

TRANSIÇÕES MAGNETO-ÓPTICAS EM UM ÚNICO PONTO QUÂNTICO SEMICONDUTOR MAGNÉTICO DILUÍDO

MAGNETO-OPTICAL TRANSITIONS IN A SINGLE DILUTED MAGNETIC SEMICONDUCTOR QUANTUM DOT

Silvio José Prado

Universidade Federal de Uberlândia, Faculdade de Ciências Integradas do Pontal
Avenida José João Dib, 2.545 Bairro Progresso, CEP: 38302-000 Ituiutaba, MG
E-mail: sprado@pontal.ufu.br

RESUMO

Neste trabalho explorou-se como a interação de troca afeta a estrutura eletrônica de um ponto quântico semiconductor magnético diluído e, conseqüentemente, o espectro de magneto-absorção e o fator-g. O modelo utilizado para realizar o cálculo se baseou no Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$ 8×8 de Kane, o qual leva em consideração a forte mistura entre as bandas de condução e de valência, assim como permite estudar o conjunto de simetrias associadas com estes estados eletrônicos e os efeitos de campo magnético. Os resultados obtidos são para um ponto quântico semi-esférico de $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$.

Palavras-chave: Ponto quântico magnético diluído, interação de troca, Hamiltoniano $\mathbf{k.p}$, magneto-absorção, fator-g.

ABSTRACT

In this work it was explored how the exchange interaction affects the electronic structure of diluted magnetic semiconductor quantum dot and hence the magneto-absorption spectrum and the g -factor. The model used to perform the calculation was based on 8×8 $\mathbf{k.p}$ Kane Hamiltonian, allowing the inclusion of the conduction-valence-band coupling, and allows to study the set of symmetries associated with these electronic states and effects magnetic field. The results presented here are for a semi-spherical quantum dot of $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$.

Keywords: diluted magnetic semiconductor quantum dot, exchange interaction, $\mathbf{k.p}$ Hamiltonian, magneto-absorption, g -factor.

1 – INTRODUÇÃO

O interesse em fenômenos relacionados com o *spin* tem crescido devido às possíveis aplicações em *spintrônica* e em dispositivos de processamento de informações. Pontos quânticos semicondutores magnéticos diluídos (PQSDM) são materiais muito promissores para o desenvolvimento destes dispositivos, uma vez que suas propriedades ópticas, eletrônicas e de transporte podem ser controladas ou manipuladas pela aplicação de campos externos. Assim, a interação de troca, responsável pelas propriedades magnéticas do sistema, pode ser alterada por uma voltagem aplicada ou por excitações ópticas, usando luz com diversas polarizações. Para o desenvolvimento de dispositivos baseados em heteroestruturas semicondutoras magnéticas diluídas, o conhecimento de parâmetros básicos tais como a massa efetiva e o fator-g tornam-se necessários (PRADO *et al.*, 2003a).

Neste contexto a incorporação de íons metálicos como Mn^{2+} em heteroestruturas durante o processo de crescimento usando MBE (*Molecular Beam Epitaxy*) abriu novas possibilidades para a "engenharia de *spin-splitting*", onde, além do campo magnético, da temperatura, e da fração molar do manganês (*Mn*), também a energia de confinamento e a magnitude da quantização podem ser exploradas como uma forma de ajuste efetivo do *spin-splitting* (ESTANISLAU, BITTENCOURT e MARQUES, 2004). Com base neste conjunto de variáveis, estudou-se

como a manipulação do Zeeman *splitting* dos estados de *spin* alteram o fator-g e a magneto-absorção, a qual está relacionada com a polarização da luz incidente (configurações Faraday e Voigt).

Neste trabalho teórico utilizou-se o *Hamiltoniano* de Kane 8×8 para descrever a mistura entre os estados da banda de condução e de valência, os efeitos do campo magnético e da interação de troca em um PQSDM com geometria semi-esférica (PRADO *et al.*, 2003b).

2 – A INTERAÇÃO DE TROCA

O *Hamiltoniano* $\mathbf{k.p}$, com e sem campo magnético, está bem descrito em Prado *et al.*, 2003a e Prado *et al.*, 2003b. Sendo assim, passou-se a descrever com mais detalhes como tratar a interação de troca no modelo $\mathbf{k.p}$. Essa interação pode ser escrita da seguinte forma:

$$H_{troca} = - \sum_{\{R_j\}} J(\vec{r} - \vec{R}_j) \vec{\sigma} \cdot \vec{S}_j, \quad (1)$$

Está-se interessado nas propriedades dos elétrons móveis na vizinhança do ponto Γ na zona de Brillouin.

Na aproximação de cristal virtual e de campo médio, o Hamiltoniano (1) que descreve a interação antiferromagnética entre os *spins* dos elétrons (\vec{S}_j), da camada $3d$ dos íons de Mn^{2+} em uma posição R_j da rede,

com os *spins* da banda de condução ou de valência ($\vec{\sigma}$) pode ser escrito como:

$$H_{troca} = -x \langle S_z(B, T, x) \rangle (N_0 \alpha) s_z, \quad (2)$$

Onde $\langle S_z(B, T, x) \rangle$ é a magnetização a uma temperatura T, em uma amostra com N_0 células unitárias e $N_0 \alpha \left(\langle e | \sum_{\{\vec{R}_j\}} J_{troca}(\vec{r} - \vec{R}_j) | e \rangle \right)$ é a constante de troca uniforme, entre os estados-*s* de Bloch da banda de condução. Para os estados da banda de valência-*p* tem-se de forma semelhante, uma constante de troca $N_0 \beta$ (FURDYNA, 1982).

O Hamiltoniano de troca (2) pode ser escrito na forma do Hamiltoniano \mathbf{k}, \mathbf{p} como:

$$H_{Troca} = \begin{matrix} \begin{matrix} e\uparrow & hh\uparrow & lh\uparrow & so\uparrow & e\downarrow & hh\downarrow & lh\downarrow & so\downarrow \end{matrix} \\ \left[\begin{array}{cccccccc} a & & & & & & & \\ & b & & & & & & \\ & & c & d & & & & \\ & & d & c & & & & \\ & & & & -a & & & \\ & & & & & -b & & \\ & & & & & & -c & -d \\ & & & & & & -d & -c \end{array} \right], \end{matrix} \quad (3)$$

Onde os elementos de matriz são dados por:

$$\begin{aligned} a &= \frac{xN_0\alpha}{2} \langle S_z \rangle, & b &= \frac{xN_0\beta}{2} \langle S_z \rangle, \\ c &= \frac{xN_0\beta}{6} \langle S_z \rangle, & d &= \frac{-\sqrt{2}xN_0\beta}{3} \langle S_z \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

Além disso, o trabalho foi desenvolvido no regime de campo magnético fraco, ou seja, $\lambda > R$ (sendo $\lambda^2 = c\hbar/B$, onde B é o campo magnético e R o raio do ponto quântico) e considerando o par elétron-buraco desacoplado, sendo o raio de Bohr do éxciton maior do que R .

3 – CÁLCULO DA ESTRUTURA ELETRÔNICA

O cálculo da estrutura eletrônica foi feito para um ponto quântico semi-esférico de raio R submetido a um campo magnético, assumido um modelo de barreira de potencial infinita. Neste caso a função de onda dos elétrons e buracos foi escrita em termos da solução exata dos operadores da diagonal do Hamiltoniano para $B=0$. Em geral, cada componente do *espinor* tem oito termos que formam a base e foram escritos como $f_{n,L}^M(r, \Omega) = A_{n,L} j_L(\mu_n^L r/R) Y_L^M(\Omega)$, onde $A_{n,L}$ é a constante

de normalização da função de Bessel esférica, $j_L(x)$ e $Y_L^M(\Omega)$ são os harmônicos esféricos (PRADO¹, 2003).

Para tratar o PQMD semi-esférico aplico a condição de contorno: $\Psi_H(r \leq R, \theta = \pi/2, \varphi) = 0$, a qual restringe os valores dos números L e M para: $|L - M| = \text{número ímpar}$ (PRADO *et al.*, 2004). Essas condições asseguram que todos os portadores permaneçam dentro da região semi-esférica, para todos os valores de φ .

Os estados pertencentes aos subespaços I (II) são construídos como:

$$|\psi_{I(II)}^M\rangle = \sum_n \sum_{L \geq M} \begin{pmatrix} f_{n,2L(2L+1)}^M |e^+\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^{M-1} |hh^+\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^M |lh^+\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^M |so^+\rangle \\ f_{n,2L(2L+1)}^{M+1} |e^-\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^{M+2} |hh^-\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^{M+1} |lh^-\rangle \\ f_{n,2L+1(2L)}^{M+1} |so^-\rangle \end{pmatrix} \quad (5)$$

Com $M=1,3,5,\dots$, para o subespaço I ($M=0,2,4,\dots$, para o subespaço II).

Usando o eixo z, no qual está aplicado o campo magnético, como o próprio eixo de quantização das funções de Bloch, $|u_\alpha\rangle$, determinaram-se as regras de seleção ópticas para as transições interbanda no sistema.

Existem duas configurações independentes, de acordo com o vetor de onda da luz incidente: (i) Faraday, quando $\hat{k} \parallel \mathbf{B} \parallel \hat{e}_z$ e (ii) Voigt, quando $\hat{k} \perp \mathbf{B} \perp \hat{e}_z$. Da paridade dos componentes dos *espinores* $\psi_{I(II)}^M$, tem-se que os elementos da matriz de dipolo entre os mesmos subespaços de Hilbert I(II) terão valor “zero”. Assim, para a polarização circular da luz incidente \hat{e}^\pm (geometria Faraday $\hat{\sigma}^\pm$) e linear \hat{e}_z (geometria Voigt π^z), somente transições ente estados iniciais $M_i(H_i)$ e finais $M_f(H_f)$ pertencentes a subespaços de Hilbert diferentes $H_{i,f} = I, II$ são permitidos. As regras de seleção não permitem transições entre os mesmos subespaços de Hilbert, devido às simetrias diferentes entre os momentos angulares dos elétrons e dos buracos. Além disso, o número quântico M deve satisfazer as seguintes condições: $\Delta M = \pm 1$ e $\Delta M = 0$ para as configurações Faraday e Voigt, respectivamente.

4 – RESULTADOS

As Figuras 1(a) e 1(b) mostram os espectros de energia para os pontos quânticos semi-esféricos magnético diluídos de $Cd_{1-x}Mn_xTe$, plotados como função do campo magnético, para alguns valores da concentração x de manganês. A figura 1(a) é para um PQ de raio 30 Å e a figura 1(b) para um PQ de raio 50Å.

Todos os níveis mostrados pertencem ao subespaço I, sendo os estados com *spin up* (*down*) aqueles cujas energias decrescem com o campo magnético (crescem com o campo magnético). Como primeira característica desses espectros podem-se observar os cruzamentos entre os dois primeiros níveis da banda de condução, mostrando a existência de um campo magnético crítico B_c , no qual para um sistema de um elétron, o nível de quasi-Fermi sofre uma transição com inversão de *spin*. Esta propriedade pode ser explorada em dispositivos que funcionam como portas ópticas. O sistema pode seletivamente filtrar ou emitir, se excitado corretamente, luz com duas diferentes e bem definidas frequências de ressonância, ω_1 e ω_2 , que correspondem as energias de excitação do par elétron-buraco, isto ocorre para duas polarizações diferentes da luz incidente, \hat{e}_1 e \hat{e}_2 . Outra característica mostrada nas Figuras 1(a) e 1(b) é que quanto maior a concentração x , maior o campo magnético onde ocorrem os cruzamentos. Nessas figuras não aparecem anti-cruzamentos, pois estes ocorrem entre estados pertencentes ao mesmo subespaço e construído com um mesmo valor de M , por exemplo, para o subespaço I com $M=1$, o estado elétron-*up*, na equação (5) tem os seguintes números quânticos $L=2$ e $M=1$, já o estado elétron-*down*, tem $L=2$ e $M=2$, este estado se anti-cruza com o estado com *spin-up* (mencionado acima), entretanto, este anti-cruzamento ocorre para uma energia maior da que a mostrada na Figura 1.

O tamanho do ponto quântico influencia aumentando ligeiramente o valor de B_c para os mesmos valores de concentração de íons de manganês, como se pode observar na Figura 2.

A Figura 3 mostra o fator giromagnético – fator- g – da banda de condução para os dois tamanhos de PQ mencionados e para os mesmos valores de x da Figura 1. Nesta figura observa-se a inversão no sinal do fator- g , o qual é definido como $g_e \mu_B B = E(e^{\uparrow}, 1/2, N) - E(e^{\downarrow}, -1/2, N)$, com μ_B sendo o magnéton de Bohr e $E(e^{\uparrow(\downarrow)}, \pm 1/2, N)$ é a energia dos níveis com *spin up* e *down*, mostrados na Figura 1. O fator- g tem valor zero, no campo magnético crítico, ou seja onde os níveis de energia se cruzam.

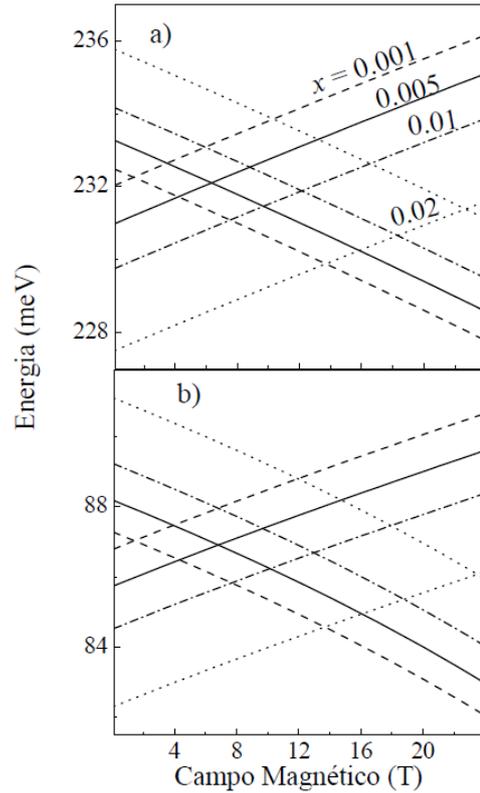


Figura 1 – Espectro de energia dos elétrons para um ponto quântico semi-esférico SMD de $Cd_{1-x}Mn_xTe$, (a) $R = 30\text{Å}$ e (b) $R = 50\text{Å}$ plotado em função do campo magnético para alguns valores da concentração x . Todos os níveis pertencem ao subespaço I.

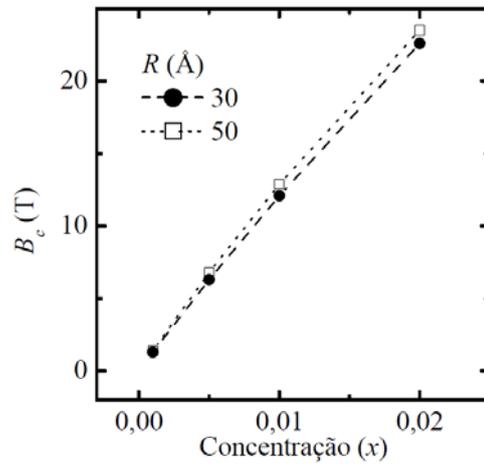


Figura 2 – Campo magnético crítico como função da concentração x de íons de manganês, para pontos quânticos semi-esféricos SMD's de raios 30Å e 50Å.

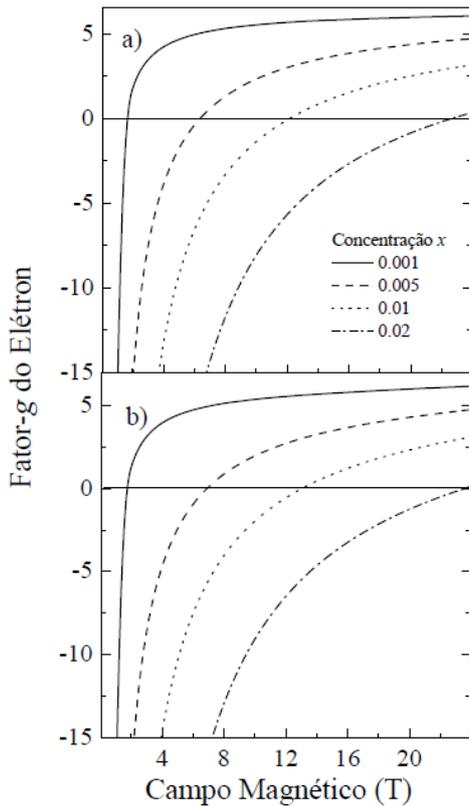


Figura 3 – Fator-g para a banda de condução plotado em função do campo magnético, para pontos quânticos de raios, (a) 30Å e (b) 50Å.

A Figura 4 mostra a absorção magneto-óptica interbanda para a polarização da luz incidente σ^- , que, como mencionado anteriormente, pode funcionar como chaveador óptico controlado externamente, explorando as transições com inversão de *spin* em um $B = B_c$. Os valores que caracterizam os regimes de chaveamento óptico são: $\omega_1 - \omega_2$ e B_c . Esses valores são sensíveis a concentração (x) e a temperatura.

Como pode ser visto nas Figuras 4 e 5, $\omega_1(B)$ e $\omega_2(B)$ variam ligeiramente com o campo magnético e ambas as forças do oscilador, relacionadas com a intensidade das transições permanecem quase constantes para uma variação relativamente grande de campos magnéticos. No campo crítico, o valor de $\omega_1(B_c) - \omega_2(B_c)$ é determinado pela distância entre os estados, inicial da banda de valência e final da banda de condução, envolvidos nestas duas transições. Um controle preciso dessas características é essencial para reduzir a taxa de relaxação intrabanda e realçar o desempenho do dispositivo (IMAMOGLU *et al.*, 1999).

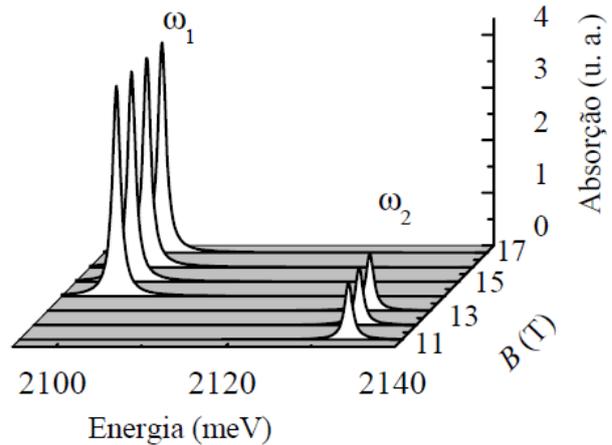


Figura 4 - Espectro de absorção interbanda para polarização σ^- em $B < B_c(\omega_2)$ e $B > B_c(\omega_1)$ para um PQSMD semi-esférico de raio 30Å e $x = 0,04$.

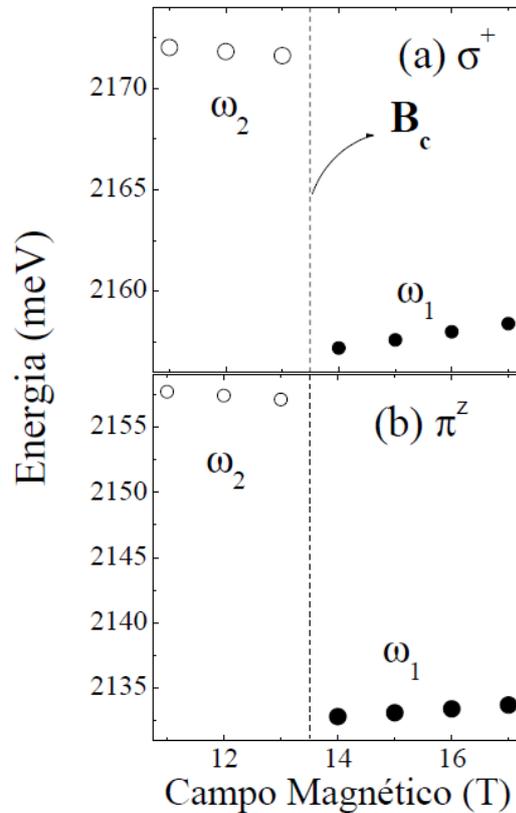


Figura 5 – O mesmo que para a Figura 4 para (a) σ^+ e (b) π^z .

5 – CONCLUSÕES

Neste trabalho calculou-se a estrutura eletrônica de um ponto quântico semiconductor magnético diluído com geometria semi-esférica, na presença de campo magnético. Para realizar o cálculo utilizou-se o *Hamiltoniano* \mathbf{k}, \mathbf{p} de oito bandas. Os resultados mostram um cruzamento entre os níveis de energia mais baixos da banda de condução, o que leva a transições interbanda com inversão de *spin*, ou seja, o campo magnético age como um comutador, agindo entre dois regimes: $B < B_c$ e $B > B_c$. O controle preciso do campo e da concentração de Mn permite a sintonia do

regime de operação desejado. A porta óptica pode ser selecionada por meio da combinação de quatro parâmetros: frequências de ressonância ω_i e da polarização \hat{e}_i ($i=1,2$).

REFERÊNCIAS

ESTANISLAU, J. F., BITTENCOURT, A. C. R. e MARQUES, G. E. **Exchange induced Zeeman splitting in resonant tunnelling diodes**, Physics Status Solidi B, 241 (3), p. 708-711, 2004.

FURDYNA, J. K. **A piezomodulation study of the absorption edge and Mn²⁺ internal transitions in Cd_{1-x}Mn_xTe, a prototype of diluted magnetic semiconductors**. Journal of Applied Physics, Vol. 53, p. 7637, 1982.

PRADO, S. J., TRALLERO-GINER, C., ALCALDE, A. M., LÓPEZ-RICHARD, V. e MARQUES, G. E. **Optical transitions in a single CdTe spherical quantum dot**, Physical Review B, Vol. 68, p. 235327-1-1235327-9, 2003a.

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

PRADO, S. J., TRALLERO-GINER, C., LÓPEZ-RICHARD, V., ALCALDE, A. M. e MARQUES, G. E. **Zeeman effect and magnetic anomalies in narrow-gap semiconductor dots**, Physica E, Vol. 20, p. 286, 2004.

IMAMOGLU, A., AWSCHALOM, D. D., BUCKARD, G., DIVINCENZO, D. P., LOSS, D., SHERWIN, M., SMALL, A. **Quantum information processing using quantum dot spins and cavity QED**, Physical Review Letters, vol. 83, p. 4204, 1999.