

# Estudo das Propriedades Eletrônicas e Ópticas em Pontos Quânticos Duplos

## Study of Electronic and Optical Properties in Double Quantum Dots

Silvio José Prado

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

*sprado@pontal.ufu.br*

**Resumo:** Neste trabalho desenvolve-se um estudo teórico sobre a estrutura eletrônica e as propriedades ópticas em pontos quânticos duplos de  $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$ . Uma análise detalhada dos seguintes parâmetros, a distância, entre os pontos quânticos de CdTe, a fração molar de manganês no  $Cd_{1-x}Mn_xTe$  e o raio do sistema, foi realizada usando o Hamiltoniano k.p  $8 \times 8$  de Kane-Weiler mantendo fixo a altura dos pontos quânticos. Observa-se que à medida que a distância entre os pontos quânticos aumenta os níveis de energia das bandas de condução e de valência se degeneram, o que foi verificado simulando o espectro da absorção óptica interbanda.

**Palavras-chave:** pontos quânticos duplos, caroço/casca, distância entre os pontos quânticos, fração molar, absorção óptica.

**Abstract:** This paper develops a theoretical study of the electronic structure and optical properties in double quantum dots  $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$ . A detailed analysis of these parameters, the distance between the quantum dots CdTe (core), the molar fraction of manganese on CdMnTe (shell) and the system distance while keeping fixed the height of the quantum dots, was performed using the Hamiltonian k.p  $8 \times 8$  de Kane-Weiler. It is observed that as the distance between the quantum dots increases, the energy levels of the conduction and valence bands degenerate, which may verified studying the interband optical absorption spectrum as shown in the simulations presented here.

**Key words:** double quantum dots, core/shell, distance between the quantum dots, molar fraction, optic absorption.

## 1 Introdução

Pontos quânticos (PQs) de materiais semicondutores são considerados a base para uma nova geração de dispositivos tecnológicos tais como lasers, memórias de alta densidade, células solares, computadores quânticos, biomarcadores em medicina, masers, entre outras aplicações [1, 2, 3, 4]. Um interesse especial em pontos quânticos duplos (PQDs) tem surgido devido à possibilidade de se controlar o espaçamento entre os PQs, com o intuito de manipular o grau de liberdade do spin destes sistemas, que pode se usado como bit de informação em computadores quânticos [5]. Neste trabalho foi desenvolvido um estudo teórico

de caracterização eletrônica e óptica de um sistema formado por dois PQs cilíndricos de CdTe crescidos dentro de um cilindro maior de Cd<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Te. Neste sistema pode-se controlar o raio, a distância entre os PQs e a concentração de manganês na barreira (Cd<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Te) que modifica os *band-offsets* das bandas de energia, mantendo fixa a altura do sistema na direção z.

## 2 Teoria

A figura 1 mostra uma representação do sistema de PQDs a ser estudado e das bandas de energia.  $\Delta E_c$  e  $\Delta E_v$  são os respectivos *band-offsets* das bandas de condução e de valência que servem para descrever o alinhamento relativo das bandas de energia entre os dois materiais.

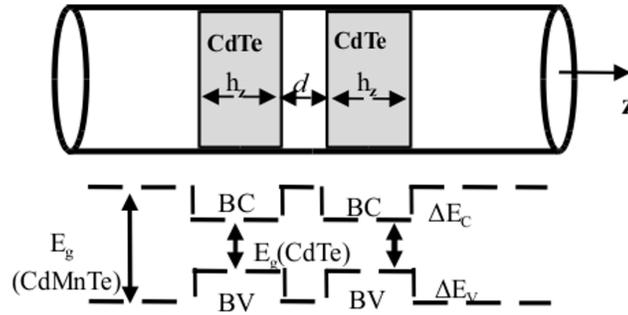


Figura 1. Representação esquemática do sistema de Pontos Quânticos Duplos de CdTe/CdMnTe e das bandas de energia.

Para calcular os níveis de energia dos elétrons e buracos na presença de um potencial  $V$ , uso o modelo k.p  $8 \times 8$  de Kane-Weiler [6], o qual leva em consideração as interações entre as bandas de buraco pesado (hh), leve (lh) e de spin-órbita (so). O Hamiltoniano k.p está descrito em detalhes em [6]. Em geral, cada componente do espinor tem a forma  $F_{n,L,m}^{\pm}(\rho, \phi, z) = A_{n,L} J_L(K_n^L \rho) \frac{e^{\pm i L \phi}}{\sqrt{2\pi}} f_m^{\pm}(z)$ , onde  $A_{n,L}$  de normalização,  $J_L(\mu_n^L \rho/R)$  é a função de Bessel e  $f_m^{\pm}(z) = \frac{1}{\sqrt{H_z}} \text{sen} \left[ m\pi \left( \frac{1}{2} - \frac{z}{H_z} \right) \right]$  [7]. O sinal mais em  $f_m^{\pm}(z)$  corresponde ao número quântico m par e o sinal de menos a m ímpar. A altura e o raio do cilindro maior onde estão os PQs são dados por  $2H_z$  e  $R$ , respectivamente.

Como consequência da simetria axial, a componente-z do momento angular total pode ser introduzida como um bom número quântico,  $F_z = f_z \hbar$ . A projeção do momento angular na direção z pode ser escrita como  $F_z = J_z + L_z$ , onde  $J_z$  é a componente-z do momento angular das funções de Bloch e  $L_z$  é a componente-z do momento angular da função envelope [8]. Como os pontos quânticos são simétricos com respeito ao plano  $z = 0$ , a paridade da função de onda é um bom número quântico permitindo escrever os subespaços como uma combinação especial de funções pares,  $F_{2L}^n(\rho, \phi)$  e  $f^+(z)$ , e ímpares,  $F_{2L+1}^n(\rho, \phi)$  e  $f^-z$ . As funções de onda  $\psi_{I(II)}$  e  $\psi_{III(IV)}$  para os subespaços I (II) e III (IV) de paridades diferentes podem ser escritas como uma combinação linear das funções envelope,  $F_{n,L,m}^{\pm}(\rho, \phi, z)$ , das oito funções de Bloch no ponto de simetria  $\Gamma$  como,

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

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

onde  $C_{n,L}^m$  são constantes a serem determinadas. Os subespaços I e IV assim como II e III na ausência de campo magnético são degenerados.

A probabilidade de que ocorram transições ópticas interbanda é proporcional ao elemento de matriz da interação radiação-cristal  $\langle \psi_{e,j} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_{h,j'} \rangle$ , onde  $j, j' = I (IV), II (III)$ , com  $\hat{\mathbf{e}}$  representando o vetor de polarização da luz incidente e  $\hat{\mathbf{P}}$  o operador momentum. Usando as Equações (1) e (2) o elemento de matriz acima pode ser escrito como

$$\langle \psi_{e,j}^{m_e} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_{e,j'}^{m_h} \rangle = \sum_{\alpha,\alpha'} \langle F_{e,\alpha}^{m_e} | F_{h,\alpha'}^{m_h} \rangle \langle \mu_\alpha | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \mu_{\alpha'} \rangle + \langle \mu_\alpha | \mu_{\alpha'} \rangle \langle F_{e,\alpha}^{m_e} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | F_{h,\alpha'}^{m_h} \rangle. \quad (3)$$

Aqui, os estados da banda de condução (valência) são indexados como  $F_{e,\alpha}^{m_e} (F_{h,\alpha}^{m_h})$ , com  $\alpha$  enumerando os números quânticos  $n, L$  e a função de Bloch no ponto  $-\Gamma$  da zona de Brillouin,  $|\mu_\alpha\rangle = |J, J_z\rangle$ , na sequência seguida pelos portadores dado pelas Equações (1) e (2).

Para transições interbanda, somente o primeiro termo na Equação (3) contribui para a integral de *overlap*, a qual pode ser separada em uma integração envolvendo o termo de Bloch, de oscilação rápida, que vai determinar a regra de seleção das transições interbanda, e uma integração sobre o termo envelope que determina as intensidades das transições, sendo proporcional a força do oscilador. A integração das funções de Bloch irá resultar nos elementos de matriz dipolar dependentes do tamanho, representados por  $\prod_{\alpha,\alpha'} = \langle \mu_\alpha | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \mu_{\alpha'} \rangle$ . conjunto completo das regras de seleção vem dos produtos não nulos dos elementos de matriz  $I_{e,h} \delta_{L_e, L_h} \Pi_{\alpha,\alpha'}$ , onde  $I_{e,h} = \langle F_{e,\alpha}^{m_e} | F_{h,\alpha'}^{m_h} \rangle$  são as integrais de *overlap* das funções envelope.

As transições permitidas são aquelas cujos estados iniciais e finais pertencem a subespaços diferentes, de I (III) para II (IV), ou vice-versa, devido às simetrias diferentes dos momentos

angulares dos elétrons e buracos. Pelas regras de seleção de dipolo elétrico, as transições permitidas com luz polarizada circularmente à direita ( $\sigma^+$ ) e a esquerda ( $\sigma^-$ ), satisfazem a condição  $\Delta m = \pm 1$  e para a luz com polarização linear ( $\pi^z$ ),  $\Delta m = 0$ . Os elementos de matriz dipolar acima podem ser escritos como,

$$\left\langle \psi_{e,I}^{m_e} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_{h,II}^{m_h} \right\rangle = iP F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) \delta_{m_e, m_h \pm 1} \quad (4)$$

$$F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) = \sum_{n, L, m} \{ C_{n, \beta}^{e-} C_{n, \beta}^{hh-} - C_{n, \beta}^{e+} [ C_{n, \beta}^{lh-} + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{n, \beta}^{so-} ] \}, \quad (5)$$

é a força do oscilador óptico para as transições permitidas, com  $\beta = 2L + 1/2 \mp 1/2$ . Da mesma forma as transições I $\rightarrow$ II podem ser obtidas trocando  $\beta = 2L + 1/2 \mp 1/2$  por  $\beta = 2L + 1/2 \pm 1/2$ . Para a polarização linear da luz  $\pi^z$ , os elementos da matriz óptica são escritos como,

$$\left\langle \psi_{e,I}^{m_e} | \hat{\mathbf{e}}^z \cdot \hat{\mathbf{P}} | \psi_{h,II}^{m_h} \right\rangle = iP F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) \delta_{m_e, m_h} \quad (6)$$

onde

$$F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) = \sum_{n, L, m} \{ C_{n, \beta}^{e+} [ C_{n, \beta}^{lh+} + C_{n, \beta}^{so+} ] + C_{n, \beta}^{e-} [ C_{n, \beta}^{lh-} + C_{n, \beta}^{so-} ] \} \quad (7)$$

O espectro de absorção é calculado considerando uma constante de espalhamento homogêneo,  $\Gamma$ , que pode ser atribuído a não-homogeneidade estrutural no processo de crescimento e nos mecanismos de espalhamento envolvendo fônons, impurezas ou estados de superfície. O coeficiente de absorção para transições ópticas interbanda para a luz incidente nas polarizações  $\sigma$  e  $\pi^z$  são escritos como

$$\alpha(\hat{\mathbf{e}}^+, \omega) = \frac{\alpha_0 \Gamma}{\pi} \sum_{N_e, L_h, m} \frac{\left| F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) \right|^2}{[(E_{N_e, m_e}(I) - E_{N_h, m_h-1}(II) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]} + \frac{\left| F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(II, I) \right|^2}{[(E_{N_e, m_e}(II) - E_{N_h, m_h+1}(I) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]} \quad (8)$$

e

$$\alpha(\hat{\mathbf{e}}^z, \omega) = \frac{\alpha_0 \Gamma}{\pi} \sum_{N_e, N_h, m} \frac{\left| F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(I, II) \right|^2}{[(E_{N_e, m_e}(I) - E_{N_h, m_h}(II) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]} + \frac{\left| F_{N_e, m_e}^{N_h, m_h}(II, I) \right|^2}{[(E_{N_e, m_e}(II) - E_{N_h, m_h}(I) - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2]} \quad (9)$$

onde  $\alpha_0$  é a constante de normalização e  $\omega$  é a frequência da luz incidente [8].

### 3 Resultados

Os parâmetros do CdTe usados são o gap de energia,  $E_g = 1,474\text{eV}$  a  $T = 300\text{K}$ , a energia da interação spin-órbita,  $\Delta^0 = 0,880\text{ eV}$ , os parâmetros de Luttinger modificados

$\gamma_1 = 1,27$ ,  $\gamma_2 = -0,311$  e  $\gamma_3 = -0,09$ , a massa efetiva do elétron  $m^e = 0,091m^0$  e o parâmetro de Kane de acoplamento das bandas de condução-valência,  $E_p = 17,9eV$  [3]. Para o  $Cd_{1-x}Mn_xTe$  o gap foi obtido fazendo um ajuste linear entre  $x=0$  e  $x=1$ , e tem o seguinte valor,  $E_g(eV) = 1,474 + 1,4347 \cdot x$ . Os valores dos *offsets* das bandas de condução ( $\delta Ec$ ) e de valência ( $\delta Ev$ ), são calculados através das seguintes expressões  $\delta Ec = 75\%(E_{g,CdMnTe} - E_{g,CdTe})eV$  e  $\delta Ev = 25\%(E_{g,CdMnTe} - E_{g,CdTe})eV\%$ . Os pontos quânticos têm alturas de  $hz = 70\text{\AA}$  e o cilindro maior no qual eles estão embutidos tem uma altura de  $2H_z = 400\text{\AA}$ . O raio R e a distância d entre os PQs podem ser variados. Os valores dos raios do sistema  $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$  usados neste trabalho são escolhidos de forma a garantir a existência de no mínimo quatro níveis de energia na banda de condução, por exemplo, na Figura 2 o menor raio para que esta condição fosse satisfeita foi de  $166,7\text{\AA}$ , para  $200\text{\AA}$  a condição foi satisfeita com mais do que os quatro níveis de interesse.

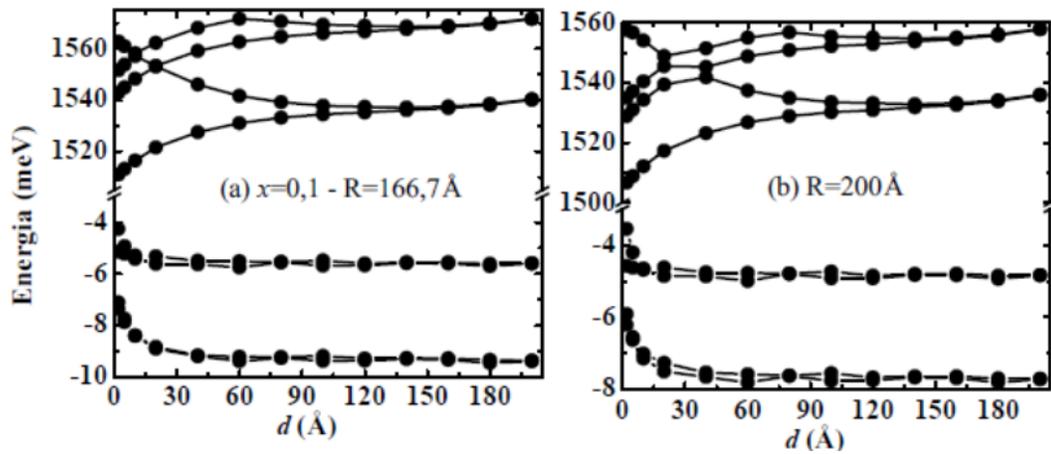


Figura 2. Níveis de energia das bandas de condução e de valência em função da distância entre os PQs, para  $x=0,1$  e raios do sistema  $CdTe/Cd_{1-x}Mn_xTe$  de (a)  $166,7\text{\AA}$  e (b)  $200\text{\AA}$ . As linhas servem de guias para os olhos.

Os níveis de energia dos elétrons e buracos para  $x=0,1$  estão na Figura 2, para os raios de  $166,7\text{\AA}$ (a) e  $200\text{\AA}$ (b). Na Tabela 1, tem-se a identificação dos quatro primeiros níveis da banda de condução e dos dois primeiros níveis da banda de valência. Esta identificação foi feita com base nos maiores valores das constantes,  $C_{n,L}^m$  das Equações (1) e (2) e identifica os níveis com respeito aos subespaços que eles pertencem se I ou II, lembrando que o subespaço I é degenerado no spin com o subespaço IV assim como o II com o III, por isso não aparece o spin na tabela. Observa-se que à medida que d aumenta os níveis de energia da banda de condução se cruzam, enquanto que para a banda de valência não há cruzamento.

Tabela 1. Identificação dos níveis de energia para  $x=0,1$  e  $R=166,7\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ . A primeira coluna mostra o espaçamento entre os PQs, Nas demais colunas mostra-se a identificação dos quatro primeiros níveis de energia da banda de condução e dos dois primeiros níveis da banda de valência, com respeito ao subespaço que estes níveis pertencem de acordo com as funções de onda (1) e (2).

$d(\text{\AA})$	1 <sup>o</sup> (e)	2 <sup>o</sup> (e)	3 <sup>o</sup> (e)	4 <sup>o</sup> (e)	1 <sup>o</sup> (hh)	2 <sup>o</sup> (hh)
2	I	II	I	II	I	II
10	I	II	I	II	I	II
40	I	II	II	I	I	II
80	I	II	II	I	I	II
120	I	II	II	I	I	II
160	I	II	II	I	I	II
200	II	I	I	II	I	II

Como esperado aumentar o raio, Figura 2 (b), diminui o confinamento dos portadores diminuindo a energia dos elétrons e dos buracos. Observa-se também que quando o espaçamento é pequeno o acoplamento entre os PQs é grande, e eles se comportam como um poço de potencial duplo, de forma que as funções envelope simétrica, na Figuras 2 (a) e (b) associadas ao primeiro nível da banda de condução e de valência, e anti-simétrica, associadas aos segundos níveis, são semelhantes as do estado fundamental e primeiro excitado de um único PQ. Por outro lado, com o aumento da distância  $d$ , a interação entre os PQs diminui e estes se tornam desacoplados, neste caso os PQs se comportam como PQs únicos, quanto mais distantes eles estão um do outro mais os níveis de energia dos estados fundamental e do primeiro excitado tendem a coincidir com o estado fundamental de um único PQ.

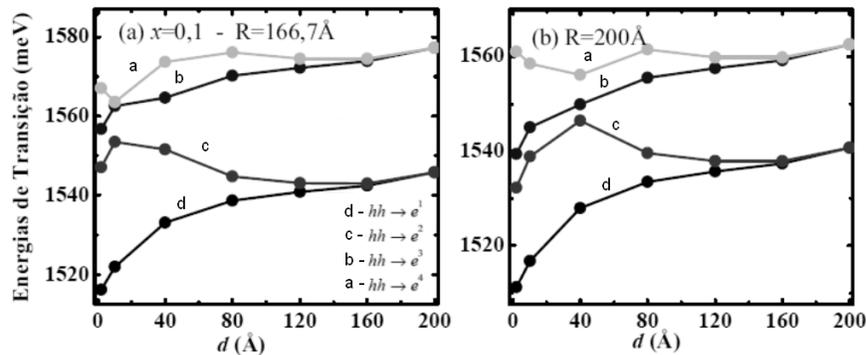


Figura 3. Energias de transição entre o primeiro e segundo níveis de energia da banda de valência para os quatro primeiros níveis da banda de condução, como função da distância entre os PQs. Figura (a) para  $R=166,7\text{\AA}$  e (b) para  $R=200\text{\AA}$ . As linhas servem de guias para os olhos.

As energias de transição óptica entre os dois primeiros níveis da banda de valência e os quatro primeiros níveis da banda de condução, como função da distância entre os PQs, para

os casos em que  $x=0,1$  estão na Figura 3, onde  $R = 166,7\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ , respectivamente. De acordo com a Tabela 1, o primeiro nível da banda de valência tem caráter  $hh$  (I) [degenerado com  $hh$  (III)], o mesmo acontece com o segundo nível,  $hh$  (II)[ $hh$  (IV)]. Pode-se observar o cruzamento entre os níveis da banda de condução nestas figuras, à medida que  $d$  vai aumentando, como por exemplo, o primeiro nível que era do subespaço I entre  $d=2$  e  $160\text{\AA}$  passa a ser do subespaço II em  $d = 200\text{\AA}$ , portanto as energias de transição acompanham estes cruzamentos assim como se torna degenerada à medida que  $d$  aumenta, pois os níveis de energia também se degeneram.

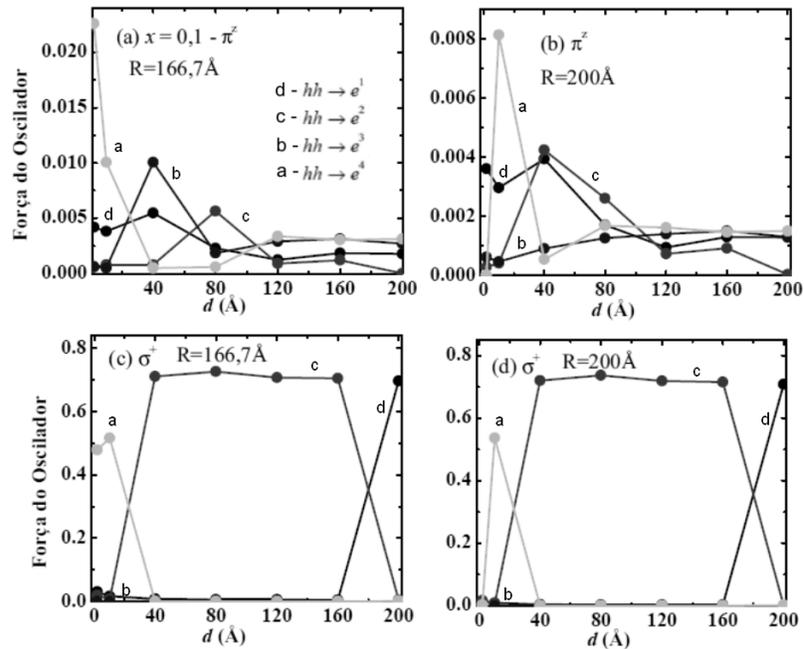


Figura 4. Força do oscilador para as transições interbanda, (a) e (b) para a luz incidente com polarização linear  $\pi^z$ ,  $R=166,7\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ , respectivamente. Figuras (c) e (d) para luz com polarização incidente circular  $s+$  e os mesmos valores dos raios das Figuras (a) e (b), como função de  $d$ . As linhas servem de guias para os olhos.

As forças dos osciladores para as transições da Figura 3 estão na Figura 4 (a) e (b) para luz com polarização incidente linear  $\pi^z$  e  $R = 166,7\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ , respectivamente. Observamos que os valores da força do oscilador são pequenos, pois de acordo com a Equação (7) as transições envolvidas devem ser entre buracos-leves, spin-órbita e os elétrons na banda de condução, entretanto da Tabela 1, temos que os dois primeiros níveis da banda de valência apresentam caráter dominante de buraco-pesado, por isso estes valores são pequenos. Os resultados para luz com polarização circular ( $\sigma^+$ ), Figura 4 (c) e (d), podem ser compreendidos observando as regras de seleção da Equação (5), da Tabela 1 e dos subespaços das Equações (1) e (2), como explicados a seguir. Para  $d = 2$  e  $10\text{\AA}$  na Figura 3 (a), a transição  $hh^{2\uparrow}(II) \rightarrow e^{1\uparrow}(I)$ , envolve um buraco-pesado com spin para cima ( $\uparrow$ ) que é o mesmo spin do elétron, portanto na Figura 4 (c) a força do oscilador é praticamente zero de acordo com a regra de seleção e

está representada pela linha preta. A transição para o segundo nível da banda de condução é representada por,  $hh^{1\downarrow}(I) \rightarrow e^{2\uparrow}(II)$ , portanto a força do oscilador é muito fraca e está representada em linha vermelha, seguindo, a linha azul representa a transição  $hh^{2\uparrow}(II) \rightarrow e^{3\uparrow}(I)$ , que não satisfaz a regra de seleção e também tem um valor quase zero para a força do oscilador e por último a transição com o maior valor,  $hh^{1\downarrow}(I) \rightarrow e^4 \downarrow (II)$ , representada em linha verde. Para  $d$  entre 40 e 160Å a transição com maior valor da força do oscilador é a que envolve o segundo nível da banda de condução,  $hh^{1\downarrow}(I) \rightarrow e^{2\downarrow}(II)$ , ou seja, o segundo nível da banda de condução que tinha spin-para cima entre  $d = 2$  e 10Å passa a ter spin-para baixo entre neste intervalo de separação entre os PQs. Para  $d = 200$ Å é a transição que envolve o primeiro nível da banda de condução que tem a maior força do oscilador, pois ela satisfazer as regras de seleção. Esta análise pode ser aplicada a Figura 4 (d).

Os espectros de absorção óptica interbanda estão mostrados na Figura 5, para  $x = 0, 1$  e raios 166,7Å e 200Å (a) e (b) são para a polarização da luz incidente, (c) e (d) para a polarização circular. Estes espectros acompanham as energias de transição da Figura 3 e as forças do oscilador da Figura 4, e os tamanhos dos quatro picos se tornam ou não definidos de acordo com a separação em energia entre eles e os valores das forças do oscilador de cada transição. A Figura 6 mostra a composição dos picos em termos das transições das Figuras 3 e 4, para  $R = 166,7$ Å em dois valores de  $d$ , 2Å e 200Å, para as polarizações usadas neste trabalho. Os picos de absorção mais intensos são aqueles, envolvem níveis com caráter dominante que satisfazem as regras de seleção das Equações (5) e (7).

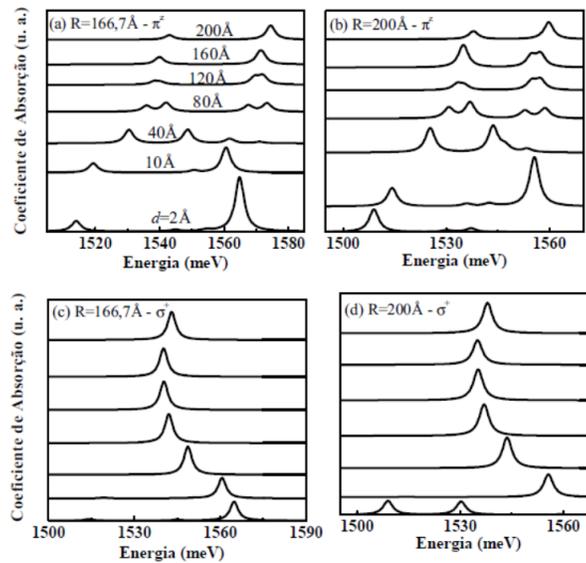


Figura 5. Espectro de absorção interbanda para alguns valores da distância  $d$  entre os PQs com  $x = 0, 1$ . Figuras (a) e (b) com raios de 166,7Å e 200Å, respectivamente, com polarização  $\pi^z$ . Figuras (c) e (d) com raios de 166,7Å e 200Å, respectivamente, com polarização  $\sigma^+$ .

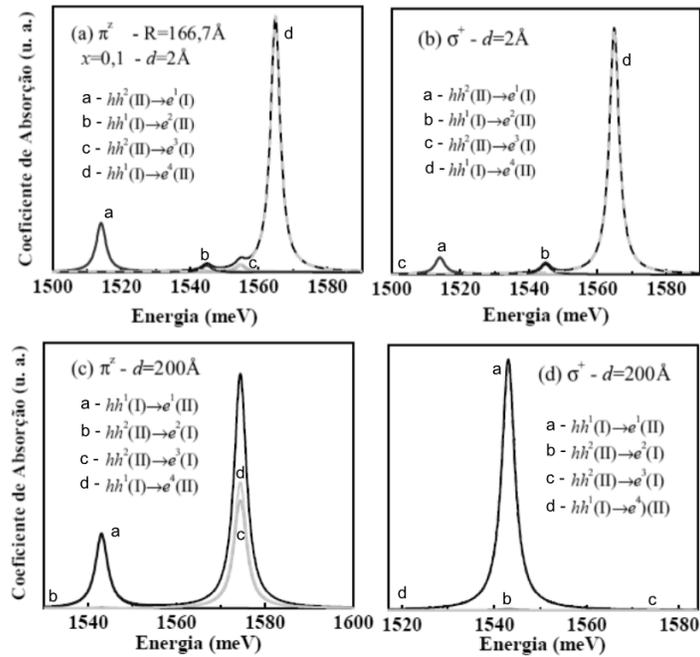


Figura 6. Detalhe da composição dos picos de absorção óptica da Figura 5.

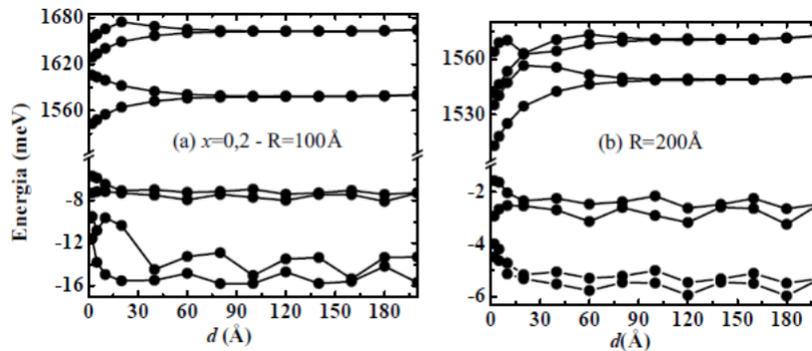


Figura 7. Níveis de energia das bandas de condução e de valência em função da distância entre os PQs, para  $x=0,2$  e raios de (a)  $100\text{\AA}$  (b)  $200\text{\AA}$ .

A Figura 7 é semelhante à Figura 2, agora com  $x = 0,2$  e a Tabela 2 é semelhante a Tabela 1, onde os colchetes servem para indicar que a mudança no raio de  $100\text{\AA}$ , sem colchete, para  $200\text{\AA}$ , com colchete, levou a um cruzamento entre o terceiro e o quarto nível da banda de condução, ou seja, para  $R=100\text{\AA}$  o terceiro nível pertence ao subespaço II e para  $R = 200\text{\AA}$  ao subespaço I. Observa-se também que aumentar o valor da concentração de manganês na barreira aumenta o valor dos offsets aumentando o confinamento dos portadores dentro dos PQs, que pode ser visto na Figura 7 (a) para  $d$  pequeno, em comparação com a

Figura 2 (a). Aumentar o raio, Figura 7 (a) e (b), diminui o confinamento no plano-xy e fazendo o primeiro nível excitado se aproximar do nível fundamental.

Tabela 2. Semelhante a Tabela 1, agora para  $x=0,2$  e raios  $100\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ . Os colchetes servem para indicar o cruzamento do terceiro e quarto níveis da banda de condução quando o raio aumenta.

$d(\text{\AA})$	1 <sup>o</sup> (e)	2 <sup>o</sup> (e)	3 <sup>o</sup> (e)	4 <sup>o</sup> (e)	1 <sup>o</sup> (hh)	2 <sup>o</sup> (hh)
2	I	II	II[I]	II[II]	I	II
10	I	II	II[I]	II[II]	I	II
40	I	II	II[II]	II[I]	I	II
80	I	II	II[I]	II[II]	II	I
120	I	II	II[II]	II[I]	I	II
160	II	I	II[I]	II[II]	I	II
200	II	I	II[I]	II[II]	II	I

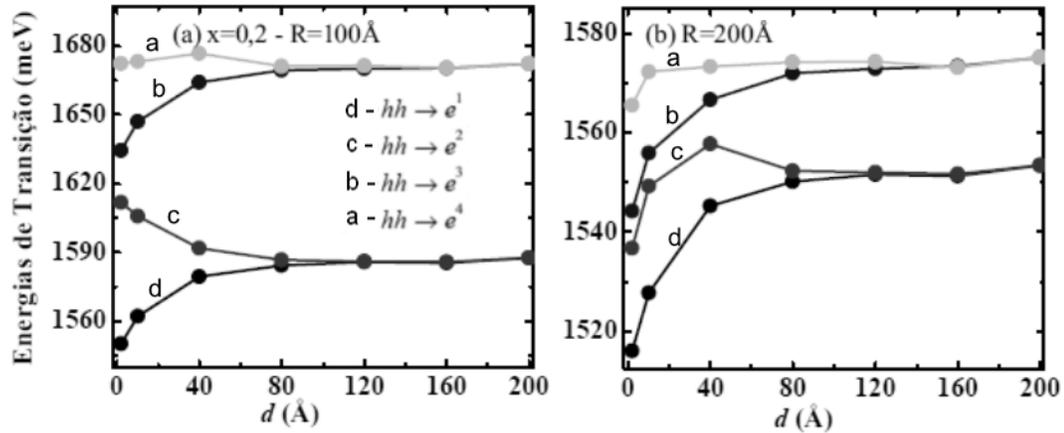


Figura 8. Energias de transição entre o primeiro e segundo níveis de energia da banda de valência para os quatro primeiros níveis da banda de condução, como função da distância entre os PQs. Figuras (a) e (b) para  $R=100\text{\AA}$  e  $200\text{\AA}$ , respectivamente e  $x=0,2$ .

As energias de transição para  $x = 0,2$  e raios (a)  $100\text{\AA}$  e (b)  $200\text{\AA}$ , são apresentadas na Figura 8. Uma comparação com a Figura 3 (b), pois as duas tem o mesmo raio observa-se um comportamento qualitativo semelhante, à medida que  $d$  aumenta ocorre a degenerescência das energias de transição, o mesmo acontece nas Figuras 3 (a) e 8 (b). Entretanto na segunda a degenerescência acontece em um valor de  $d$  menor,  $120\text{\AA}$  enquanto na Figura 3 (b) em  $d = 160\text{\AA}$ , ou seja, aumentar a concentração de Mn aumenta o confinamento modificando a posição relativa dos níveis de energia. Comparando a Figura 8 (a) com raio de  $100\text{\AA}$  com a Figura 8 (b) com raio de  $200\text{\AA}$ , para um raio menor e  $d$  entre  $2\text{\AA}$  e  $80\text{\AA}$ , as energias de

transição se "repelem" principalmente entre a primeira e a segunda transição, linhas preta e vermelha, respectivamente, devido ao maior confinamento no palno-xy e da grande interação entre os PQs. Comportamento semelhante ao já discutido nas Figuras 1 e 2 e Tabelas 1 e 2 aparecem nos resultados da Figura 9 e Tabela 3, para  $x = 0,4$ .

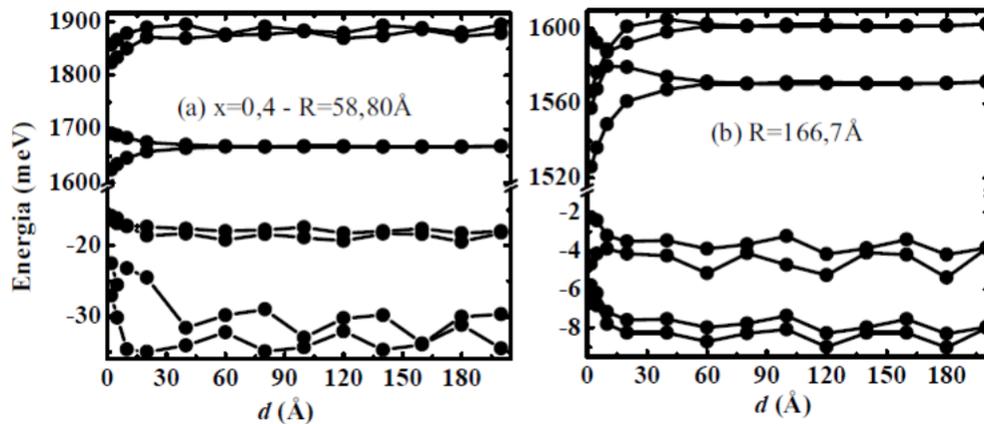


Figura 9. Níveis de energia das bandas de condução e de valência em função da distância entre os PQs, para  $x=0,4$  e raios de (a)  $58,8\text{Å}$  e (b)  $166,7\text{Å}$ .

Tabela 3. Semelhante às Tabelas 1 e 2, agora para  $x=0,4$  e raios  $58,8\text{Å}$  e  $166,7\text{Å}$ . Os colchetes servem para indicar as mudanças dos subespaços referentes ao terceiro e quarto níveis para o raio de  $166,7\text{Å}$ .

$d(\text{Å})$	1° (e)	2° (e)	3° (e)	4° (e)	1° (hh)	2° (hh)
2	I	II	I[II]	II[I]	I	II
10	I	II	I[II]	II[I]	II	I
40	I	II	I[II]	II[I]	I	II
80	I	II	II[II]	I[I]	II	I
120	I	II	II[II]	I[I]	I	II
160	II	I	II[II]	I[I]	I	II
200	II	I	II[II]	I[I]	II	I

Como as energias de transição das Figuras 3 e 8 são aproximadamente iguais e estão na região do infravermelho próximo, calculei os níveis e as energias de transição para  $x = 0,4$  com o objetivo de verificar se o espectro de absorção óptica poderia se deslocar para outra região do espectro. Como já foi mencionado aumentar a concentração de Mn aumenta os *offsets* e consequentemente o confinamento dos portadores, como pode ser visto nas Figuras 9 (a) e (b) e nas energias de transição das Figuras 10 (a) e (b). Para  $x = 0,4$  foi possível encontrar valores do raio menor e maior do que a altura do PQ que é de  $h_z = 70\text{Å}$  e assim observar os efeitos da razão altura/raio e da distância entre os PQs sobre os níveis de energia.

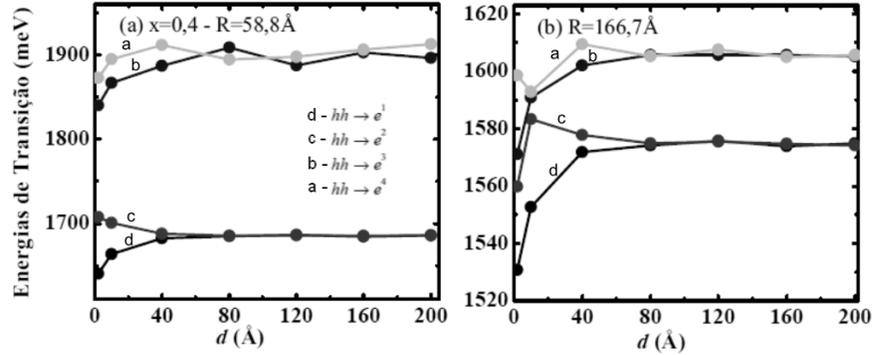


Figura 10. Energias de transição entre o primeiro e segundo níveis de energia da banda de valência para os quatro primeiros níveis da banda de condução, como função da distância entre os PQs. Figuras (a) e (b) para  $R=58,8\text{Å}$  e  $166,7\text{Å}$ , respectivamente e  $x=0,4$ .

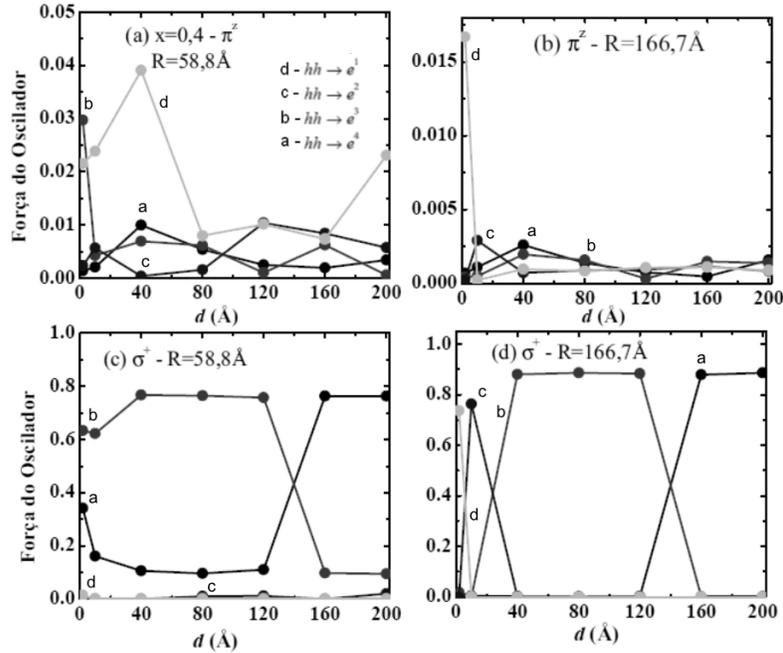


Figura 11. Força do oscilador para as transições interbanda, (a) e (b) para a luz incidente com polarização linear  $\pi^z$ ,  $R = 58,8\text{Å}$  e  $166,7\text{Å}$ , respectivamente. Figuras (c) e (d) para luz com polarização incidente circular  $\sigma^+$  e os mesmos valores dos raios das Figuras (a) e (b), como função de  $d$ .

Em comparação com as energias de transição para  $x = 0, 1$  e  $0, 2$  em  $x = 0, 4$  e raio menor que  $hz$ , Figura 10 (a), houve um deslocamento do espectro óptico do infravermelho próximo para o espectro visível, no caso para o vermelho. Na Figura 10 (b) aumentar o raio relaxa o

confinamento no plano, diminuindo as energias de transição e aumentando os comprimentos de onda e o espectro volta a estar no infravermelho próximo. As outras características observadas nas figuras anteriores como a degenerescência e a separação ou aproximação das energias de transição em função do raio e da distância entre os PQs, também aparecem aqui.

A força do oscilador para as transições da Figura 10 estão na Figura 11, ela pode ser compreendida novamente usando as Equações (5) e (7) para as regras de seleção e a Tabela 3.

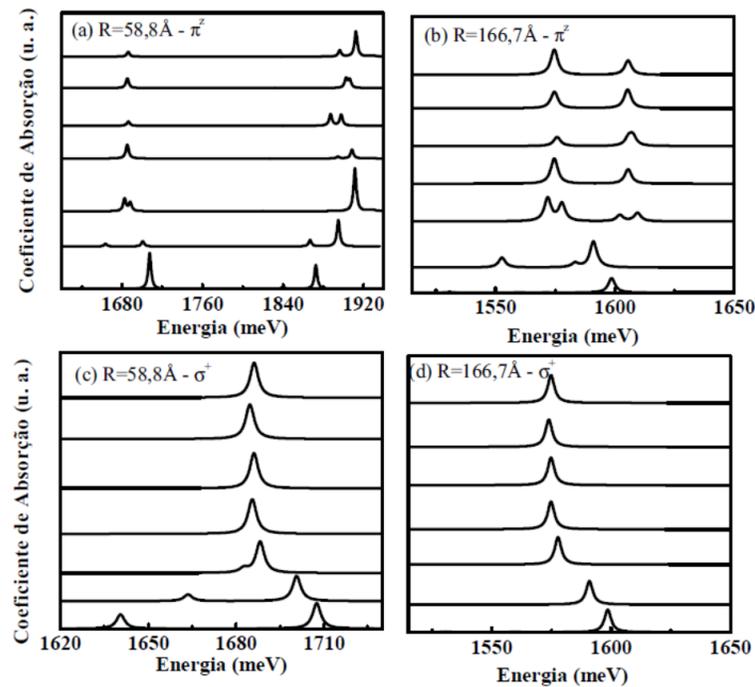


Figura 12. Espectro de absorção interbanda para alguns valores da distância  $d$  entre os PQs com  $x=0,4$ . Figuras (a) e (b) com raios de  $58,8\text{Å}$  e  $166,7\text{Å}$ , respectivamente, com polarização  $\pi^z$ . Figuras (c) e (d) com raios de  $58,8\text{Å}$  e  $166,7\text{Å}$ , respectivamente, com polarização  $\sigma^+$ .

O espectro de absorção óptica da Figura 12 é para  $x = 0,4$ , onde o tamanho e as posições dos picos estão de acordo com os resultados mostrados nas Figuras 10 e 11, para as energias de transição e as forças do oscilador correspondentes.

## 4 Conclusão

O estudo teórico dos parâmetros distância entre os PQs, a concentração de manganês na barreira e o raio do sistema  $CdTe/Cd1 - xZnxTe$  permitiu uma compreensão sobre como os níveis de energia e as propriedades ópticas são afetados ao se variar esses parâmetros. Pode-se observar dos resultados um competição entres os confinamentos devido ao raio dos PQs, confinando os portadores no plano-xy, ao confinamento devido a concentração de Mn no  $CdMnTe$  que afeta ao altura das barreiras de energia e da separação entre os PQs que

afeta a interação entre os portadores sendo maior quando a separação é menor e diminuindo com o aumento da separação, isso permite controlar o espectro de absorção e emissão óptica, podendo a princípio sintonizá-los na faixa do infravermelho próximo ou do visível de acordo com o interesse em aplicações tecnológicas.

## Referências

- [1] ZAITSEV, S. V.; WELSCH, M. K.; FORCHEL, A. e BACHER, G., Exciton states in strongly coupled asymmetric semimagnetic double quantum dots, *JETP Letters*, v. 84, p. 436-440, 2006.
- [2] MAKHANETS, O.; GRYSCHYK, A. e DOVGANIUK, M. Electron and hole spectra in quantum wire with two quantum dots in the electric field, *Condensed Matter Physics*, v. 10, p. 69-74, 2007.
- [3] LIU, Y.-Y.; STEHLIK, J.; EICHLER, C., GULLANS, M. J.; TAYLOR, J. M. e PETTA, J. M.. Semiconductor double quantum dot micromaser, *Science*, v. 347, p. 285-287, 2015.
- [4] KARLEWSKI, C.; HEIMES, A. e SHON, G. Lasing and transport in a multi-level double quantum dot system coupled to a microwave oscillator. *Physical Review B*, v. 93, 045314, 2016.
- [5] BRUNNER, R.; SHIN, Y.-S.; OBATA, T.; PIORO-LADRIÈRE, M.; KUBO, T.; YOSHIDA, K.; TANIYAMA, T.; TOKURA, Y. e TARUCHA, Y.. Two-Qubit Gate of Combined Single-Spin Rotation and Interdot Spin Exchange in a Double Quantum Dot, *Physical Review Letter*, v. 107, 146801, 2011.
- [6] PRADO, S. J.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A. M.; LÓPEZ-RICHARD, V.; MARQUES, G. E. Optical transitions in a single CdTe spherical quantum dots, *Physical Review B*, v. 68, 235327, 2003.
- [7] SOUZA, P. L.; LOPES, A. J.; UNTERRAINER, K.; GEBHARD, T.; PIRES, P. M., VILLAS-BOAS, J. M., VIEIRA, G. S., GUIMARÃES, P. S. S. e STUDART, N.. Quantum dot structure grown on Al containing quaternary material for infrared photodetection beyond 10  $\mu\text{m}$ . *Applied Physics Letter*, v. 90, 173510, 2007.
- [8] MLINAR, V.; TADIC, M. e PEETERS, F. M.. Hole exciton energy levels in InP/InGaP quantum dot molecules: Influence of geometry and magnetic field dependence. *Physical Review B*, v. 73, 235336, 2006.