

Influência do Strain e da Interação Spin-Órbita em um Ponto Quântico Cilíndrico

Influence of Strain and Spin-Orbit Interaction in a Cylindrical Quantum Point

Silvio José Prado¹

Resumo

Neste trabalho estudo como o strain e a interação spin-órbita Rashba afetam os níveis de energia da banda de condução em um ponto quântico cilíndrico submetido a um campo magnético externo, usando o método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ 2×2 . Os resultados apresentados mostram que a interação spin-órbita influencia fortemente os níveis de energia levantando a degenerescência mesmo em campo magnético nulo, enquanto que o strain comprime os níveis aumentando os efeitos da interação Rashba. Neste contexto, a absorção óptica intrabanda vem a ser uma ferramenta útil para se estudar os efeitos da interação spin-órbita e do strain sobre os níveis de energia dos elétrons.

Paravras chave: Interação spin-órbita tipo Rashba. Strain. Pontos quânticos. Banda de condução. Método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$.

Abstract

In this work study how the strain and spin-orbit Rashba interaction type affect the energy levels of the conduction band in a cylindrical quantum dot, using the 2×2 method $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$. The results show that the spin-orbit interaction strongly influences the energy levels of lifting the degeneracy even in zero magnetic field, while the strain compressing the levels enhance the Rashba interaction effects. In this context, the intraband optic absorption becomes a useful tool to study the effects of spin-orbit interaction and the strain on the electron energy levels.

Keywords: Spin-orbit Rashba interaction. Strain. Quantum dots. Conduction Band. $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ method

¹ Docente da Faculdade de Ciências Integradas do Pontal – Facip – UFU; sprado@pontal.ufu.br

Introdução

A spintrônica é um campo da eletrônica onde tanto o spin quanto a carga do elétron são utilizados como elementos ativos nos dispositivos eletrônicos e no desenvolvimento de dispositivos de processamento quântico de informação. Desta forma controlar a dinâmica de estados quânticos coerentes chamados de *qubits*, é um passo fundamental em direção ao desenvolvimento dos computadores quânticos. Nesse contexto o spin dos elétrons e buracos em nanoestruturas semicondutoras é considerado como um ótimo candidato para viabilizar os *qubits*, pois a quantização do movimento dos portadores inibe a relaxação do spin e dos processos de decoerência, tornando os estados de spin coerentes em uma escala de tempo maior que nanossegundos (RAICEVIC; TADIC, 2009; LI; LI, 2008; PIETILÄINEN; CHAKRABORTY, 2006). O controle externo da dinâmica de spins pode ser feito através das propriedades eletrônicas e ópticas das nanoestruturas, sendo esta uma etapa de grande importância na execução de operações com os *qubits*.

Uma das técnicas de manipulação do spin tem como base a interação spin-órbita (ISO) Rashba, devido ao confinamento e a falta de simetria de inversão em nanoestruturas, criando um campo elétrico local perpendicular ao plano do elétron (MANSELYAN; CHAKRABORTY, 2009). Outra técnica de manipulação do spin é através do acoplamento spin-órbita induzido por strain na ausência de campo magnético (KATO et al., 2004). A influência do strain sobre a estrutura eletrônica é dupla. Primeiro, há uma mudança de simetria do cristal que leva à divisão de diferentes estados de spin dos elétrons, os quais são separados em spin-up e spin-down, como resultado do confinamento quântico. O segundo efeito sobre a estrutura eletrônica vem da interação spin-órbita induzida por strain, chamada de engenharia de strain, para manipulação de spin em estado sólido. Este tipo de manipulação tem sido usado em experimentos de controle de spin eletrônico, tais como na precessão

e coerência de spin, propriedades de transporte entre outras (NADJ-PERGE et al., 2010; JHA et al., 2014).

Neste trabalho estudo teoricamente os efeitos da ISO tipo Rashba e do strain sobre os elétrons na banda de condução de um ponto quântico (PQ) cilíndrico de InAs crescido em um substrato de GaAs, sobre a influência de um campo magnético externo aplicado na direção-z.

Teoria

Os elétrons da banda de condução do PQ estão confinados na direção-z por um potencial retangular infinito de largura $2\hbar z_0$, enquanto que no plano-xy o potencial de confinamento é do tipo parabólico, com energia $\hbar\omega_0$ (E_0). Nestas condições o Hamiltoniano para um elétron com ISO Rashba e strain (RAICEVIC; TADIC, 2009) é dado por:

$$H = \frac{1}{2m^*} \vec{P}^2 + \frac{1}{2} m^* \omega_0^2 \rho^2 + \frac{\alpha}{\hbar} [\vec{\sigma} \times \vec{P}]_z + \frac{1}{2} g \mu_B B \sigma_z + V_{hidro}. \quad (1)$$

Nesta equação \vec{P} é o operador que leva em consideração os efeitos do campo magnético,

$\vec{P} = \vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A}$, onde \vec{p} é o operador sem campo e \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 e $\vec{\sigma}$ é o vetor das matrizes de Pauli.

O primeiro termo do Hamiltoniano (1) corresponde à energia cinética, o segundo ao potencial de confinamento parabólico, o terceiro à ISO Rashba, sendo α o parâmetro que determina a intensidade da interação. O quarto termo é o acoplamento Zeeman, onde g é o fator de Landé

e σ_z é projeção do spin do elétron no eixo-z ($\sigma_z = 1/2, -1/2$). Finalmente, V_{hidro} é o potencial efetivo devido ao strain hidrostático, que tem como causa o não casamento entre os parâmetro de rede entre InAs e GaAs.

O Hamiltoniano (1) pode ser escrito na forma matricial,

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{21} & H_{22} \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Os elementos H_{11}, H_{12}, H_{21} e H_{22} são escritos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} H_{11} &= H_{22} = \frac{-\hbar^2}{m^*} \hat{P}^2 + V_{hidro}, \\ H_{12} &= \alpha + \frac{C_3}{2} \varepsilon_{xy} \hat{P}_+, \\ H_{21} &= H_{12}^\dagger, \end{aligned} \quad (3)$$

onde os operadores \hat{P}_\pm e \hat{P}^2 são dados

por $\hat{P}_\pm = (\frac{\partial}{\partial x} \pm i \frac{\partial}{\partial y})$ e $\hat{P}^2 = \nabla^2$. O strain aparece em todos os elementos do Hamiltoniano (2), representado pelo tensor ε_{xy} . Nos termos fora da diagonal tem-se a combinação do strain com a ISO Rashba, onde α determina a intensidade da interação. O termo C_3 é uma constante que depende do material, ε_{xy} que aparece no elemento

de matriz H_{12} é dado por $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yx} = -\left[\frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11} + C_{12} + C_{44}} \right] \varepsilon_\square$, onde ε_\square representa o strain biaxial no plano-xy, com

$\varepsilon_\square = (\frac{a_s - a}{a})$, sendo a_s a constante de rede do substrato, no caso GaAs, e a a constante de rede do PQ, InAs.

Portanto o potencial hidrostático, V_{hidro} de acordo com a Ref. (RAICEVIC; TADIC, 2009) pode ser escrito da seguinte forma:

$$V_{hidro} = a_c \left[\frac{C_{11} - C_{12} + 6C_{44}}{C_{11} + C_{12} + 2C_{44}} \right] \varepsilon_\square \quad (4)$$

as constantes C_{ij} são os módulos elásticos, que são determinados experimentalmente. O strain leva assim a um aumento da energia potencial da banda de condução.

O Hamiltoniano $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ tem uma simetria inerente que permite a separação do espaço de Hilbert em dois subespaços ortogonais (PRADO, et al., 2004). As funções de onda são expandidas em espinores de duas-componentes em cada subespaço de Hilbert, em termo das soluções exatas das componentes da diagonal do Hamiltoniano (1). Cada componente do espinor tem a seguinte forma (PRADO, 2013):

$$\begin{aligned} f_{n,s}^m(\rho, \theta, z) &= \frac{1}{\lambda} \left(\frac{\Gamma[n+m+1]}{2^{m+1} n! (\Gamma[m+1])^2 \pi} \right)^{1/2} e^{-im\theta} e^{-\frac{1}{4} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^2} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^m \\ &\quad {}_1F_1(-n, m+1, \frac{1}{2} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^2) \sqrt{\frac{1}{H_z}} \text{sen}(s\pi \left(\frac{1}{2} - \frac{z}{H_z} \right)), \end{aligned} \quad (5)$$

onde ${}_1F_1$ é a função hipergeométrica confluyente,

$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{m^* \omega}}$ com $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$, $\omega_c = \frac{eB}{m^*}$ é a frequência ciclotrônica, $n = 0, 1, 2, \dots$; $m \equiv \dots, -1, 0, 1, \dots$ e $s = 1, 2, 3, \dots$. Portanto as funções de onda, $\Psi_{I(II)}$, para cada subespaço I e II são escritas como,

$$|\Psi_{I(II)}^m\rangle = \sum_{n,m,s} \begin{pmatrix} C_{n,s}^{m(m-1)} f_{n,s}^{m(m-1)} |e \uparrow\rangle \\ C_{n,s}^{m+1(m)} f_{n,s}^{m+1(m)} |e \downarrow\rangle \end{pmatrix} \quad (6)$$

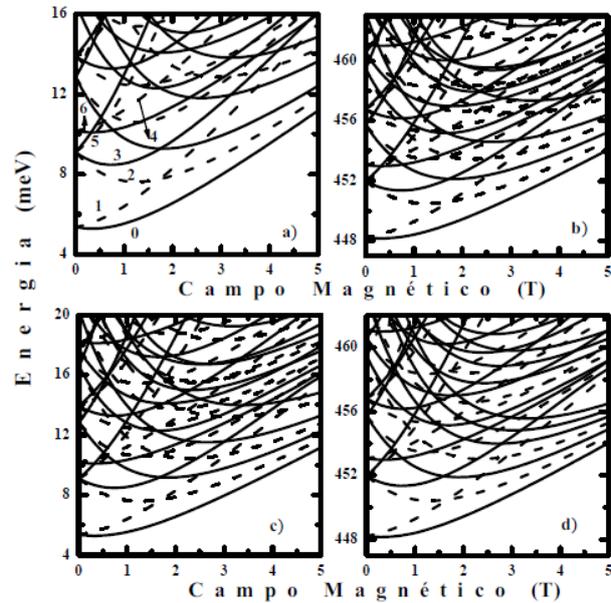
sendo que $C_{n,s}^m$ são constantes a serem determinadas.

Resultados

Os parâmetros do InAs usados neste trabalho são, a massa efetiva do elétron m_e (InAs) = $0,079m^*$, onde m^* é a massa do elétron livre e os parâmetros relacionados com strain (VURGAFTMAN; MEYER, 2001): $C_{11} = 832,9$ GPa, $C_{12} = 452,6$ GPa, $C_{44} = 395,9$ GPa, $C_3 = 0,52$ eV.nm, $a_c = -5,08$ eV. Os parâmetros de rede do GaAs e do InAs, são respectivamente, $a_s = 5,66325\text{Å}$ e $a = 6,0583\text{Å}$, portanto neste caso o strain é compressivo, pois $\Delta a = a_s - a < 0$.

É útil introduzir o momento angular total $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{L}$, onde \mathbf{J} é o momento angular total da função de Bloch, e \mathbf{L} é o momento angular envelope. Como a projeção do momento angular total $F_z (j_z + m)$ é uma constante de movimento ela foi usada para indexar os níveis de energia em $B = 0\text{T}$ da seguinte forma; nível = **0**: $F_z = 1/2$ (spin= \uparrow); **1**: $-1/2(\downarrow)$; **2**: $3/2(\uparrow)$; **3**: $1/2(\downarrow)$; **4**: $-1/2(\uparrow)$; **5**: $-3/2(\downarrow)$; **6**: $5/2(\uparrow)$ e **7**: $3/2(\downarrow)$. Os espectros de energia da banda de condução como função do campo magnético são mostrados na figura 1, com $H_z = 20\text{Å}$ e $E_0 = 7,5\text{meV}$ (que equivale a um raio ρ de 16Å , pois $E_0 = 4\hbar^2/m^*\rho^2$). A fig. 1 a) é sem strain e sem ISO, a 1 b) é sem ISO e com strain, neste caso observa-se que aumentaram os valores das energias já que o strain comprime os elétrons no plano-xy. Na 1 c) α é igual 20meV.nm e não se considera o strain, neste caso há quebra da degenerescência em campo magnético zero, assim como reordenamento dos níveis em campos baixos e repulsão em campos altos, como destacado na figura 2. Na fig. 1 d) estão incluídos a ISO, com $\alpha = 20\text{meV.nm}$ e o strain.

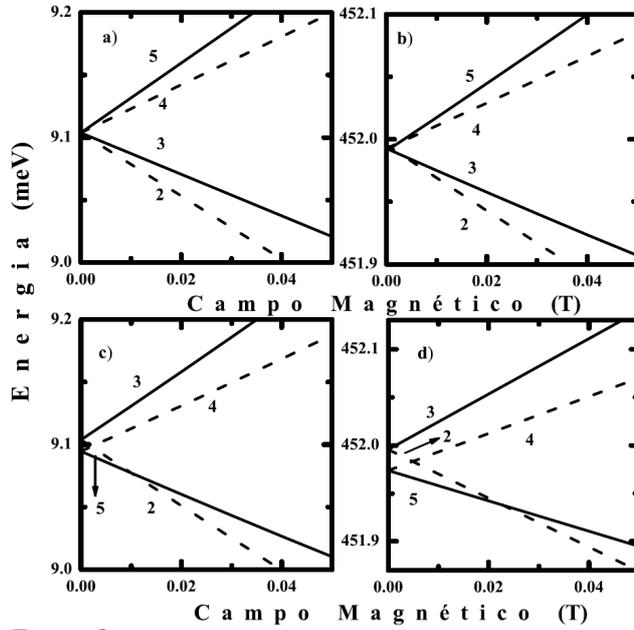
Figura 1 - Níveis de energia dos elétrons na banda de condução para um PQ cilíndrico como função do campo magnético: a) sem strain e sem ISO, b) com strain e sem ISO, c) sem strain e com ISO e d) com ambos os efeitos. As linhas cheias representam os níveis pertencentes ao subespaço I e as pontilhadas ao subespaço II.



Fonte: O autor.

A figura 2 mostra uma ampliação dos níveis de energia da figura 1, destacando os efeitos da ISO que em campo zero leva à quebra da degenerescência e a inversão dos níveis. Além disso, a ISO agindo sobre os níveis 4 e 7 leva a formação de um mini-gap de energia devido ao anti-cruzamento destes níveis em $B \equiv 0,6\text{T}$, o strain realça o mini-gap como pode ser visto na fig. 3 a). Este anti-cruzamento leva a uma troca do caráter de spin desses estados, ou seja, em campo nulo o nível 4 tem spin- \uparrow e o nível 7 spin- \downarrow , após o anti-cruzamento o nível 4 tem spin- \downarrow e o nível 7 spin- \uparrow . A figura 3 b) mostra a variação do mini-gap em função de E_0 para α fixo e três valores da meia-altura, onde se observa que o mini-gap deixa de existir, quando E_0 é maior que $17,0\text{meV}$ para $H_z = 15\text{Å}$, $9,5\text{meV}$ para $H_z = 20\text{Å}$ e $7,5\text{meV}$, para $H_z = 22\text{Å}$. Observa-se também que os valores do mini-gap passam por mínimos, os quais ocorrem devido aos acoplamentos entre os níveis de energia e como esses acoplamentos se modificam devido à complexa relação entre a razão ρ/H_z (da energia de confinamento lateral $E_0 \sim 1/\rho^2$, pela meia-altura do PQ), a

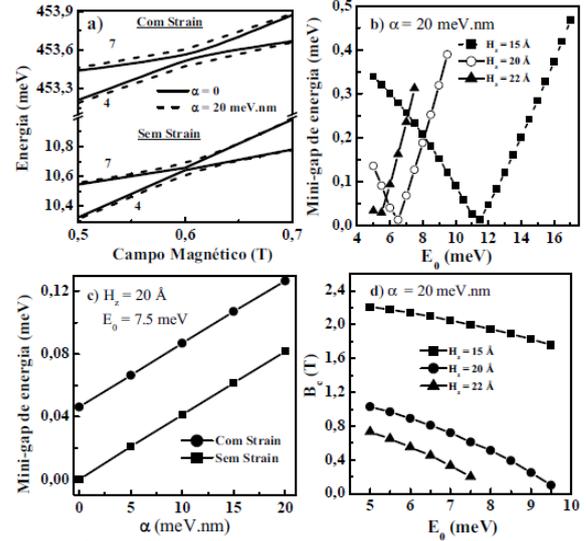
Figura 2 - Ampliação da figura 1 destacando os efeitos da ISO e do strain em campos baixos: a) sem strain e ISSO, b) com strain, sem ISSO, as energias aumentaram, c) com ISSO e sem strain, separação dos níveis em B=0 e reordenamento dos mesmos e d) ambos os efeitos incluídos, mostrando quebra da degenerescência em B=0, reordenamento e aumento da energia.



Fonte: O autor.

influência do strain, da ISO e do campo magnético. A figura 3 c) mostra a evolução do mini-gap como função da intensidade da ISO com e sem strain, mantidos E_0 e H_z fixos, novamente o efeito principal do strain é de aumentar a separação entre os níveis de energia. O campo magnético crítico, B_c , é o valor do campo onde ocorre o mini-gap, ele está plotado na figura 3 d) como função de E_0 , para α fixo e três valores de H_z . Da figura observa-se que o B_c diminui a medida que a energia de confinamento lateral aumenta, deixando de existir nos valores de E_0 mencionados na discussão dos resultados da fig. 3 b). Por outro lado, para um dado valor de E_0 , diminuir H_z , aumenta os valores de B_c .

Figura 3 - a) Ampliação das figuras 1 a) à 1 d) destacando o mini-gap de energia. b) Variação do mini-gap de energia como função de E_0 . c) Variação do mini-gap como função de α e d) campo magnético crítico como função de E_0 .

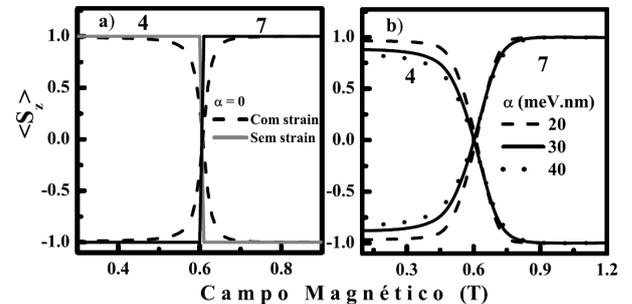


Fonte: O autor.

Para verificar as trocas de spin entre os níveis 4 e 7, calcula-se o valor esperado da projeção do spin na direção de quantização-z em função do campo magnético, usando a seguinte expressão:

$$\langle S_z \rangle = \langle \psi | S_z | \psi \rangle = \sum_{n,m,s=0} |C_{n,s,\uparrow}^m|^2 - |C_{n,s,\downarrow}^m|^2 \quad (7)$$

Figura 4 - Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.



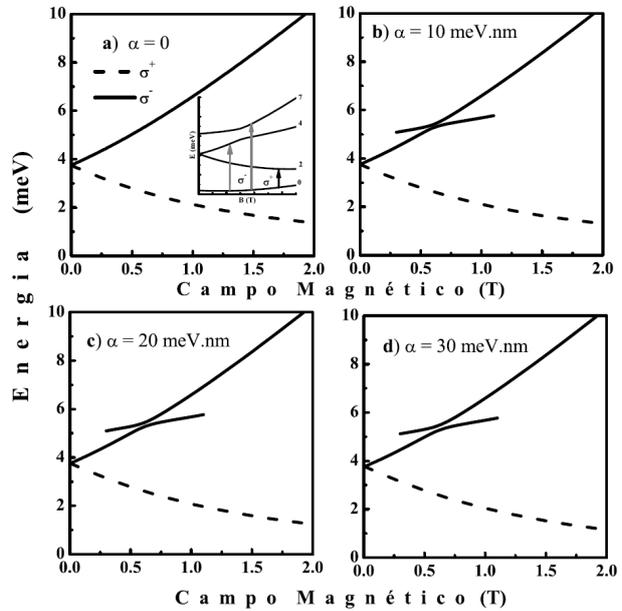
Fonte: O autor.

Os resultados estão nas figuras 4 a) e 4 b) onde $E_0 = 7,5\text{meV}$ e $H_z = 20\text{\AA}$. Na fig. 4 a) com a ISO desligada em $B=0\text{T}$ observa-se que o spin dominante do nível 4 é \uparrow e do nível 7- \downarrow , tanto no caso com strain quanto no caso sem. À medida que o campo aumenta os referidos níveis trocam de spin de forma abrupta em $B=0,6\text{T}$, no caso sem strain e quando este é incluído ele comprime os níveis de energia modificando a interação entre eles de tal forma que a troca de spins ocorre de forma mais suave. Na fig. 4 b) a inclusão da ISO faz com que os estados deixem de ser puros em $B=0\text{T}$, ou seja a componente $\langle S_z \rangle$ não é igual a unidade, além disso quanto maior o α maior a mistura dos estados de spin e maior o valor dos mini-gaps de energia, tornando ainda mais suave a troca de spins.

A evolução do mini-gap como função de α , por exemplo, pode ser estudada usando absorção óptica intrabanda entre o nível de energia fundamental da banda de condução e os níveis 4 e 7. Para isto usa-se luz incidente com polarização circular, cujas regras de seleção óptica permitem transições entre estados pertencentes a subespaços diferentes ($I \rightarrow II$ ou $II \rightarrow I$) e que conectam estados com $\Delta F_z = \pm 1$ (LÓPEZ-RICHARD et al., 2005). Na fig. 5 têm-se os espectros de absorção, no caso em que a ISO é nula as transições permitidas para a luz incidente com polarização circular ocorre entre os níveis de energia $0\uparrow \rightarrow 4\uparrow$ e para σ^+ entre os níveis $0\uparrow \rightarrow 2\uparrow$, fig. 5 a). Quando a ISO não é nula aparece a transição $0\uparrow \rightarrow 7\uparrow$, para $B > 0,6\text{T}$, pois como discutido os estados 4 e 7 trocam o caráter de spin em aproximadamente $0,6\text{T}$, resultando

em um mini-gap de energia na absorção óptica, mostrado nas figuras 5 b), c) e d). À medida que a ISO aumenta, da figura 5 a) à 5 d) os acoplamentos entre os níveis de energia se tornam mais fortes aumentando o valor do mini-gap de energia.

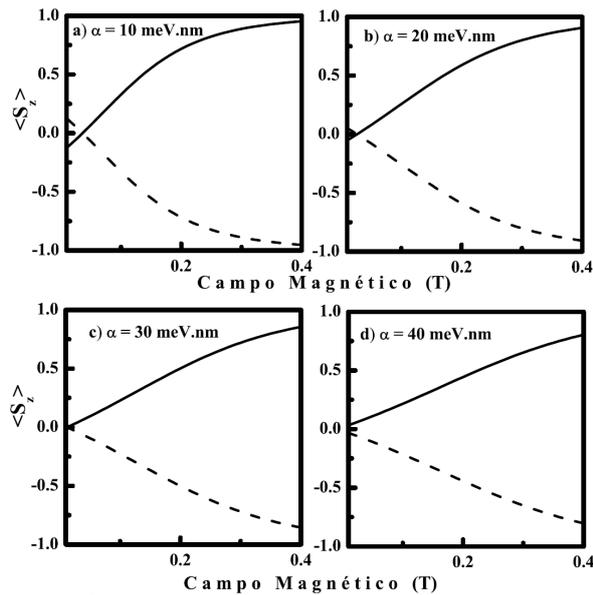
Figura 5 - Espectros de absorção-óptica intrabanda para quatro valores de α , $E_0 = 7,5\text{meV}$ e $H_z = 20\text{\AA}$.



Fonte: O autor.

Como discutido na fig. 3 d), para $H_z = 20\text{\AA}$ e quando $E_0 = 9,5\text{meV}$ não há troca de caráter do spin, então por exemplo, usando este valor da energia de confinamento lateral, pode-se manipular a troca de spins controlando a ISO como mostrado na fig. 6. Finalmente, pode-se controlar as trocas de spin, o valor do mini-gap e as transições ópticas intrabanda através do ajuste de um dos parâmetros, α , H_z ou E_0 mantendo os outros fixos de acordo com interesse em possíveis aplicações tecnológicas.

Figura 6 - Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ para os elétrons confinados com $E_0 = 9,5$ meV.



Fonte: O autor.

Conclusões

Neste trabalho apresentei um estudo sistemático sobre a influência da interação SO Rashba e do strain na banda de condução em um PQ cilíndrico de InAs com campo magnético externo. Os resultados mostram que a ISO age levantando a degenerescência mesmo em campo magnético nulo, assim como alterando a ordem dos níveis de energia excitados. Já o strain age comprimindo os níveis de energia realçando os efeitos da ISO, efeitos estes que podem ser observados através da absorção óptica intrabanda.

Referências

JHA, P. K.; KUMAR, M.; LAHON, S.; GUMBER, S.; MOHAN, M. Rashba spin orbit interaction effect on nonlinear optical properties of quantum dot with magnetic field. *Superlattice and Microstructures*, v. 65, p. 71-78, 2014.

KATO, I.; MYERS, R. C.; GOSSARD, A. C.; AWSCHALOM, D. D. Coherent spin manipulation without magnetic fields in strained semiconductors. *Nature*, v. 427, p. 50-53, 2004.

LI, Y.; LI, Y.-Q. Strain-assisted spin manipulation in a quantum well. *European Physical Journal B*, v. 63, p. 493-500, 2008.

LÓPEZ-RICHARD, V.; ALCALDE, A. M.; PRADO, S. J.; MARQUES, G. E.; TRALLERO-GINER, C. Intraband magneto absorption as a probing for the quantum dot charge. *Applied Physics Letters*, v. 87, p. 231101-1-231101-3, 2005.

MANSELYAN, A.; CHAKRABORTY, T. Enhanced Rashba effect for holes in a quantum dot. *Europhys. Lett.*, v. 88, p. 17003-1-17003-4, 2009.

NADJ-PERGE, S.; FROLOV, S. M.; BAKKERS, E. P. A. M.; KOUWENHOVEN, L. P. Spin-orbit qubit in a semiconductor nanowire. *Nature*, v. 468, p. 1084-1087, 2010.

PIETILÄINEN, P.; CHAKRABORTY, T. Energy levels and magneto-optical transitions in parabolic quantum dots with spin-orbit coupling. *Physical Review B*, v. 73, p. 155315-1-155315-17, 2006.

PRADO, S. J. Absorção-Óptica intrabanda em um ponto quântico parabólico com acoplamento spin-órbita. *Revista Ciências Exatas e Naturais*, v. 15, n 1, p. 49-59, 2013.

PRADO, S. J.; TRALLERO-GINER, C.; ALCALDE, A. M.; LÓPEZ-RICHARD, V.; MARQUES, G. E. Magneto-optical properties of nanocrystals: Zeeman splitting. *Physical Review B*, v. 67, p. 165306-1-165306-10, 2004.

RAICEVIC, N.; TADIC, M. Influence of strain on band Structure of Semiconductor nanostructures. *Serbian Journal of Electrical Engineering*, v. 6, n. 3, p. 461-469, 2009.

VURGAFTMAN, I.; MEYER, J. R. Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, v. 89, n. 11, p. 5815-5875, 2001.

Recebido em 7 Fevereiro 2015 - Received on February 7, 2015.
Aceito em 7 Maio, 2015 - Accepted on May 7, 2015.

