERUMAL, N. Simultaneous effect of laser and magnetic field on bound magnetic polaron in type I and reverse type I core/shell semimagnetic nanostructures, **Physica E** 128, p. 114613, 2021.

CAO, F.; WANG, S.; WANG, F.; WU, Q.; ZHAO, D.; YANG, X. A Layer-by-Layer Growth Strategy for Large-Size InP/ZnSe/ZnS Core-Shell Quantum Dots Enabling High-Efficiency Light-Emitting Diodes, **Chemistry of Materials** 30, p. 8002-8007, 2018.

COGAN, D.; KENNETH, O.; LINDNER, N.; H.; PENIAKOV, G.; HOPFMANN, C.; DALACU, D.; POOLE, P., J.; HAWRYLAK, P.; GERSHONI, D. Depolarization of electronic spin qubits in semiconductor quantum dots, **P. Review X** 8, p. 041050, 2018.

FURDYNA, J., K., Diluted magnetic semiconductors, **J. Appl. Phys** 64, R29, 1988.

HU, R.; WU, Z.; ZHANG, T.; YAKOVLEV, D.; LIANG, P.; QIANG, G.; GUO, J.; JIA, T.; SUN, Z.; BAYER, M.; FENG, D. Long-lived negative photocharging in colloidal CdSe quantum dots revealed by coherent electron spin precession, *J. Phys. Chem. Lett.* 10, p. 4994-4999, 2019.

JI, B.; KOLEY, S.; SLOBODKIN, I.; REMENNIL, S.; BANIN, U. ZnSe/ZnS Core/Shell Quantum Dots with Superior Optical Properties through Thermodynamic Shell Growth, **Nano letters** 20, p. 2387-2395, 2020.

LIEN, Y., T., K.; TAN, P., M.; HOA, V., X.; CHI, T., T., K.; TRUONG, N., X.; OANH, V., T., K. Tunable photoluminescent Cu-doped CdS/ZnSe type-II core/shell quantum dots, **Journal of Luminescence** 215, p. 116627, 2019.

LÓPEZ, V., R.; PRADO, S. J.; MARQUES, G., E.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A., M.; Manipulation of g-factor in diluted magnetic semiconductor quantum dots: Optical switching control, **Applied Physics Letters** 88, p. 052101, 2006.

MING, N.; TAO, S.; YANG, W.; CHEN, Q.; SUN, R.; WANG, C.; WANG, S.; MAN, B.; HUANIAN, Z. Mode-locked Er-doped fiber laser based on PbS/CdS core/shell quantum dots as saturable absorber, **Optical express**, 26, n. 7, 2018.

PRADO, S. J. Fator-g em pontos quânticos duplos de CdTe/ZnTe, **Revista científica@Universitas**, v. 8, n. 1, p. 18-27, 2021.

PRADO, S. J. Study of the optical properties in charged quantum dots, **Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas** 41, p. 205-210, 2020.

PRADO, S., J.; MARQUES, G. E.; ALCALDE, A. M. Photovoltaic efficiency of intermediate band solar cells based on CdTe/CdMnTe quantum dots, **J. Phys. Condens. Matter** 29, p. 445301, 2017.

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

PRADO, S. J.; TRALLERO-GINER, C.; A. M.; LÓPEZ-RICHARD, V.; ALCALDE, MARQUES, G. E., Optical transitions in a single CdTe spherical quantum dot, **Physical review B** 68, p. 235327, 2003.

SELOPA, G., S.; ZHAO, H.; WANG, Z., M.; ROSEI, F. Core/shell quantum dots solar cells, **Adv. Funct. Mater** 30, p. 1908762, 2020.

ZHANG, P.; NORDEN, T.; PIENKA, J., M.; OSZWALDOWSKI, R.; NAJAFI, A.; BARMAN, B.; TSAI, Y.; FAN, W.; CHOU W.; HAN, J., E.; ZUTIC, I.; McCOMBE, B., D.; PETROU, A. Optical control of hole wavefunction in type-II magnetic quantum dot structures, **J. Phys. Chem. C** 123, p. 25934-25940, 2019.

VARTANIAN, A.; L.; KIRAKOSYAN, A., A.; VARDANYAN, K., A. Spin relaxation mediated by spin-orbit and acoustic phonon interactions in a single-electron two-dimensional quantum dot, **Superlattices and microstructures** 122, p. 548-556, 2018.

VAUGHAN, M.; RORISON, J., M. Model expressions for the spin-orbit interaction and phonon-mediated spin dynamics in quantum dots, **Semiconductor science and technology** 33, p. 014001, 2018.