

# Absorção-Óptica Intrabanda em um Ponto Quântico Parabólico com Acoplamento Spin-Órbita Rashba

## Intraband Optical-Absorption in a Single Parabolic Quantum Dot with Spin-Orbit Rashba Coupling

Silvio José Prado

Faculdade de Ciências Integradas do Pontal - FACIP - UFU, Ituiutaba, MG

*sprado@pontal.ufu.br*

**Resumo:** Neste trabalho estuda-se teoricamente como o efeito da interação spin-órbita tipo Rashba afeta os níveis de energia da banda de condução e, consequentemente, as transições ópticas intrabanda, em um ponto quântico semiconductor com potencial parabólico na presença de um campo magnético externo. Os níveis de energia foram calculados usando Hamiltoniano  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$   $2 \times 2$ , o qual permite estudar o conjunto de simetrias associadas com esses estados eletrônicos e os efeitos de campo magnético. Os resultados obtidos são para um ponto quântico de Arseneto de Índio e mostram que a interação spin-órbita afeta os níveis de energia e, consequentemente, o espectro de absorção intrabanda.

**Palavras-chave:** absorção óptica; campo magnético; ponto quântico; Rashba; spin-órbita.

**Abstract:** In this work it is studied theoretically how the effect of Rashba spin-orbit interaction affects the energy levels of the conduction band and, therefore, the intraband optical transitions in a quantum dot semiconductor with parabolic potential in the presence of an external magnetic field. The energy levels are calculated using  $2 \times 2$   $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  Hamiltonian, which allows studying the set of symmetries associated with these electronic states and the effects of magnetic field. The results are for a quantum dot Indium Arsenide and show that the spin-orbit interaction affects the energy levels and hence the intraband absorption spectrum.

Recebido em 23/05/2013 - Aceito em 01/07/2013.

RECEN 15(1) p. 51-60 jan/jun 2013 DOI: 10.5935/RECEN.2013.01.03

**Key words:** magnetic field; optical-absorption; quantum dot; Rashba; spin-orbit.

## 1 Introdução

A capacidade de controlar a dinâmica de estados quânticos coerentes (qubits) é um passo fundamental em direção ao desenvolvimento dos computadores quânticos. O spin dos portadores de carga em estruturas semicondutoras de baixa-dimensão é considerado um ótimo candidato para viabilizar os qubits, desde que a quantização do movimento dos portadores iniba a relaxação do spin e os processos de decoerência, tornando os estados de spin coerentes em uma escala de tempo maior que nanossegundos [1]. O objetivo da spintrônica ou eletrônica de spins polarizados em nanoestruturas de semicondutores, que podem ser pontos quânticos isolados ou interagindo formando moléculas [2], é usar as propriedades eletrônicas e ópticas dessas estruturas para controlar externamente a dinâmica de spins e, portanto, executar operações com qubits. Uma técnica de manipulação do spin está baseada no acoplamento spin-órbita (SO) tipo Rashba, que pode aparecer devido à assimetria da inversão estrutural criando um campo elétrico local perpendicular ao plano do elétron. Além disso, o campo magnético afeta as propriedades magneto-ópticas em pontos quânticos [3], e a combinação deste com a interação SO leva a interessantes características nas transições ópticas, que podem ser manipuladas por meio de campos externos como magnético e elétrico, sendo que este último está associado com a interação SO tipo Rashba.

O presente artigo tem como objetivo entender como a absorção óptica na banda de condução de um ponto quântico com potencial parabólico e interação SO se modifica em comparação com o caso sem interação SO.

## 2 Teoria

O sistema investigado neste trabalho consiste de um ponto quântico de Arseneto de Índio (InAs) submetido a um campo magnético externo aplicado ao longo do eixo  $z$ . O potencial de confinamento lateral usado foi o parabólico, com energia  $E_0$  ( $\hbar\omega_0$ )

[4] e para o confinamento na direção-z foi usado um potencial infinito. Dessa forma, o Hamiltoniano completo para um elétron confinado no PQ tem a seguinte forma,

$$H = \frac{1}{2m^*}(\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})^2 + \frac{1}{2}m^*\omega_0^2\rho^2 + \frac{1}{\hbar}[\vec{\sigma} \times (\vec{p} - \frac{e}{c}\vec{A})]_z + \frac{1}{2}g\mu_B B\sigma_z \quad (1)$$

Aqui,  $\vec{\sigma}$  é o vetor das matrizes de Pauli,  $\vec{A}$  é o vetor potencial no gauge simétrico,  $\vec{A} = \frac{B}{2}( -y, x, 0)$ , que corresponde a um campo magnético externo aplicado perpendicularmente ao plano de movimento dos elétrons. O segundo termo corresponde a um potencial de confinamento harmônico. O terceiro termo,  $1/\hbar[\vec{\sigma} \times (\vec{p} - e\vec{A}/c)]_z$  corresponde à interação spin-órbita tipo Rashba, que pode ser escrita como  $i/\hbar(\sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y})$ . O parâmetro de Rashba,  $\lambda$ , determina a intensidade da interação. O quarto termo,  $1/2g\mu_B B\sigma_z$  é o acoplamento Zeeman, onde  $g$  é o fator de Landé e  $\sigma_z$  é a projeção do spin do elétron no eixo-z ( $\sigma_z = 1/2, -1/2$ ).

Podemos escrever o Hamiltoniano (1) na forma matricial,

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*}\hat{p}^2 & \hat{P} \\ \hat{P}_+ & \frac{\hbar^2}{2m^*}\hat{p}^2 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Nela, os operadores  $\hat{P}_\pm$  e  $\hat{p}^2$  são definidos como  $\hat{P}_\pm = (\frac{\partial}{\partial x} \pm i\frac{\partial}{\partial y})$  e  $\hat{p}^2 = \nabla^2$ . A interação SO tipo Rashba introduz os termos fora da diagonal no Hamiltoniano (2), ou seja, acopla os estados do elétron com spin *up(down)* e *down (up)*, o que não acontece no caso sem a interação SO.

A simetria inerente no Hamiltoniano  $\mathbf{k.p}$  permite a separação do espaço de Hilbert em dois subespaços ortogonais. As funções de onda são expandidas em espinores de duas componentes em cada subespaço de Hilbert, em termo das soluções exatas dos termos da diagonal para os elétrons. Cada componente espinor tem a forma[5]

$$f_n^l(r, \varphi) = \frac{1}{\lambda} \left( \frac{[n+l+1]}{2^{l+1}n!([l+1]^2\pi)} \right)^{\frac{1}{2}} e^{i/l\varphi} e^{-\frac{1}{4}(\frac{r}{\lambda})^2} \left( \frac{r}{\lambda} \right)_1^l F_1 \left( n, l+1, \frac{1}{2} \left( \frac{r}{\lambda} \right)^2 \right), \quad (3)$$

onde  $r$  e  $\varphi$  são coordenadas polares,  ${}_1F_1$  é a função hipergeométrica confluyente,  $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m^*\omega}}$  com  $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$ ,  $\omega_c$  é a frequência ciclotrônica,  $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ;  $l = \dots, -1, 0, 1, \dots$ . As funções de onda  $\Psi_{I(II)}$  para cada subespaço I e II são escritas

como

$$|\Psi_n^l I(II)\rangle = \sum_{n,l} \left( \begin{array}{c} C_n^{l(l-1)} f_n^{l(l-1)} |e \uparrow\rangle \\ C_n^{l+1(l)} f_n^{l+1(l)} |e \downarrow\rangle \end{array} \right) \quad (4)$$

em que  $C_n^l$  são constantes a serem determinadas.

Devido à interação SO, um bom número quântico para indexar os níveis de energia está relacionado ao momento angular total  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ , onde  $\vec{L}$  é o momento angular orbital e  $\vec{S}$  é o momento angular de spin. A quantidade conservada é

$$j = l \uparrow \downarrow + s \uparrow \downarrow, \quad (5)$$

Nela  $s_z = \pm \frac{1}{2}$  dependendo da componente do espinor (4),  $+\frac{1}{2}$  para a componente superior  $\frac{1}{2}$  e para a inferior [6].

Na ausência da interação SO as transições ópticas intrabanda, permitidas pela regra de seleção de dipolo, são sempre entre estados de mesmo spin, e para transições com luz polarizada circularmente ( $\sigma^\pm$ ), como foi calculado por Lópes-Richard et al. [7], a diferença entre o momento angular entre o estado final e inicial deve ser igual a  $\Delta l = \pm 1$ . Na presença da interação SO há uma mistura nos valores do momento angular,  $l$ , e do momento angular de spin, como discutido por Pietiläinen e Chakraborty [6], e as regras de seleção são calculadas com relação ao momento angular total  $\vec{J}$ , permitindo transições entre estados com spins diferentes.

### 3 Resultados

A massa efetiva do elétron no InAs é  $m_e = 0,024m^*$  [5], onde  $m^*$  é a massa do elétron livre. A energia de confinamento lateral usada neste trabalho é de  $E_0 = 15meV$ . Neste caso, o raio do ponto quântico é de aproximadamente  $88\text{Å}$ , pois o diâmetro é dado por  $d = \sqrt{\frac{\hbar^2}{m^*E_0}}$  [1].

Na figura 1a), os níveis indexados pelos números, 0, 1, 2, 3, 4 e 5, têm os seguintes valores de  $j$  em  $B = 0T$ ; 0:  $\frac{1}{2}$  (spin= $\downarrow$ ); 1:  $\frac{1}{2}$  ( $\uparrow$ ); 2:  $\frac{1}{2}$  ( $\downarrow$ ); 3:  $\frac{1}{2}$  ( $\uparrow$ ); 4:  $\frac{3}{2}$  ( $\downarrow$ ) e 5:  $\frac{3}{2}$  ( $\uparrow$ ).

Observando os níveis 1 e 2, os quais tem o mesmo valor do momento angular total  $j = \frac{1}{2}$ , nota-se que para  $\alpha = 0$ , estes se cruzam, figura 1a) e nas figuras b), c) e d) à medida que o parâmetro de interação SO Rashba aumenta há uma repulsão

(anti-cruzamento) entre os níveis produzindo um mini-gap de energia ( $E_{SO}$ ). Esta repulsão surge da mistura destes estados devido à interação SO.

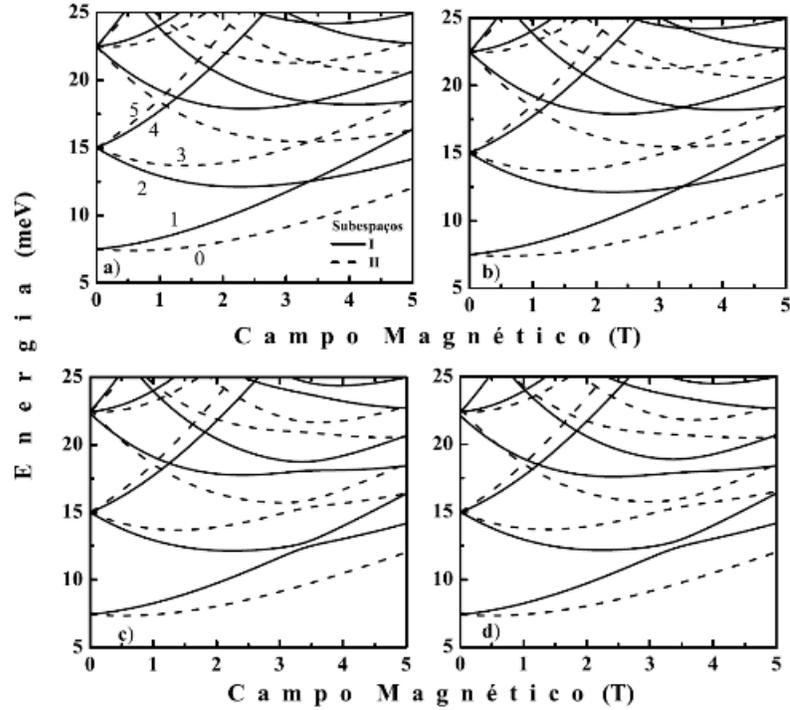


Figura 1. Níveis de energia dos elétrons na banda de condução como função do campo magnético para um ponto quântico com  $E_0 = 15 \text{ meV}$  e interação SO Rashba. Os valores de  $\alpha$ , a constante de acoplamento SO Rashba são os seguintes, a)  $0 \text{ meV.nm}$ , b)  $10 \text{ meV.nm}$ , c)  $20 \text{ meV.nm}$  e d)  $30 \text{ meV.nm}$

A figura 2 é uma ampliação da figura 1, na qual compara-se o espectro sem o acoplamento SO da figura 2a), os espectros b), c) e d), que exibem quebra da degenerescência em campo magnético zero, rearranjo de alguns níveis em campo baixo (entre 0 e 0,1T) e repulsão em campos altos (entre 3 e 4T), efeitos produzidos pela interação SO. Na figura 1a) sem acoplamento SO os níveis de energia são degenerados em  $B = 0\text{T}$ . Nas figuras 1b) a 1d) a degenerescência é quebrada e o níveis 2 e 5 se separam dos níveis 3 e 4, quanto maior a constante de acoplamento SO maior a separação, como mostrado nas figuras 2b) a 2d). Isto ocorre devido ao efeito do aco-

plamento SO ser maior para o nível 4 que tem momento angular maior que o nível 3.

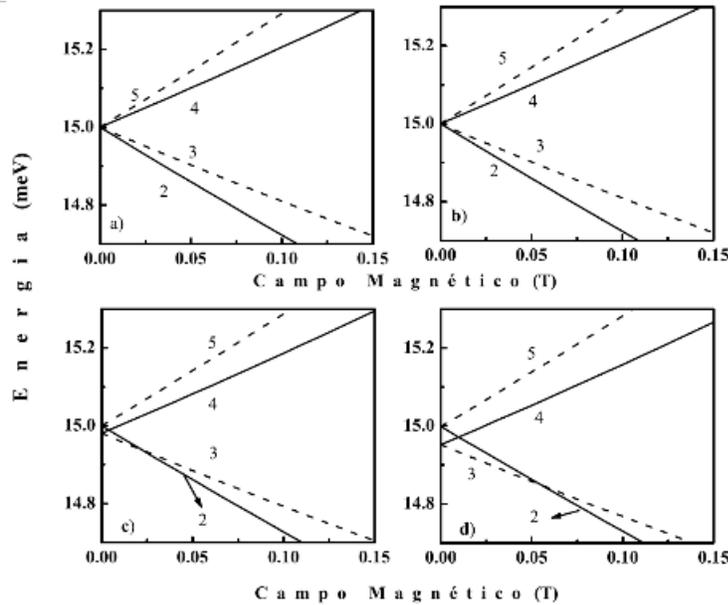


Figura 2. Ampliação da figura 1 para valores baixos do campo magnético, destacando a quebra da degenerescência e o reordenamento dos níveis de energia

A figura 3 mostra como a energia do mini-gap entre os níveis 1 e 2 da figura 1 evoluem com o parâmetro de acoplamento  $\alpha$ . À medida que  $\alpha$  aumenta a repulsão entre os níveis também aumenta, devido ao maior acoplamento SO.

Nas figuras 4, 5, 6 e 7 temos o espectro de absorção-óptica intrabanda como função do campo magnético para diferentes valores de  $\alpha$ .

As transições permitidas,  $0 \rightarrow 1$  e  $0 \rightarrow 2$  correspondem à polarização circular  $\sigma^+$  da luz incidente e a transição  $0 \rightarrow 4$  correspondente à polarização circular  $\sigma^-$ . Na figura 4a)  $\alpha = 0$  e as transições do nível fundamental 0 para os níveis 1 e 2 se cruzam, pois não há a formação do mini-gap. A figura 4b) mostra a força do oscilador, que está relacionado com a intensidade das transições ópticas. Os resultados mostram que todas as transições têm a mesma intensidade. Nas figuras 5, 6 e 7, o parâmetro varia, levando ao aparecimento do mini-gap, relativo as transições  $0 \rightarrow 1$  e  $0 \rightarrow 2$ , e

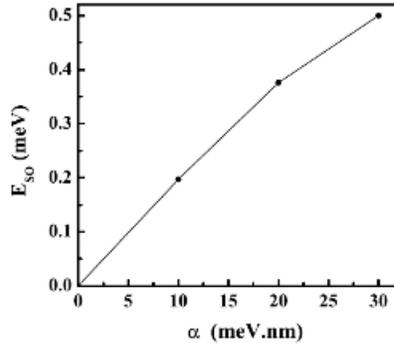


Figura 3. Mini-gap de energia entre os níveis 1 e 2 da figura 1 como função do parâmetro de acoplamento SO Rashba

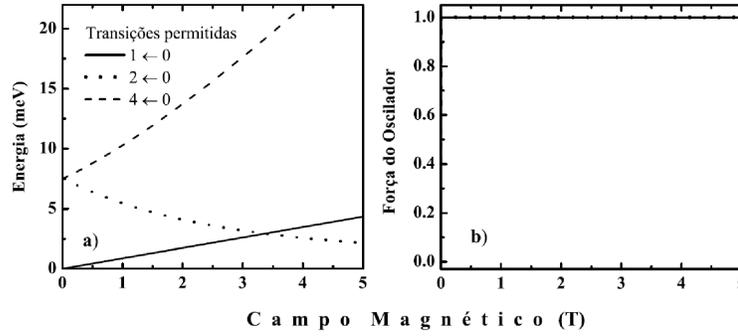


Figura 4. a) Espectro das energias de transição óptica intrabanda para elétrons confinados em um ponto quântico de InAs para  $\alpha = 0$ . b) Força do oscilador para as transições da figura a)

quanto maior o valor de  $\alpha$ , ou seja maior o acoplamento SO, maior o mini-gap.

A força do oscilador dessas figuras apresenta um cruzamento na intensidade, para as transições onde ocorre o mini-gap. Isto acontece devido à troca de caráter dos estados do espinor da equação (4) pela existência do acoplamento spin-órbita. Como o nível de energia 4 (Figura 1a) não se acopla a nenhum outro, a força do oscilador não se altera.

A figura 8 é uma ampliação das figuras 4, 5, 6 e 7 das transições  $0 \rightarrow 2$  e  $0 \rightarrow 4$  para luz com polarização  $\sigma^+$  e  $\sigma^-$ , respectivamente. Quando o acoplamento SO está presente, figuras 5, 6 e 7, as referidas energias de transição se cruzam em valores baixos

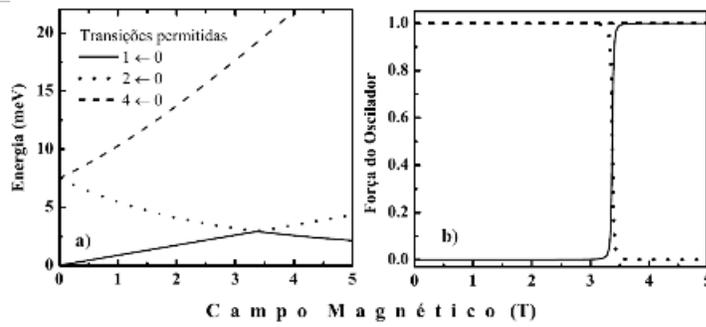


Figura 5. O mesmo da figura 4, com  $\gamma = 10 \text{ meV.nm}$

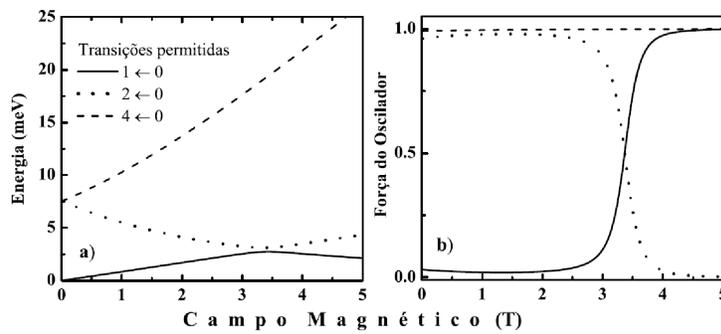


Figura 6. O mesmo da figura 4, com  $\gamma = 20 \text{ meV.nm}$

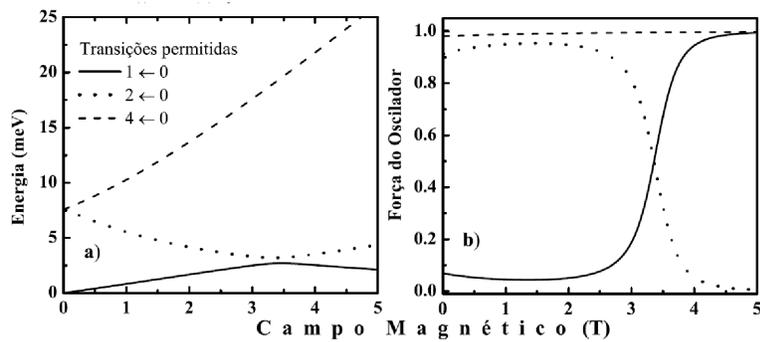


Figura 7. O mesmo da figura 4, com  $\gamma = 20 \text{ meV.nm}$

de campo magnético, refletindo a quebra de degenerescência e o reordenamento dos níveis de energia mostrados na figura 2.

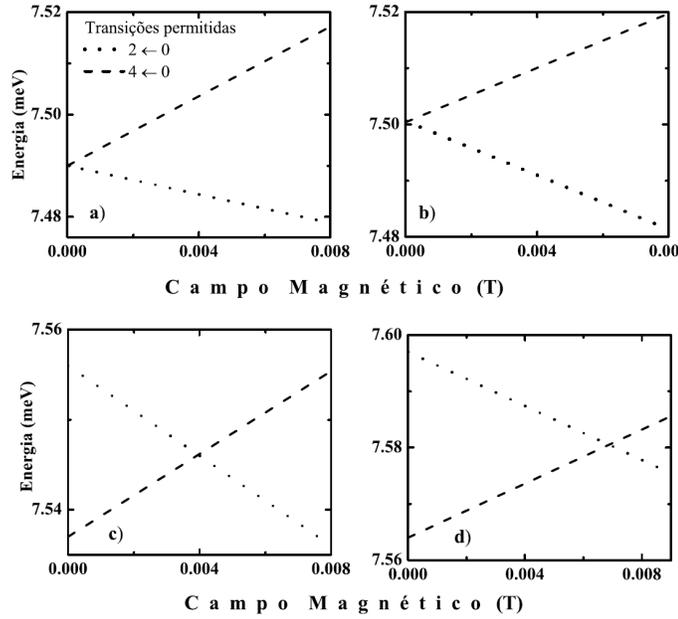


Figura 8. Ampliação das figuras 4, 5, 6 e 7, mostrando que para baixos valores do campo magnético há um cruzamento das energias de transição  $0 \rightarrow 2$  e  $0 \rightarrow 4$

## 4 Conclusão

Neste trabalho, calculei a estrutura eletrônica e a energia de transição óptica intrabanda em um ponto quântico com potencial de confinamento lateral parabólico e interação SO tipo Rashba, na presença de campo magnético externo. Para realizar o cálculo, utilizei o Hamiltoniano  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  de duas bandas. Os resultados mostram que a interação spin-órbita afeta os níveis de energia quebrando a degenerescência em  $B = 0$  e provocando uma repulsão em campos relativamente altos. Esses efeitos são explicados como devidos às misturas dos diferentes estados do espinor (Equação 2) com o aumento do acoplamento SO. Como consequência, as energias de absorção óptica correspondentes apresentam cruzamentos. Os resultados mostram que podemos manipular as transições ópticas por meio do controle do campo magnético e da interação SO usando um campo elétrico externo, de acordo com o interesse em uma das possíveis aplicações práticas no controle do spin eletrônico.

## Referências

- [1] DESTEFANI, C. F.; ULLOA, S. E. Anisotropic electron g factor in quantum dots with spin-orbit interaction, *Phys Rev B (R)*, v. 71, p. 161303-1-161303-4, 2005.
- [2] YANG, X. F.; FENG, J. F.; HONG, X. K.; LIU, Y. S. Fano-Rashba effect in thermoelectricity of a double quantum dot molecular junction, *Nanoscale Res Lett*, v. 6:618, p. 1-10, 2011.
- [3] PRADO, S. J.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A. M.; LÓPEZ-RICHARD, V.; MARQUES, G. E. Magneto-optical properties of nanocrystals: Zeeman splitting, *Phys Rev B*, v. 67, p. 161306-1-161306-10, 2003.
- [4] MANSELYAN, A.; CHAKRABORTY, T. Enhanced Rashba effect for holes in a quantum dot, *Europhys. Lett.*, v. 88, p. 17003-1-17003-4, 2009.
- [5] DINIZ, G. S. Efeitos de interação spin-órbita em anéis quânticos semicondutores, Tese de Doutorado. Instituto de Física. Universidade Federal de Uberlândia, 2007.
- [6] PIETILÄINEN, P.; CHAKRABORTY, T. Energy levels and magneto-optical transitions in parabolic quantum dots with spin-orbit coupling, *Phys Rev B*, v. 73, p. 155315-1-155315-17, 2006.
- [7] LÓPEZ-RICHARD, V.; ALCALDE, A. M.; PRADO, S. J.; MARQUES, G. E.; TRALLERO-GINER, C. Intraband magnetoabsorption as a probing tool for the quantum dot charge, *Appl Phys Lett*, v. 87, p. 231101-1-231101-3, 2005.