UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
GINETOM SOUZA DINIZ

EFEITOS DE INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA EM ANÉIS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES

Uberlândia

2007

Livros Grátis

http://www.livrosgratis.com.br

Milhares de livros grátis para download.

UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
GINETOM SOUZA DINIZ

EFEITOS DE INTERAÇÃO SPIN-ÓRBITA EM ANÉIS QUÂNTICOS SEMICONDUTORES

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em Física.

Área de Concentração: Física da Matéria Condensada

Orientador:
Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla

Co-orientador:
Prof. Dr. Omar de Oliveira Diniz Neto

Uberlândia

2007

Dissertação de mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física sob o título *"Efeitos de Interação Spin-Órbita em Anéis Quânticos Semicondutores"*, defendida por Ginetom Souza Diniz e aprovada em 22 de Junho de 2007, perante a banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde Milla
Orientador
Universidade Federal de Uberlândia

Prof. Dr. Raigna A. da Silva Zadra Armond
Universidade Federal de Uberlândia

Prof. Dr. Gilmar Eugênio Marques
Universidade Federal de São Carlos

Resumo

Neste trabalho apresentamos o estudo do efeito do acoplamento spin-órbita na estrutura eletrônica de pontos e anéis quânticos semicondutores. As contribuições de Rashba, devido à assimetria da inversão estrutural e de Dresselhaus, causado pela assimetria da inversão cristalina, comum em alguns materiais semicondutores do grupo III-IV, são introduzidos na Hamiltoniana H_0, que descreve um único elétron em presença de campo magnético na direção z. Os autoestados de H_0 são usados no cálculo dos elementos adicionais da nova Hamiltoniana $H = H_0 + H_R + H_D$, que leva em conta ambas as contribuições de Rashba H_R e Dresselhaus H_D no acoplamento spin-órbita. Os autovalores e autovetores de H são calculados através de um esquema de diagonalização númerica usando uma base truncada de autoestados de H_0. Os cálculos da estrutura eletrônica foram implementados em pontos e anéis quânticos de Arseneto de Índio (InAs), os quais são de atual interesse experimental. Estas nanoestruturas, em geral possuem raios médios (r_0) em torno de 30-140nm e altura d =2-5nm. As contribuições de Rashba e Dresselhaus induzem acoplamentos entre estados $|n, m, \sigma_z\rangle$ seguindo a regra de seleção dada por $\Delta_{m,m'} = \pm 1$ e são responsáveis pelo o aparecimento de *crossings* e *anticrossings* no espectro eletrônico e misturas de estados de spin para campos magnéticos bem definidos, que podem ser manipulados através de parâmetros externos, tais como o parâmetro de Rashba, Dresselhaus e geometria do anel. Nossos resultados permitem estabelecer regimes de campos magnéticos e parâmetros de controle externo para modelar convenientemente o comportamento das propriedades magneto-ópticas, processos de decoerência de estados de spin e o fator-g do elétron, os quais são problemas de forte interesse na atual física de semicondutores para aplicação em dispositivos spintrônicos.

Palavras Chaves: Anéis Quânticos; Acoplamento Spin-Órbita; Efeito Rashba; Efeito Dresselhaus.

Abstract

In this work we present a theoretical study of the spin-orbit coupling upon the electronic structure of quantum rings and dots. The contribution of Rashba, due to the structural inversion asymmetry, and the contribution of Dresselhaus, induced by the bulk inversion asymmetry, common in the III-V semiconductor group materials are included in the Hamiltonian H_0, which describe a single-electron in presence of a magnetic field in the z-direction. The eigenstates of H_0 are used in the calculation of the additional elements of the Hamiltonian $H = H_0 + H_R + H_D$, that takes in to account both Rashba (H_R) and Dresselhaus (H_D) contribution in the spin-orbit coupling. The eigenvalues and eigenvectors of H are then calculated through a numerical diagonalization using a truncated base of eigenstates of H_0. The electronic structure calculation were performed in quantum dots and rings of Indium Arsenate (InAs), which are of actual experimental interesting. These nanostructures (quantum rings), in general, have average radius (r_0), around 30-140nm and height about d =2-5nm. The Rashba and Dresselhaus contribution induce coupling among states $|n, m, \sigma_z\rangle$ following the selection rule $\Delta_{m,m'} = \pm 1$ and are responsible by crossings and anticrossings in the electronic spectra, and also by spin state mixing for well defined magnetic field values, that can be manipulated by external parameters such the Rashba parameter, Dresselhaus, and ring geometry. Our results allow to determine specific regimes of magnetic field and external parameters to model in a convenient way the behavior of magneto-optical properties, decoherence process of spin states and electron g-factor, which are problems of actual interest in the semiconductor physics for spintronic device applications.

Keywords: Quantum Rings; Spin-Orbit Coupling; Rashba Effect; Dresselhaus Effect.

Aos meus pais, Noé Diniz e Sílvia Diniz, que sempre me deram todo o suporte necessário para a conclusão deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço à Deus pela minha vida.

Um forte agradecimento ao Prof. Dr. Omar O. Diniz Neto, pelas inúmeras broncas que me ensinaram muito e pela ajuda durante a minha caminhada neste trabalho. E ao Prof. Dr. Augusto Miguel Alcalde, pela enorme paciência, amizade e disposição em me ensinar e orientar nas pesquisas durante esses últimos 2 anos.

Agradeço também à todos os professores do Instituto de Física em especial ao Professor Dr. Qu Fanyao, meu primeiro orientador de pesquisa, com quem aprendi muito e continuo aprendendo e aos amigos Flávio, Igor, Fábio, Karyne, Hanna e tantos outros amigos conquistados durante a minha graduação e pós-graduação.

Também agradeço a CAPES pelo apoio financeiro prestado para a conclusão deste trabalho, e ao Grupo de Pesquisa do Prof. Gilmar Eugênio Marques (UFSCar) pelas valiosas discussões ao longo deste trabalho.

Lista de Figuras

1 Quatro estruturas semicondutoras de diferentes dimensionalidades: (a) bulk, (b) Poço Quântico, (c) Fio Quântico, (d) Ponto Quântico. . . . . p. 13

2 Energia em função do vetor de onda (painéis à esquerda) e densidades de estado em função da energia na banda de condução (painéis à direita) para: (a) bulk, (b) Poço Quântico, (c) Fio Quântico, (d) Ponto Quântico. p. 15

3 Diferentes imagens de microscopia de força atômica (AFM) de anéis quânticos: (a) GaAs crescido por eletrodeposição [22], (b) e (c) InAs crescido por molecular beam epitaxy (MBE) [23, 24], (c) SiGe crescido por MBE [25]. . . . . p. 17

4 Espectro de energia para um elétron em um potencial parabólico em função do campo magnético, com $\hbar\omega_0 = 15$meV e fator-g de Landé igual a -4.4. . . . . p. 20

5 Espectro de energia para um elétron em um anel quântico em função do campo magnético, os círculos vermelhos indicam o estado fundamental que altera seu número quântico m de uma unidade no *crossing* das energias, este efeito é denominado de oscilações de Aharonov-Bohm. . . p. 21

6 Esquema qualitativo da banda de estrutura de GaAs próximo ao *gap* fundamental. . . . . p. 24

7 Esquema do dispositivo proposto por Datta e Das [60], contatos ferromagnéticos são utilizados para injetar e detectar orientações específicas de spins, enquanto elétrons são injetados através do eletrodo ferromagnético 1, no gás de elétrons livres em duas dimensões (2DEG) o spin sofre rotações devido ao acoplamento spin-órbita pela contribuição de Rashba, sendo detectado no eletrodo ferromagnético 2, que preferencialmente irá detectar uma dada orientação, desta forma modulando a corrente. . . . p. 26

8 Esquema pictórico monstrando a assimetria nas interfaces durante o crescimento de uma liga semicondutora. . . . . p. 27

9 Esquema pictórico demonstrando a assimetria na inversão cristalina em nanoestruturas do tipo *zinc-blend*. . . . . p. 28

10 Estrutura de bandas (E-k), para diferentes configurações: (a) Sem acoplamento SO, (b) Com acoplamento SO devido a contribuição de Rashba (α), (c) Com acoplamento SO devido a contribuição de Dresselhaus (β), (d) Com acoplamento SO devido a ambas contribuições de Rashba (α) e Dresselhaus. . . . . p. 30

11 Potencial de confinamento dado pelo modelo de Tan e Inkson *et al.* [1]: a) Ponto Quântico e b) Anel Quântico. . . . . p. 32

12 Figura demonstrando o potencial parabólico do anel para $r \approx r_0$. . . . . p. 33

13 a) Espectro de energia para um ponto quântico sem efeitos de SO em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando que não há *spin splitting* a $B = 0$T, c) Ampliação mais localizada dos níveis $|n = 0, m = -2, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 1, m = 2, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 1, m = 0, \sigma_z = \pm 1\rangle$ (circulados no painel), confirmando que não há quebra da degenerescência para $B = 0$T, d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ dos 106 estados, em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 40

14 a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm sem efeitos de SO em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando que não há *spin splitting* a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos dez primeiros estados $|n = 0, m = -2, \ldots, 2, \sigma_z = \pm 1\rangle$ confirmando que não há quebra da degenerescência (circulados no painel), d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 41

15 a) Espectro de energia para um ponto quântico com efeitos de SO, neste caso a contribuição diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando o *spin splitting* a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos níveis circulados no painel (b) confirmando que há quebra da degenerescência, d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 42

16 a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm e efeitos de SO, neste caso a contribuição diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando o splitting a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos níveis circulados no painel (b), d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 43

17 a) Espectro de energia para um ponto quântico incluindo os efeitos de SO, neste caso a contribuição não-diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 44

18 a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm e efeitos de SO, neste caso a contribuição não-diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 45

19 a) Espectro de energia para um ponto quântico levando em considerção ambas contribuições de Rashba e Dresselhaus no acoplamento SO, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 46

20 a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm e efeitos de SO, considerando todas as contribuições no acoplamento spin-órbita, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$. . . . . p. 47

21 Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ para um ponto quântico em diferentes configurações SO em função do campo magnético. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com valores distintos de dV/dz em presença e ausência da contribuição de Dresselhaus β. . . . . p. 48

22 Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ para um anel quântico com $r_0 = 60$nm em diferentes configurações SO em função do campo magnético. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com valores distintos de dV/dz em presença e ausência da contribuição de Dresselhaus. O esquema de cores o mesmo utilizado na Figura 21. . . . . p. 49

23 Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ em função do campo magnético para diferentes tamanhos de r_0. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com ambas as contribuições de Dresselhaus e Rashba. . . . . p. 50

24 Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ com ambas contruibuições de Rashba e Dresselhaus, em função do campo magnético, para diferentes valores de dV/dz e nanoestruturas. a) Ponto Quântico com dV/dz =2,0meV/nm, b) Anel Quântico com dV/dz =20meV/nm, c) Ponto Quântico com dV/dz =2,0meV/nm, d) Anel Quântico com dV/dz =20meV/nm. Em ambos os casos o parâmetro de Dresselhaus utilizado é de β =2meV-nm, setas são utilizadas para indicar as misturas a campo nulo. . . . . p. 51

25 ΔE do estado fundamental de Zeeman em função de $\hbar\omega_0$ e do campo magnético B, em presença da interação SO com dV/dz=0,25 e 1,0meV/nm e β =1,3meV-nm para um ponto quântico. . . . . p. 52

26 ΔE do estado fundamental de Zeeman em função de $\hbar\omega_0$ e do campo magnético B, em presença de interação SO com dV/dz=0,25 e 1,0meV/nm e β =1,3meV-nm para um anel quântico de $r_0 = 60$nm. Aqui foi usado o mesmo esquema de cores da Figura 25. . . . . p. 53

27 a) Espectro de energia em função do campo magnético. Painel (a) para um ponto quântico, e em (b) um anel quântico com $r_0 = 30$nm. Linhas vermelhas sem acoplamento SO, e linhas pretas em presença de ambas contribuições de Rashba (dV/dz =2,0meV/nm) e Dresselhaus (β =1,3meV-nm). . . . . p. 55

28 a) Diferença de energia para o estado fundamental, $(E_{0,0,\downarrow} - E_{0,0,\uparrow}$, para vários conjuntos de parâmetros de acoplamento SO e raios médios r_0. . p. 56

29 Energia do estado fundamental para spin *up* e spin *down* em função do campo magnético. Linhas tracejadas não são incluídos efeitos de spin-órbita e círculos em presença com dV/dz =2,0meV/nm. O estado down é representado pela cor verde, azul para o estado up e o vermelho para a diferença e energia $\Delta E_{\uparrow-\downarrow}$ em a) anel quântico com raio médio de $r_0 = 30$nm e b) um ponto quântico. . . . . p. 57

30 No painel (a) representamos o espectro de energia para um ponto quântico com efeitos de SO, em função do campo magnético. As setas vermelhas indicam a transição $\Delta j = -1$, as setas azuis a transição $\Delta j = 0$, e as setas pretas o estado dominante de spin. No painel (b), temos um esquema representando as intensidades das transições ópticas através do diâmetro dos círculos, vermelhas para a transição $\Delta j = -1$ (σ^-), azuis para a transição $\Delta j = 0$. . . . . p. 58

Lista de Tabelas

1 Degenerescência do spin para $B = 0$T devido aos efeitos combinados da simetria de inversão espacial e temporal [58] . . . . . p. 26

2 Parâmetros dos materiais utilizados nos cálculos [71]. . . . . p. 40

Sumário

1 Introdução p. 10

1.1 Propriedades básicas de pontos quânticos . . . . . p. 10

1.2 Densidade de Estados em Nanoestruturas - DOS . . . . . p. 11

1.3 Crescimento de Pontos e Anéis Quânticos . . . . . p. 16

1.4 Modelamento Teórico de Pontos e Anéis Quânticos . . . . . p. 18

2 Interação Spin-Órbita p. 23

2.1 Aspectos Gerais da Interação Spin-Órbita (SO) . . . . . p. 23

2.2 Efeito de Rashba . . . . . p. 27

2.3 Efeito de Dresselhaus . . . . . p. 28

2.4 Efeito Rashba e Dresselhaus em um gás de elétrons bidimensional 2DEG p. 28

3 Modelo Teórico p. 31

3.1 Potencial lateral em anéis quânticos . . . . . p. 31

3.2 Contribuição de Rashba . . . . . p. 34

3.2.1 Elementos de matriz . . . . . p. 36

3.3 Contribuição de Dresselhaus . . . . . p. 37

3.3.1 Elementos de Matriz . . . . . p. 38

3.4 Problema de Autovalores . . . . . p. 38

4 Resultados p. 39

4.1 Anel sem acoplamento spin-órbita . . . . . p. 40

4.2 Anel com contribuição diagonal de Rashba . . . . . p. 42

4.3 Anel com contribuição não-diagonal de Rashba . . . . . p. 44

4.4 Anel quântico com todas as contribuições . . . . . p. 46

4.5 Manipulação do spin através de parâmetros de acoplamento e tamanho do anel . . . . . p. 48

4.6 Dependência do Zeeman *splitting* com os parâmetros geométricos e de SO p. 52

4.7 Fator-g em pontos e anéis quânticos . . . . . p. 54

5 Conclusão p. 60

Referências p. 62

Apêndice A – Resumos e Artigos p. 67

A.1 Resumos em congressos . . . . . p. 67

A.2 Artigos em Revistas Especializadas . . . . . p. 68

1 *Introdução*

A presente dissertação tem como objetivo estudar os efeitos da interação spin-órbita (SO) na estrutura eletrônica, levando em consideração as contribuições de Rashba e Dresselhaus em anéis quânticos semicondutores através de um modelo de potencial proposto por Inkson e Tann [1]. O potencial é ajustado através de parâmetros de controle que permitem descrever o confinamento eletrônico tanto em pontos como para anéis quânticos.

Neste capítulo serão discutidos brevemente os aspectos mais importantes da física de nanoestruturas semicondutoras, como os efeitos da redução da dimensionalidade e os processos de crescimento que permitem controlar a forma geométrica das nanoestruturas de interesse. Discutiremos aspectos fundamentais da estrutura eletrônica em sistemas com confinamento espacial nas três direções, como é o caso dos pontos e anéis quânticos. Finalmente apresentaremos uma discussão sobre a interação spin-órbita e as chamadas contribuições de Rashba e Dresselhaus e analisaremos seu impacto no comportamento da estrutura eletrônica para o caso de um gás de elétrons bidimensional (2DEG).

1.1 Propriedades básicas de pontos quânticos

Pontos quânticos (PQ) podem ser definidos como nanoestruturas capazes de confinar elétrons e buracos em todas as direções espaciais. Eles são freqüentemente modelados como barreiras de potencial de confinamento tridimensional, ou como caixas quânticas definidas com barreiras de potenciais finitas. O confinamento é usualmente produzido eletrostaticamente ou pela apropriada manipulação geométrica dos materiais na escala nanométrica. As dimensões típicas de pontos quânticos variam desde poucas até várias centenas de nanômetros, o qual resulta na quantização do espectro de energia da partícula. As regiões energeticamente proibidas (*gaps*) ou lacunas de energia entre os níveis são tipicamente da ordem de milieletronvolts (meV).

Devido a essas características, os pontos quânticos são usualmente denominados áto-

mos artificiais. Assim como em átomos, em pontos quânticos, as funções de onda dos portadores são fortemente localizadas no potencial de confinamento que define o ponto quântico, e suas autoenergias correspondentes formam um espectro discreto. Se o PQ possui alta simetria, estes níveis formam camadas que imitam as camadas atômicas (*s, p, d*, etc.) com degenerescências equivalentes. Também, em pontos quânticos é possível obter alto controle do número de portadores confinados, os quais variam de um até centenas de elétrons, e assim é possível reproduzir uma tabela periódica de Mendeleev para elementos tipo PQ [2, 3].

Os portadores podem relaxar ou se promover de um nível para outro sujeito a regras de seleção similares aquelas encontradas em átomos, entretanto, existem notáveis diferenças entre átomos artificiais e átomos naturais. Primeiramente, PQs podem confinar tanto buracos quanto elétrons, enquanto o potencial do núcleo atômico pode apenas confinar portadores negativos. Além disso, o confinamento lateral em pontos quânticos é usualmente suave e, em muitos casos, aproximadamente parabólico em contraste ao potencial de Coulomb dos átomos, que possui uma singularidade na posição do núcleo. Também, PQs são compostos de milhares de átomos ou mais. Esta característica produz uma separação entre níveis tipicamente da ordem de dezenas de meV, enquanto que em átomos, essas camadas são separadas por poucos eV. Outra diferença, o confinamento lateral (potencial de Coulomb) em átomos é fixado e definido pela carga eletrostática do núcleo, o que torna difícil alterar o número de elétrons confinados por ele. Por outro lado, em certos tipos de PQs, o confinamento lateral pode ser modificado e o mesmo dispositivo pode conter de zero a centenas de elétrons confinados.

Experimentalmente, a primeira tentativa bem sucedida de crescimento de PQs datam da década de 80 [15]. Desde então as tecnologias de fabricação tiveram um rápido progresso, e hoje é possível crescer pontos de várias formas e tamanhos, incluindo nanoestruturas tipo anel quântico. Devido as inúmeras propriedades indicadas acima, os PQs tornaram-se de grande interesse tanto para pesquisa fundamental quanto para a implementação de dispositivos ópticos, optoeletrônicos e spintrônicos.

1.2 Densidade de Estados em Nanoestruturas - DOS

O controle do número de portadores confinados é de grande importância na física de nanoestruturas. O número dos portadores pode ser controlado por meio de dopagem e aplicação de campos magnéticos e elétricos externos. Discutiremos aqui, de uma forma

bastante simplificada, como é modificada a densidade de estados eletrônicos quando a dimensionalidade do sistema é progressivamente reduzida.

Assumindo que o material semicondutor seja isotrópico, com bandas de energias parabólicas, superfícies de energia esféricas e considerando apenas elétrons na banda de condução, será calculada a densidade de estados como função do vetor de onda k. Consideraremos o número de estados eletrônicos $n(k)$ contidos em uma região infinitesimal $d^m k$ no vetor de onda k, onde $m = 3$, 2 ou 1 é a dimensionalidade do material (o caso de estruturas de dimensão zero será estudado separadamente). A densidade de estados é definida como [16]

$$DOS\,(k) = \frac{dn\,(k)}{dk}. \tag{1.1}$$

Esta expressão pode conter um fator extra devido à degenerescência dos níveis quando levado em consideração o spin. Usualmente a densidade de estados é calculada como função da energia na banda; considerando uma relação de dispersão $E - k$ quadrática:

$$E\,(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}, \tag{1.2}$$

onde μ é a massa efetiva do elétron, e k é o comprimento do vetor de onda $\vec{k}$. Combinando as duas expressões acima, podemos calcular a densidade de estados:

$$DOS\,(E) = \frac{dn\,(E)}{dE}. \tag{1.3}$$

Vamos agora considerar quatro tipos de estruturas semicondutoras, como apresentado na Figura 1. Na parte (a) desta figura, temos uma amostra macroscópica do material semicondutor *bulk*. Se as dimensões desta amostra são infinitas, o espectro de energia de uma partícula simples nas bandas de condução e valência é contínua, e então podemos utilizar coordenadas esféricas na Equação (1.1). Com isso a função $n\,(k)$ dará o número de estados contidos entre duas superfícies esféricas, uma com raio k, e outra com raio $k + dk$, e será

$$n^{3D}\,(k) = \frac{1}{(2\pi)^3} 4\pi k^2 dk, \tag{1.4}$$

como resultado, a função densidade de estados como função da energia será dada pela bem conhecida forma:

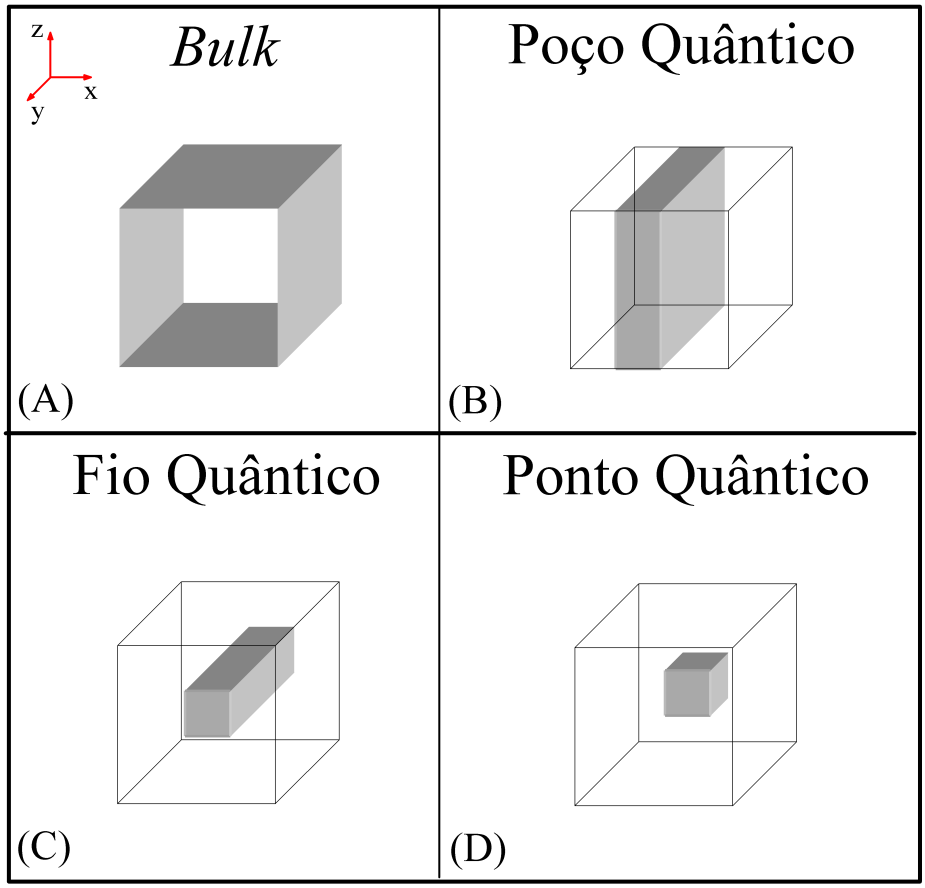

Figura 1: Quatro estruturas semicondutoras de diferentes dimensionalidades: (a) bulk, (b) Poço Quântico, (c) Fio Quântico, (d) Ponto Quântico.

$$DOS^{3D}(E) = \frac{1}{(2\pi)^2}\left(\frac{2\mu}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}. \tag{1.5}$$

A energia como função do vetor de onda eletrônico k é mostrada à esquerda do painel da Figura 2 (a), e a função DOS como função da energia à direita do painel (a). Dimensões finitas da amostra introduzem condições de contorno nas interfaces do sistema resultando na quantização dos níveis de energia, mas se as dimensões são suficientemente grandes, o espaçamento entre os níveis é pequeno. O espectro torna-se quase contínuo e as mudanças na densidade de estados são desprezíveis.

Se camadas de dois materiais A e B, caracterizadas por *gaps* diferentes são crescidas alternadamente obteremos então uma estrutura comumente denominada super-rede. Se o sistema é restrito a poucas camadas ($A-B-A$), obteremos um poço quântico, tal como mostrado na Figura 1 (b). Dependendo das relações entre os *gaps* (como exemplo A possuindo um maior *gap*), um material atuará como poço onde os portadores permanecerão confinados, podendo-se mover livremente no plano perpendicular à direção de

crescimento, mas seu movimento ao longo da direção de crescimento será fortemente quantizado. Assim, se a direção de crescimento for orientada ao longo do eixo-z o espectro de energia consistirá de níveis de energia discretos $E_z = E_0, E_1, \ldots$. As energias associadas ao movimento no plano $x - y$ (subbandas de energia) serão quase-contínuas e em geral existirá uma dependência do tipo quadrático: $E_{\|} \propto k_x^2 + k_y^2$, Na parte esquerda do painel da Figura 2 (b) é mostrada este espectro de energia em função do vetor do onda no plano $k_{\|}$. Neste caso, a função $n(k)$ descreve o número de estados de cada subbanda contida entre dois contornos circulares, um com raio k, e outro com raio $k+dk$, e será

$$n^{2D}(k) = \frac{1}{(2\pi)^2} 2\pi k dk, \tag{1.6}$$

a densidade de estados resultante do poço quântico é zero para energias abaixo de E_0, com isso exibirá uma dependência escalonada com a energia, com degraus iniciando em energias E_i, isto é, na borda da subbanda do poço quântico:

$$DOS^{2D}(E) = \sum_i \frac{1}{2\pi} \frac{\mu}{\hbar^2} H(E - E_i). \tag{1.7}$$

$H(x)$ é a função de Heaviside e é igual a 1 para $x \geq 0$, e zero para qualquer outro valor, e i enumera as subbandas do poço quântico. Esta densidade de estados é mostrada na parte direita do painel da Figura 2 (b).

Um fio quântico, esquematicamente mostrado na Figura 1 (c), é formado quando o movimento dos portadores é restrito em duas direções espaciais, sendo o portador livre para se mover na terceira direção. O espectro eletrônico de energia agora consistirá de níveis discretos, sendo que na direção ao longo do fio haverá um espectro quase-contínuo unidimensional de energias $E_y \propto k_y^2$. Este espectro é mostrado em função do vetor de onda eletrônico na parte esquerda do painel da Figura 2 (c). Neste caso a função $n(k)$ para cada subbanda descreve o número de estados contidos em uma seção unidimensional do espaço recíproco entre dois vetores de onda k e $k + dk$, e é dado por:

$$n^{1D}(k) = \frac{1}{2\pi} dk, \tag{1.8}$$

a densidade de estados total do fio quântico consistirá de uma série de picos com forma de uma inversa da raiz quadrada, centrada nas bordas das subbandas do fio quântico:

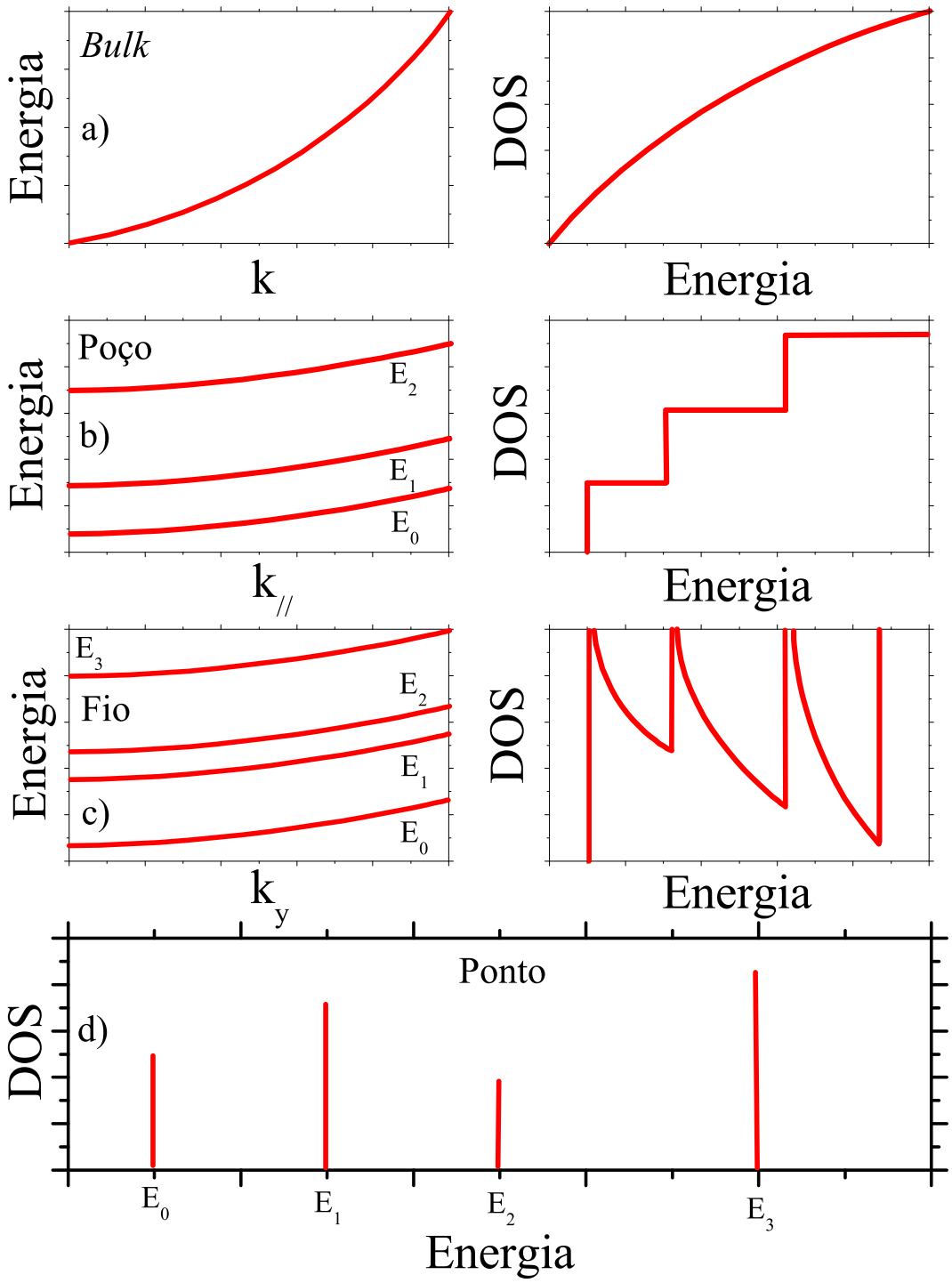

Figura 2: Energia em função do vetor de onda (painéis à esquerda) e densidades de estado em função da energia na banda de condução (painéis à direita) para: (a) bulk, (b) Poço Quântico, (c) Fio Quântico, (d) Ponto Quântico.

$$DOS^{1D}(E) = \sum_i \frac{1}{4\pi}\left(\frac{\mu}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{(E-E_i)^{\frac{1}{2}}} H(E-E_i)\,. \tag{1.9}$$

Esta função é mostrada no parte direita do painel da Figura 2 (c).

Finalmente, se o movimento dos portadores é restrito nas três direções espaciais (estrutura zero-dimensional), o sistema é denominado ponto quântico. Este sistema é obtido quando o material do poço é confinado por barreiras de potencial em todos as direções espaciais, como mostrado na Figura 1 (d). Com isso o espectro eletrônico consistirá de estados discretos E_j, e a densidade de estados será composta por picos centrados nas energias E_j semelhantes a uma função delta. A altura destes picos correspondem as degenerescências dos níveis. Na Figura 2 (d) é mostrada a densidade eletrônica de um ponto quântico, considerando uma base quadrada e a altura pequena quando comparada com a dimensão lateral. Devido a esta disparidade das dimensões, o efeito do forte confinamento vertical será diferente do efeito introduzido pelo confinamento lateral na nanoestrutura. Sendo assim espera-se uma maior diferença de energia nos níveis devido ao confinamento vertical. A estrutura eletrônica devido ao confinamento lateral apresentará também níveis discretos, porém com espaçamentos de energia bem menores. De fato, se a altura do ponto quântico é suficientemente pequena, a energia da segunda banda vertical pode estar situada acima da barreira, então os estados de energia mais baixos conterão apenas os modos verticais de mais baixa energia. Além disso, devido a simetria quadrada da base do ponto quântico [Figura 1 (d)], é de se esperar que o primeiro estado excitado do sistema seja duplamente degenerado, o qual irá refletir na altura do pico da função delta (densidade de estados) correspondente na Figura 2 (d). O esquema da Figura 2 (d), obviamente é válido apenas nas regiões de energia correspondentes aos estados de mais baixa energia da barreira. Energias acima da barreira correspondem aos estados contínuos. Como mencionado anteriormente, a forma do ponto quântico pode induzir ou não degenerescências nos níveis.

Na próxima seção, serão descritas brevemente as técnicas mais utilizadas para o crescimento dessas estruturas e também os tipos de geometria, incluindo a geometria tipo anel quântico.

1.3 Crescimento de Pontos e Anéis Quânticos

Em duas décadas de progresso tecnológico nesta área muitas técnicas de crescimento foram desenvolvidas, tendo como ponto de partida o crescimento de super-redes e poços quânticos. Particularmente, para o caso dos sistemas tipo ponto ou anel quântico, um primeiro processo de crescimento de nanoestruturas que é importante citar, utiliza técnicas de litografia e corrosão com o qual é possível obter nanopilares com uma pequena quantidade de material do poço ao longo da altura [17, 18]; tal processo é denominado de

etching. Um segundo processo para crescimento de pontos quânticos é realizado, evaporando uma matriz de mini eletrodos metálicos sobre uma superfície semicondutora; e em seguida, aplica-se diferenças de potencial nos eletrodos, formando desta forma potenciais de confinamento laterais puramente eletrostáticos [4]. Outras técnicas de crescimento envolvem a iluminação seletiva da superfície por um feixe laser muito intenso. Este feixe causa uma interdifusão do poço e dos materiais da barreira, o qual acarretá na modulação da espessura do poço e criação de pontos quânticos [19].

Um método completamente diferente - epitaxia seletiva, envolve o crescimento de um substrato *bulk* da barreira do material com uma máscara sobre sua superfície. Então, utilizando métodos litográficos, são criadas pequenas aberturas na máscara, e então é depositado o material do poço quântico. O material do poço absorverá sobre o substrato apenas nas aberturas, e então como resultado, é obtido um conjunto de pequenas ilhas quânticas [20, 21].

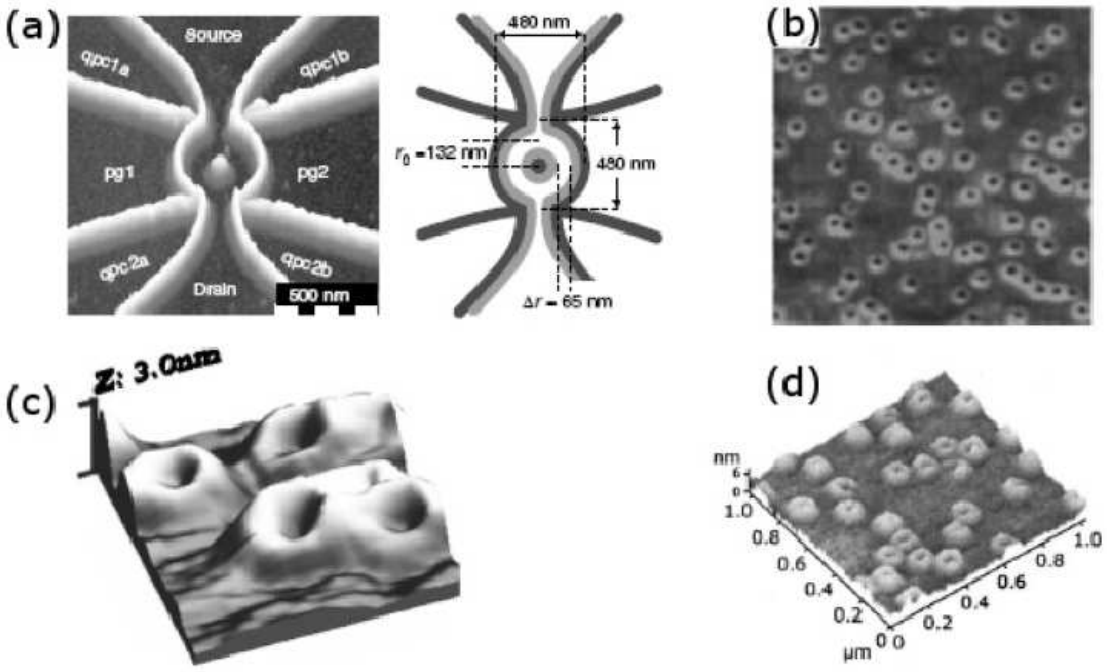

Figura 3: Diferentes imagens de microscopia de força atômica (AFM) de anéis quânticos: (a) GaAs crescido por eletrodeposição [22], (b) e (c) InAs crescido por molecular beam epitaxy (MBE) [23, 24], (c) SiGe crescido por MBE [25].

Utilizando os métodos acima mencionados, é possível crescer pontos quânticos de diversas formas e tamanhos. Em particular, o crescimento de estruturas tipo anel quântico, já foi reportado na literatura. Foram usadas técnicas como a litografia e corrosão e o método de auto-montagem (*self assembled*), que utiliza de processos de crescimento epi-

taxial, como o *Molecular Beam Epitaxy* (MBE). Na Figura 3, são mostradas imagens de microscopia de força atômica (AFM) de anéis quânticos de GaAs (a) crescido por eletrodeposição, na Figura (b), (c) e (d) anéis quânticos crescidos por MBE. São diversos tipos de materiais usados no crescimento de anéis quânticos, como InAs [23, 24, 26, 27], SiGe [25], CdTe [28], e também diferentes formas, como os anéis simples citados anteriormente e o anel duplo concêntrico, recentemente reportado [29].

1.4 Modelamento Teórico de Pontos e Anéis Quânticos

Na seção anterior, mostramos que os pontos quânticos podem ser crescidos em uma inúmera variedade de formas e tamanhos, e o confinamento lateral de cada um deles possui sua própria característica de simetria. Cálculos detalhados levando-se em conta as particularidades de cada simetria, requerem extremo esforço computacional, utilizando-se por exemplo, da teoria do funcional da densidade [30], com a qual é possível estudar a estrutura no seu comportamento atômico. Porém, devido a enorme quantidade de átomos agrupados em *clusters* para formar o ponto ou anel quântico, tal cálculo não é trivial. Uma outra possibilidade de estudar o comportamento das formas geométricas dos PQs é o método dos elementos finitos [31], que discretiza a região de interesse das nanoestruturas em um número finito de elementos (por exemplo triangulares não-uniformes). A função de onda total será uma combinação das funções de onda de cada elemento da região; sendo assim, será possível analisar diferentes formas e estudar o comportamento da estrutura eletrônica [32]. Um outro método também bastante eficiente e utilizado é o método multibandas $\vec{k} \cdot \vec{p}$ [33, 34] onde é considerado o acomplamento entre as diversas bandas, este porém, apenas utilizado em nanoestruturas de alta simetria, e consegue descrever as propriedades, principalmente em estruturas tipo *zinc-blend*[1].

Uma forma mais simples de estudar o comportamento eletrônico dos pontos quânticos sem perder informações físicas fundamentais, é aproximar a complexa estrutura do potencial de confinamento por um modelo de potencial efetivo simples. Por exemplo, um ponto quântico de simetria esférica, é freqüentemente modelado por um potencial do tipo parabólico $V(r_0) = \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r_0^2$. A utilização desse potencial para aproximar o confinamento eletrônico de um ponto quântico, é comumente utilizado, sem acarretar perdas de informações físicas [4, 5, 35, 8], assim a Hamiltoniana para um elétron em presença de campo magnético $\mathbf{B} = (0, 0, B)$ perpendicular ao plano pode ser escrito da seguinte forma:

[1] estruturas onde não possuem simetria de inversão *bulk*.

$$\hat{H} = \frac{1}{2\mu}\left(\hat{p} + \frac{e}{c}\hat{A}\right)^2 + \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 r_0^2 \pm \frac{1}{2}g\mu_B B, \tag{1.10}$$

onde μ e e é a massa efetiva e a carga do elétron respectivamente, c é a velocidade da luz, ω_0 é a freqüência característica do potencial de confinamento, $\hat{p}$ é o momento e $\hat{A}$ o vetor potencial magnético. O último termo da Hamiltoniana é o termo de Zeeman, com g sendo o fator-g de Landé, $\mu_B = \frac{e\hbar}{\mu}$ sendo magnéton de Bohr. O problema acima foi resolvido analiticamente por Fock [37] e Darwin [36], e este é, justamente o motivo pelo qual o espectro eletrônico de uma única partícula com potencial parabólico ser chamado de espectro de Fock-Darwin.

A princípio desprezando o termo de Zeeman (depois será incluído novamente) e usando as variáveis complexas (com a notação compacta $\partial_i = \frac{\partial}{\partial i}$),

$$z = x + iy, \qquad z^* = x - iy, \tag{1.11}$$

$$\partial_z = \frac{\partial_x - i\partial_y}{2}, \qquad \partial_z^* = \frac{\partial_x + i\partial_y}{2}, \tag{1.12}$$

podemos definir dois pares de operadores escadas:

$$\begin{aligned} a &= \frac{z^*/(2l_0) + 2l_0\partial_z}{\sqrt{2}}, \qquad a^+ = \frac{z/(2l_0) - 2l_0\partial_z^*}{\sqrt{2}} \\ b &= \frac{z/(2l_0) + 2l_0\partial_z^*}{\sqrt{2}}, \qquad b^+ = \frac{z^*/(2l_0) - 2l_0\partial_z}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \tag{1.13}$$

onde $l_0 = \frac{\ell_B}{\left(1+4\omega_0^2/\omega_c^2\right)^{\frac{1}{4}}}$ é a comprimento efetivo, igual ao comprimento magnético na ausência de potencial de confinamento $\ell_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$. Utilizando estes operadores, a Hamiltoniana [Equação (1.10)], pode ser escrita da forma [15]:

$$H = \hbar\omega_+\left(a^+a + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_-\left(b^+b + \frac{1}{2}\right). \tag{1.14}$$

É possível mostrar que a Hamiltoniana acima possui como solução os seguintes autoestados [15]:

$$|nm\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}}\left(a^+\right)^n\left(b^+\right)^m|00\rangle, \tag{1.15}$$

e as autoenergias do estado $|nm\rangle$ são dadas por:

$$\varepsilon(n,m,\sigma) = \hbar\omega_+\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_-\left(m + \frac{1}{2}\right) \pm \frac{1}{2}\mu_B g B, \tag{1.16}$$

onde $\omega_{\pm} = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{4}\omega_c^2} \quad \pm \frac{1}{2}\omega_c$, e ω_c é a freqüência ciclotrônica, n, m =0, 1, 2,.... Na Figura 4 (aqui levando em consideração o termo de Zeeman) temos o espectro característico de Fock-Darwin, mostrando as formações dos níveis de Landau (circulados na figura). Os dois primeiros níveis (camada s) é formada pelos estados com $n = m = 0$, camada (p) é formada pelos estados (n,m)=(0,1) e (n, m)=(1,0) ambos degenerados em relação ao spin. A terceira camada d, é formada pelos estados (n,m)=(0,2),(1,1) e (2,0) também degenerados em relação ao spin, outras camadas são geradas de forma análoga.

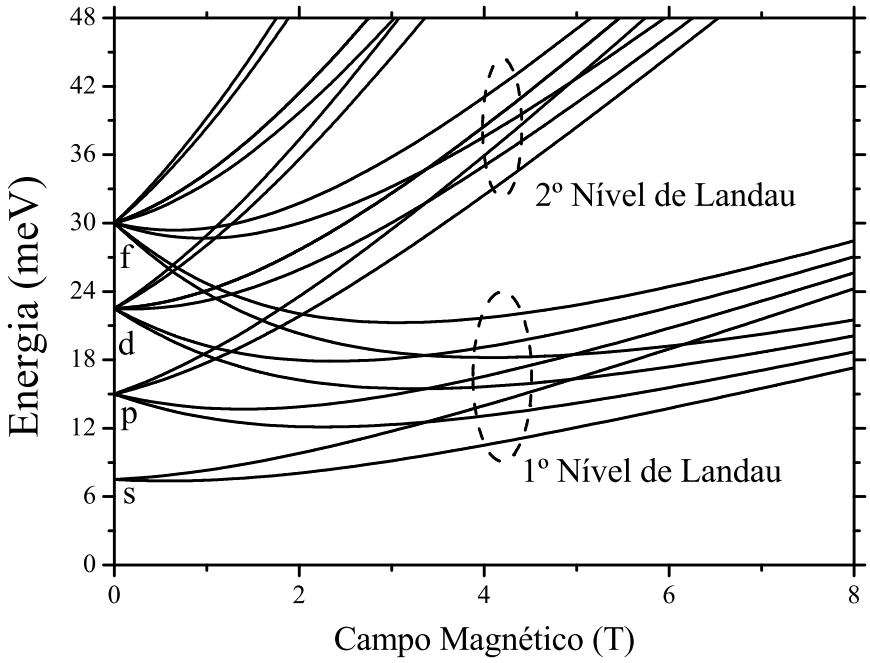

Figura 4: Espectro de energia para um elétron em um potencial parabólico em função do campo magnético, com $\hbar\omega_0 = 15$meV e fator-g de Landé igual a -4.4.

Em geral, os potenciais analíticos e simples que descrevem os efeitos de confinamento espacial explicam, de modo bastante satisfatório, importantes propriedades dos sistemas de dimensão reduzida, como propriedades ópticas, efeitos de muitos corpos [6] e problemas de transporte [9].

Para o caso de anéis quânticos, existe na literatura uma grande variedade de potenciais que permitem modelar os efeitos do confinamento espacial [39, 40, 41]. O modelo mais simples considera a partícula confinada em um fio, em um contorno fechado, com um potencial fixo em r=R e z=0 igual $V_R(R, \varphi, z)$. A Hamiltoniana, para este tipo de modelamento em presença de campo magnético fica [42]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu R^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} + \frac{1}{8}\mu\omega_c^2 R^2 - \frac{i}{2}\hbar\omega_c\frac{\partial}{\partial\varphi}, \tag{1.17}$$

os autoestados da Hamiltoniana acima são:

$$\psi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi R}} e^{im\varphi}, \tag{1.18}$$

com $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ sendo o número quântico magnético. As autoenergias são dadas por:

$$E(m) = \frac{1}{2\mu R^2} (m + N_\phi)^2 . \tag{1.19}$$

Nesta equação N_ϕ é o número de fluxo magnético que atravessa o anel, esta quantidade é definida como $N_\phi = \frac{\pi R^2}{2\pi l^2}$, com $l \sim B^{\frac{-1}{2}}$ o comprimento magnético. Importantes propriedades físicas podem ser analisadas utilizando este simples modelo. Por exemplo, podemos ver na Figura 5, que a energia do estado fundamental (marcado com círculos vermelhos) exibe oscilações em função do campo magnético. Este efeito é conhecido como oscilações de Aharonov-Bohm [43]. Note que em cada máximo da energia ocorre uma transição no estado fundamental; neste ponto o momento angular do estado fundamental muda de uma unidade; este comportamento é completamente distinto do observado no espectro de energia parabólico para ponto, sendo uma característica de estruturas tipo anel.

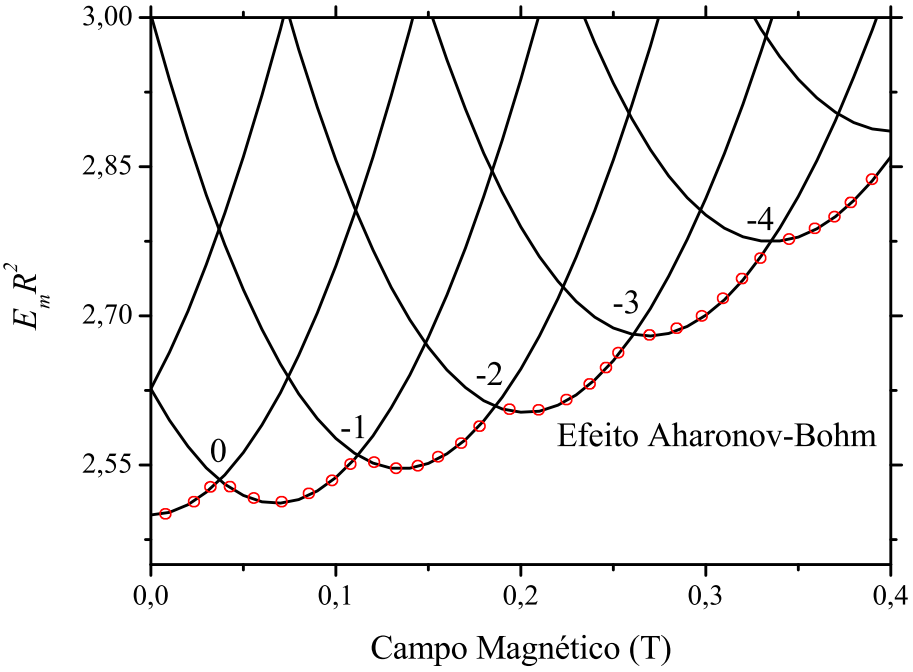

Figura 5: Espectro de energia para um elétron em um anel quântico em função do campo magnético, os círculos vermelhos indicam o estado fundamental que altera seu número quântico m de uma unidade no *crossing* das energias, este efeito é denominado de oscilações de Aharonov-Bohm.

Um outro tipo de modelo de confinamento, este um pouco mais sofisticado, considera os raios interno e externo do anel, bem como a sua excentricidade; neste quesito existe uma grande variedade de trabalhos que levam em consideração essa característica [44, 39, 41, 45, 22]. Recentemente, com o desenvolvimento de técnicas de crescimento de nanoestruturas, inúmeras formas de anéis são crescidos e estudados; entre eles, anéis duplos concêntricos [44, 46], anéis acoplados vertical e horizontalmente [40].

Atualmente, as propriedades físicas dos anéis quânticos têm despertado crescente interesse. Particularmente, tem sido estudados o efeito Aharonov-Bohm [39, 47, 48], fases geométricas [49], correntes persistentes [50, 48], magnetização [48, 51], *shot noise* [52] e ressonâncias de Fano [53]. Devido ao grande interesse na área da spintrônica[2][54], também estão sendo, propostos modelos de *qubits*[3] baseados em estados eletrônicos do spin em anéis quânticos [55].

[2]spintrônica é um neologismo para a eletrônica baseada em spins.

[3]Um qubit é um sistema quântico com dois diferentes estados, convenientemente denotados como $|0\rangle e |1\rangle$, e é considerada a mais pequena e indivisível unidade de informação quântica. Diferente do caso clássico, um qubit puro é uma superposição linear dos estados $|0\rangle e |1\rangle$.

2 *Interação Spin-Órbita*

2.1 Aspectos Gerais da Interação Spin-Órbita (SO)

A natureza relativística deste acoplamento pode ser entendido pela aproximação da equação de Dirac [56] a baixas velocidades (equação de Pauli). Esta aproximação leva a uma correção da equação de Schrödinger não-relativística da forma:

$$H_{SO} = \frac{-\hbar}{(2m_0c)^2}\nabla V(\vec{r}) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}), \tag{2.1}$$

onde m_0 é a massa do elétron em repouso, c é a velocidade da luz, e $\vec{\sigma}$ são as matrizes de Pauli. $V(\vec{r})$ é o potencial eletrostático no qual o elétron se propaga com momento $\vec{p}$. A correção definida em (2.1) é chamada de acoplamento spin-órbita de Pauli. Na equação formal de Pauli aparecem também contribuições proporcionais a $\nabla^2 V$ conhecida como termo de Darwin, assim como correções da energia cinética e do termo de Zeeman. Todos estes efeitos não serão incluídos no presente trabalho.

Em sólidos cristalinos, a dinâmica dos elétrons é caracterizada por bandas de energia $E_n(k)$, com n o índice da banda e k o vetor de onda. Como no caso atômico, a interação SO causará importantes efeitos sobre a estrutura de bandas de energia $E_n(k)$. Por exemplo, em semicondutores como GaAs, a interação SO causa um *splitting* da banda de valência, como pode ser notado qualitativamente na Figura 6. A banda devida aos buracos leves (LH) e buracos pesados (HH) sofrem *splitting* próximo ao *gap* fundamental devido ao acoplamento spin-órbita.

Os primeiros trabalhos enfatizando que efeitos do acoplamento SO de Pauli poderiam ter importantes conseqüências para os níveis de energia eletrônico em um semicondutor *bulk*, foram feitos por Elliot (na realidade o trabalho é de autoria de Adams [10], porém feito por sugestão de Elliot) e por Dresselhaus *et al.* [11]. Após esses trabalhos, efeitos de acoplamento SO em uma estrutura *zinc-blend bulk* foram discutidas em dois trabalhos clássicos por Parmenter [12] e Dresselhaus [66]. Diferentemente da estrutura de Si e Ge,

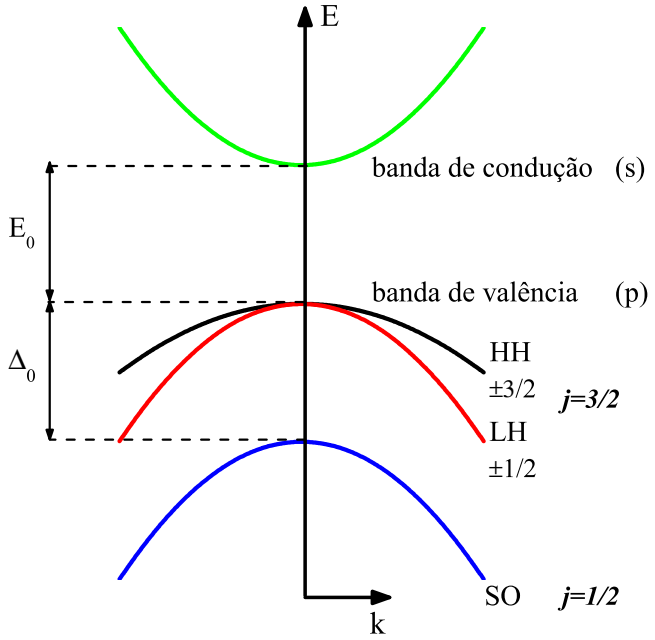

Figura 6: Esquema qualitativo da banda de estrutura de GaAs próximo ao *gap* fundamental.

a estrutura *zinc-blend* não possui um centro de inversão. Por causa disso, podemos ter um spin *splitting* do estado do elétron e do buraco em um vetor de onda k não nulo até mesmo a campo magnético B =0T. Nos cristais com centro de inversão, como o Si e o Ge, ao contrário do que ocorre com estruturas *zinc-blend*, há uma dupla degenerescência dos estados de Bloch para todos os vetores de onda k. Claramente, o spin *splitting* dos estados de Bloch na estrutura *zinc-blend* deve ser uma conseqüência do acoplamento SO, pois de outra forma o grau de liberdade do spin dos elétrons de Bloch deveriam "saber"quando estivessem se movendo em uma estrutura tipo diamante ou *zinc-blend*.

Na física de estado sólido, é extremamente complexo, analisar uma equação de Schrödinger microscópica para os elétrons de Bloch em um potencial periódico da rede num cristal. Freqüentemente, cálculos da estrutura de bandas para os estados eletrônicos na vizinhança do *gap* fundamental, são baseados no método $\vec{k}\cdot\vec{p}$ e na aproximação da função envelope. Aqui, acoplamentos SO entram unicamente em termos de operadores dos elementos da matriz (2.1), entre estados de Bloch na borda da banda, tal como o *gap* de SO, Δ_0, na Figura 6. Estes elementos de matriz provém uma conveniente parametrização dos efeitos do acoplamento SO em estruturas semicondutoras.

Além do splitting a B =0T, em semicondutores sem centro de inversão, há um segundo efeito importante devido ao acoplamento SO que ocorre no efeito Zeeman de elétrons e buracos. O *splitting* de Zeeman que é caracterizado pelo fator-g efetivo g, pode se diferenciar substancialmente do fator-g do elétron livre g_0 =2. Este fato foi, primeiramente,

visto por Roth *et al.* [13], que mostrou usando o método $\vec{k}\cdot\vec{p}$, que o fator-g dos elétrons pode ser parametrizado usando o *gap* de SO, Δ_0.

Para avaliar os efeitos da interação SO em sistemas de estado sólido, compararemos a conhecida equação de Pauli com a Hamiltoniana efetiva, obtida ao desacoplar as bandas de condução e valência, usando como ponto de partida a Hamiltoniana 8×8 de Kane. Esta Hamiltoniana leva em consideração os acoplamentos tipo $\vec{k}\cdot\vec{p}$ entre bandas de condução tipo Γ_6 e bandas de valência Γ_7 e Γ_8. Apesar do modelo de Kane ser uma simplificação da complexa natureza da estrutura de bandas em um sólido, válida para pontos de alta simetria no espaço-k, esta aproximação permite capturar os elementos mais importantes da física de nanoestruturas semicondutoras que pretendemos discutir.

A forma efetiva da Hamiltoniana desacoplada de Kane (para maiores detalhes ver referência [14]) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\left[T_1 + V - T_2 + T_3 - T_4\right]\tilde{\psi}_c = \tilde{E}\tilde{\psi}_c. \tag{2.2}$$

Os termos T_1, T_2, T_3, T_4, são dados por:

$$T_1 = \frac{P^2}{3}\left[\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0+\Delta_0}\right]k^2, \tag{2.3}$$

$$T_2 = \frac{P^2}{3}\left[\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0+\Delta_0}\right]\frac{e}{\hbar}\sigma\cdot\mathbf{B}, \tag{2.4}$$

$$T_3 = \frac{eP^2}{3}\left[\frac{1}{E_0^2} + \frac{1}{(E_0+\Delta_0)^2}\right]\sigma\cdot\mathbf{k}\times\varepsilon, \tag{2.5}$$

$$T_4 = \frac{eP^2}{6}\left[\frac{2}{E_0^2} + \frac{1}{(E_0+\Delta_0)^2}\right]\nabla\cdot\varepsilon, \tag{2.6}$$

onde, T_1 é a energia cinética usando a expressão de Kane para a massa efetiva, T_2 é o termo de Zeeman usando a fórmula de Roth, T_3 é o termo de Rashba [64], análogo ao acoplamento SO de Pauli na Equação (2.1), e T_4 é o termo de Darwin. Em geral, a degenerescência dos estados de spin dos elétrons e buracos num semicondutor, é definida, pelo efeito combinado da simetria de inversão espacial e temporal (*time-reversal*). Em geral ambas as operações de simetria, modificam o vetor de onda k para $-k$, mas a inversão temporal, além de modificar o vetor de onda, também modifica o spin. Devido a este fato, quando ambas operações são combinadas, temos uma degenerescência das energias de uma partícula simples, $E_+(k) = E_-(k)$ (ver Tabela 1, aqui E_+ e E_- representam a energia relativa ao spin *up* e spin *down*), que pode ser quebrada devido a efeitos de acoplamento SO, que quebra a degenerescências das bandas e provoca a remoção da simetria de inversão

temporal em presença de campos magnéticos externos [57].

Simetria de Inversão Espacial: $E_+(k) = E_+(-k)$
Simetria de Inversão Temporal: $E_+(k) = E_-(-k)$
(degenerescência de Krammers)
$B = 0$T, degenerescência do spin $E_+(k) = E_-(k)$

Tabela 1: Degenerescência do spin para $B = 0$T devido aos efeitos combinados da simetria de inversão espacial e temporal [58]

.

Recentemente os efeitos de acoplamento spin-órbita vem atraindo grande atenção devido a potencial aplicação dos spins em nanoestruturas para armazenamento e processamento de informação. O ponto de partida da eletrônica de spin se deu com a descoberta da magnetoresistência colossal (GMR) em 1988 por Baibich *et al.* [59], que teve implementação comercial em poucos anos em dispositivos de armazenamento de informação, como os discos rígidos e memórias magnéticas de acesso aleatório (MRAMs), basedos no comportamento de spins em metais.

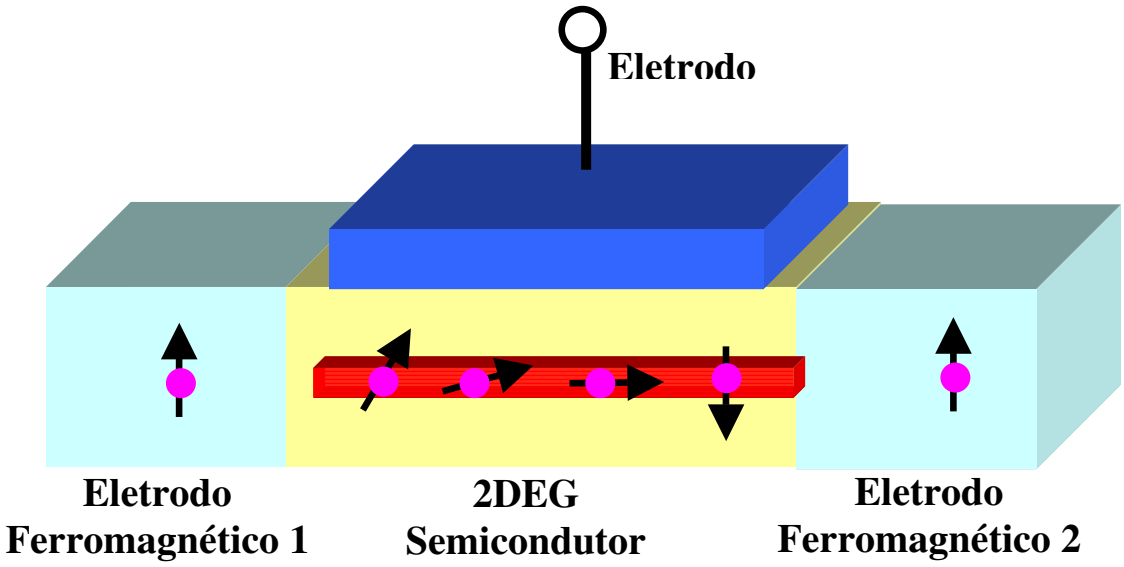

Figura 7: Esquema do dispositivo proposto por Datta e Das [60], contatos ferromagnéticos são utilizados para injetar e detectar orientações específicas de spins, enquanto elétrons são injetados através do eletrodo ferromagnético 1, no gás de elétrons livres em duas dimensões (2DEG) o spin sofre rotações devido ao acoplamento spin-órbita pela contribuição de Rashba, sendo detectado no eletrodo ferromagnético 2, que preferencialmente irá detectar uma dada orientação, desta forma modulando a corrente.

A proposta de unir as propriedade dos spins e semicondutores, feita em 1990 em um trabalho de Datta e Das [60], efetivamente propulsionou o interesse científico na área da spintrônica [61, 62]. No trabalho, foi proposto um transistor baseado em spins, onde dois contatos ferromagnéticos (ferro, por exemplo) são utilizados para injetar e detectar

elétrons com polarizações de spin desejados. Esta polarização é controlada através de efeitos de acoplamento spin-órbita, neste caso devido a contribuição de Rashba [64], onde um potencial variável é aplicado para controlar a precessão dos spins no gás de elétrons bidimensional (2DEG). O dispositivo está representado na Figura 7.

Atualmente, um dos grandes desafios para implementação da computação quântica, é justamente a injeção e preparação de estados de spin com polarização bem definida nos semicondutores e com tempos suficientes de coerência para a realização de operações lógicas baseados em *qubits*. É nesse sentido, que os processos de acoplamento spin-órbita em semicondutores vêm sendo intensamente estudados, já que a interação spin-órbita é uma das principais fontes responsáveis por decoerência [63]; pois permite misturas de estados de spin. A seguir, veremos uma breve introdução do efeito Rashba e Dresselhaus em semicondutores.

2.2 Efeito de Rashba

Devido ao surgimento de imperfeições interfaciais ao crescer uma liga semicondutora, gradientes de potenciais aparecem nas regiões de confinamento do elétron. Esse gradiente induz a um campo elétrico que causa uma distorção local da função de onda, e conseqüente, quebra da simetria das bandas eletrônicas devida a assimetria da inversão estrutural (*structural inversion asymmetry* - SIA).

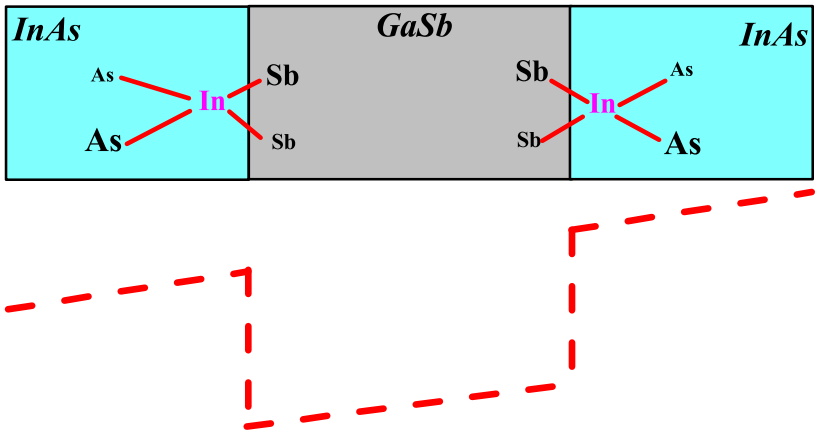

Figura 8: Esquema pictórico monstrando a assimetria nas interfaces durante o crescimento de uma liga semicondutora.

Na Figura 8 é representado um modelo pictórico da assimetria da inversão estrutural que ocorre durante o crescimento de uma liga semicondutora. Esta assimetria induz a uma contribuição no acoplamento spin-órbita, que foi estudado por Rashba [64]. O mesmo

efeito também é conseguido ou tem o seu valor manipulado com aplicações de campos elétricos externos sobre a estrutura [65]. Uma das grandes vantagens da exploração do efeito de Rashba, em aplicações na spintrônica, se deve justamente ao fato da possibilidade de manipulação do acoplamento via campos elétricos externos, que é associado ao parâmetro de Rashba [65].

2.3 Efeito de Dresselhaus

Em estruturas cristalinas do tipo *zinc-blend*, comum em materiais do grupo III-IV (por exemplo: InAs, GaAs, InSb, dentre outros), a ausência de um centro de simetria de inversão espacial (Figura 9), comumente denominado assimetria de inversão *bulk* da estrutura cristalina (*bulk inversion asymmetry* - BIA), induz ao aparecimento de um campo cristalino efetivo, sendo também responsável pela quebra da degenerescência das bandas associadas ao spin. Tal efeito estudado por Dresselhaus [66], inerente do material [67], juntamente com o efeito de Rashba, são de fundamental importância no acoplamento SO.

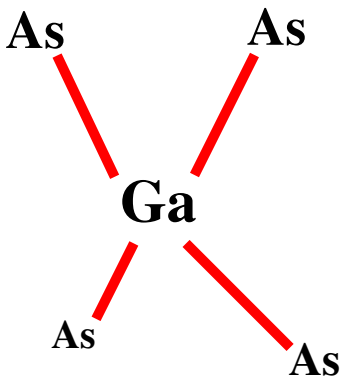

Figura 9: Esquema pictórico demonstrando a assimetria na inversão cristalina em nanoestruturas do tipo *zinc-blend*.

2.4 Efeito Rashba e Dresselhaus em um gás de elétrons bidimensional 2DEG

Em um gás de elétrons bidimensional (2DEG) é possível mostrar que os efeitos de acoplamento SO, levando em consideração as contribuições de Rashba e Dresselhaus, provocam a quebra da degenerescência dos estados de spins a campo magnético nulo. Para demonstrar tal fato, vamos considerar uma partícula que se move no plano $x - y$, com potencial de confinamento V_c =0. A Hamiltoniana, que descreve este sistema fica:

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right)\mathbb{I}_{2\times 2} + H_R + H_D, \tag{2.7}$$

onde p_x, p_y são os momentos, $\mathbb{I}_{2\times 2}$ é a matriz identidade, H_R e H_D descrevem as contribuições de Rashba e Dresselhaus respectivamente no acoplamento SO. A Hamiltoniana de Rashba H_R em 2-D é da forma:

$$H_R = \frac{\alpha}{\hbar}\left(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y\right), \tag{2.8}$$

onde σ_x e σ_y são as matrizes de Pauli e α é o parâmetro de Rashba. A Hamiltoniana de Dresselhaus, H_D, devido a contribuição de Dresselhaus no acoplamento SO, é da forma:

$$H_D = \frac{\gamma_c}{\hbar}\left[\sigma_x p_x\left(p_y^2 - p_z^2\right) + \sigma_y p_y\left(p_z^2 - p_x^2\right) + \sigma_z p_z\left(p_x^2 - p_y^2\right)\right], \tag{2.9}$$

onde γ_c é a constante de acoplamento spin-órbita de Dresselhaus. Para um sistema 2-D, e usando o fato de $\langle p_z\rangle$ =0, devido a paridade da função de onda [69], a Equação (2.9), fica:

$$H_D = \frac{\gamma_c}{\hbar}\left[\langle p_z^2\rangle\left(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x\right) + \left(\sigma_x p_x p_y^2 - \sigma_y p_y p_x^2\right)\right], \tag{2.10}$$

desprezando o segundo termo da Equação (2.10), pois termos proporcionais a k^3 não produzem efeitos significativos no acoplamento SO, e β, sendo o parâmetro de Dresselhaus $\gamma_c\langle p_z^2\rangle$. Assim chegamos a Equação:

$$H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2\right)\mathbb{I}_{2\times 2} + \frac{\alpha}{\hbar}\left(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y\right) + \frac{\beta}{\hbar}\langle p_z^2\rangle\left(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x\right). \tag{2.11}$$

A solução do problema $H\Psi = E\Psi$, é analítica, com autovalores dados por:

$$E_\pm = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 \pm k\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\sin\left(2\theta\right)}, \tag{2.12}$$

e autoestados:

$$|\Psi\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}e^{i(k_x x + k_y y)}\left(\pm e^{i\omega}|+\rangle + |-\rangle\right), \tag{2.13}$$

onde θ é um ângulo de fase, $\tan\left(\omega\right) = \frac{\alpha k_x - \beta k_y}{\alpha k_y - \beta k_x}$ e

$$|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{2.14}$$

Se o tratamento feito acima for, por exemplo, para um poço quântico semicondutor de um material *zinc-blend*, teremos uma estrutura de bandas semelhantes com as que estão representadas na Figura 10, apresentando degenerescência das bandas a campo magnético

nulo, em ausência da interação spin-órbita [Figura 10 (a)]. Quando é considerado os efeitos do acoplamento SO, temos uma quebra da degenerescência das bandas em relação aos spins, até mesmo a campo magnético nulo, como podemos notar na Figura 10 (b)-(d), para diferentes manipulações das contribuições da Rashba (α) e Dresselhaus (β).

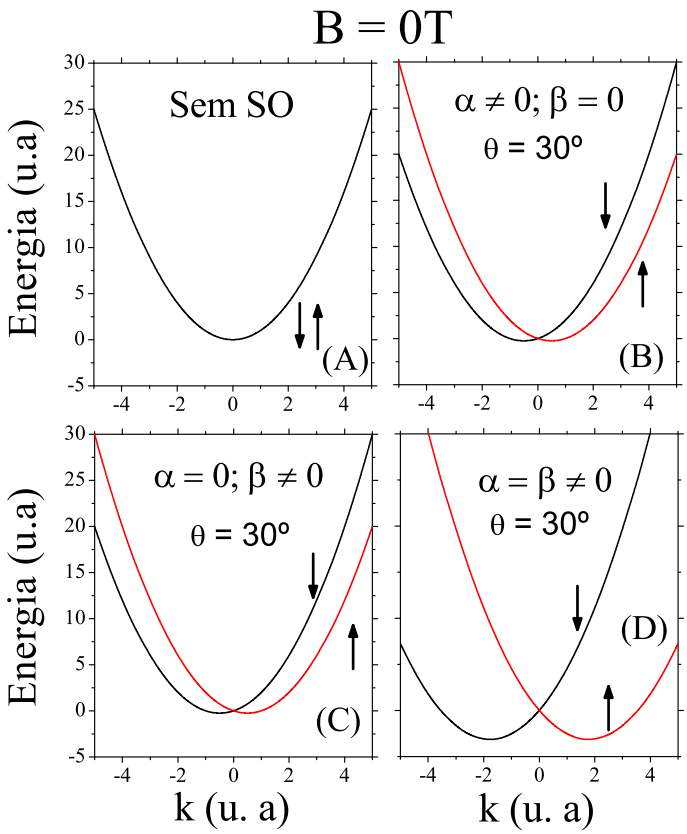

Figura 10: Estrutura de bandas (E-k), para diferentes configurações: (a) Sem acoplamento SO, (b) Com acoplamento SO devido a contribuição de Rashba (α), (c) Com acoplamento SO devido a contribuição de Dresselhaus (β), (d) Com acoplamento SO devido a ambas contribuições de Rashba (α) e Dresselhaus.

No próximo capítulo, será apresentado o modelo escolhido para modelar o potencial de confinamento tipo anel quântico e que nos permitirá discutir dentro de um esquema simples os efeitos da interação spin-órbita. A escolha do modelo se deve a flexibilidade de tanto estudar ora o comportamento de um anel ora de um ponto quântico, já que é modelo torna possível manipular o perfil do potencial.

3 Modelo Teórico

Neste capítulo introduziremos o modelo teórico utilizado para o cálculo das contribuições de Rashba e Dresselhaus no acoplamento SO em anéis quânticos semicondutores, e em seguida serão calculados os elementos de matriz correspondentes a ambas as contribuições.

3.1 Potencial lateral em anéis quânticos

No modelo teórico do anel quântico, utilizado nesse trabalho, consideramos um elétron no estado fundamental, confinado em um poço quântico na direção de crescimento z. Além do confinamento no poço, para descrever o comportamento do confinamento lateral do elétron no anel isolado de largura finita, foi utilizado o modelo proposto por Tan e Inkson [1]. O modelo é bem flexível, tanto o raio como o largura média do anel podem ser ajustados independentemente pela escolha apropriada de dois parâmetros do modelo. Em alguns limites o modelo também permite descrever um ponto quântico, um anti-ponto e um anel quântico 1-D. A solução exata do espectro de energia e suas autofunções são obtidas analiticamente em presença de campo magnético aplicado perpendicularmente ao anel. O modelo considera um anel no plano $x - y$, o qual é definido por um potencial radial do tipo

$$V(r) = \frac{a_1}{r^2} + a_2 r^2 - V_0, \tag{3.1}$$

onde $r = r(x, y)$ e $V_0 = 2\sqrt{a_1 a_2}$, sendo a_1 e a_2 parâmetros ajustáveis que podem descrever tanto o confinamento de um ponto quanto ou um anel. Na Figura 11 é mostrado duas formas possíveis desse potencial através da manipulação de a_1 e a_2, em (a) o potencial parabólico de um ponto quântico e em (b) o potencial de um anel quântico.

Este potencial possui as seguintes propriedades. Pode ser verificado que o potencial

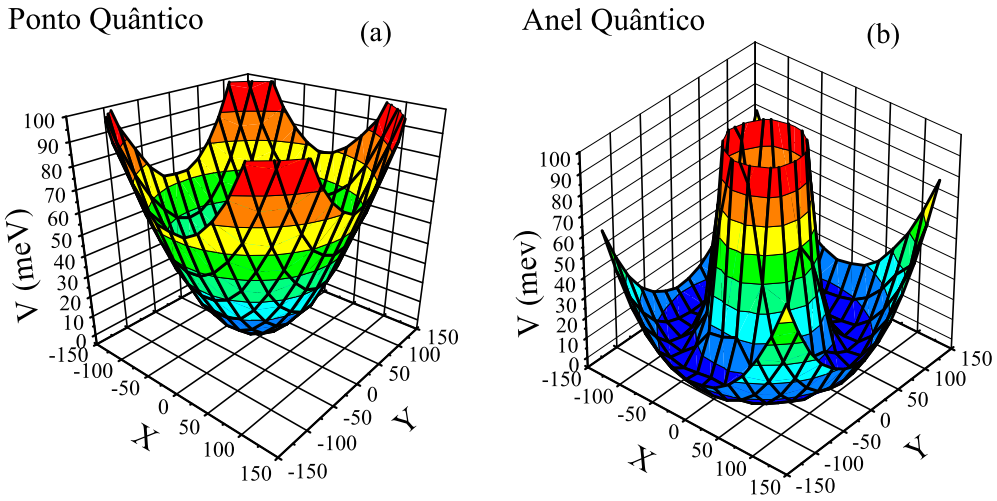

Figura 11: Potencial de confinamento dado pelo modelo de Tan e Inkson *et al.* [1]: a) Ponto Quântico e b) Anel Quântico.

tem um mínimo $V(r_0) = 0$ em

$$r = r_0 = \left(\frac{a_1}{a_2}\right)^{\frac{1}{4}}, \tag{3.2}$$

sendo que r_0 define o raio médio do anel. Para r próximo a r_0, o potencial do anel possui a forma de um potencial parabólico

$$V(r) \approx \frac{1}{2}\mu\omega_0^2 (r - r_0)^2, \tag{3.3}$$

com $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}$ que caracteriza o comprimento do confinamento transversal. Na Figura 12 temos representado o potencial parabólico do anel para $r \approx r_0$.

Na presença de um campo magnético uniforme B perpendicular ao plano $x - y$, considerando neste caso, apenas o confinamento lateral, já que o confinamento lateral possui uma energia de confinamento que é dominante em relação ao confinamento da direção z. Desta forma, a Hamiltoniana em coordenadas cilíndricas, para um elétron com massa efetiva μ será

$$H_0 = \frac{\hbar^2}{2\mu}\left[-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial}{\partial r}\right) - \frac{1}{r^2}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} + il\right)^2 - i\frac{eB}{\hbar}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi} + il\right) + \frac{e^2B^2}{4\hbar^2}r^2\right] + \frac{a_1}{r^2} + a_2r^2 - V_0 \pm \frac{1}{2}\mu_B g B, \tag{3.4}$$

com μ_B e g sendo o magnéton de Bohr e o fator-g de Landé. Escolhendo o seguinte vetor potencial $\vec{A} = \frac{1}{2}Br\hat{\varphi} + \left(\frac{\hbar}{er}\right)\hat{\varphi}$, pode ser verificado que as autoenergias correspondentes a

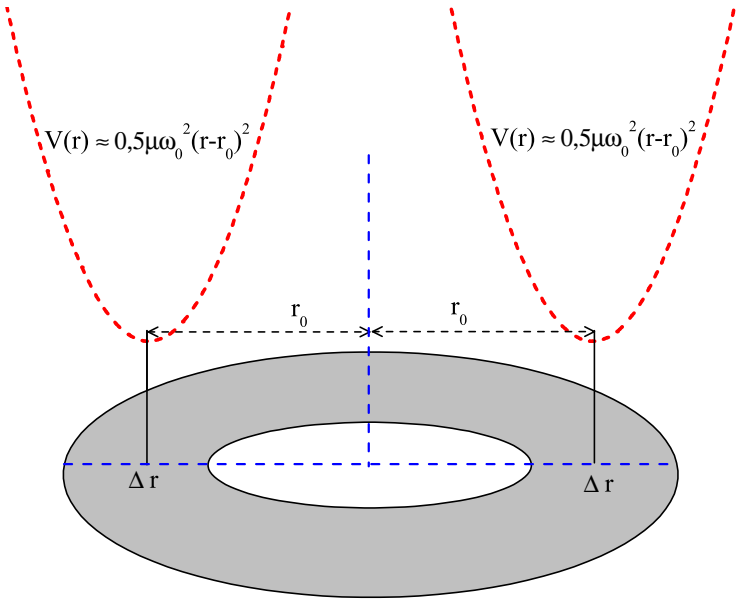

Figura 12: Figura demonstrando o potencial parabólico do anel para $r \approx r_0$.

Hamiltoniana acima, são dadas por:

$$E_{n,m,l,\sigma_z} = \left(n + \frac{1}{2} + \frac{M}{2}\right)\hbar\omega - \frac{m-l}{2}\hbar\omega_c - \frac{\mu}{4}\omega_0^2 r_0^2 - \frac{1}{2}\mu_B g\sigma_z B, \tag{3.5}$$

onde $n = 0, 1, 2, \ldots$; $m = \ldots, -1, 0, 1, \ldots$; $l = 0, 1, 2, \ldots$; $\sigma_z = \pm 1$, associado ao spin *up* e *down*. Os números quânticos n, m caracterizam o movimento radial e o momento angular respectivamente. O número quântico l é associado ao *quantum* de fluxo magnético, que no nosso caso, consideramos que não há fluxo magnético atravessando o anel, l =0, (daqui para frente representaremos E apenas pelos números quânticos n, m, σ_z). As correspondentes autofunções são

$$\psi_{n,m}(r,\varphi) = \frac{1}{\lambda}\left(\frac{\Gamma[n+M+1]}{2^{M+1} n!\left(\Gamma[M+1]\right)^2 \pi}\right)^{\frac{1}{2}} \times e^{-im\varphi} e^{-\frac{1}{4}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2} \left(\frac{r}{\lambda}\right)^M {}_1F_1\left(-n, M+1, \frac{1}{2}\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2\right), \tag{3.6}$$

onde ${}_1F_1$ é a função hipergeométrica confluente [68], $\omega_c = \frac{eB}{\mu}$, $\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega}}$ com $\omega = \sqrt{\omega_0^2 + \omega_c^2}$, é a freqüência ciclotrônica e o parâmetro M é definido como

$$M = \sqrt{(m-l)^2 + \frac{2a_1\mu}{\hbar^2}}. \tag{3.7}$$

3.2 Contribuição de Rashba

A Hamiltoniana completa com a contribuição de Rashba, com termos diagonais devido ao confinamento radial, e termos não-diagonais devido ao gradiente de potencial na direção de crescimento z, responsáveis pela mistura de spins [69], é dada pela seguinte equação:

$$H_R = \frac{-\hbar}{(2m_0c)^2} E(\vec{r}) \cdot \left(\vec{\sigma} \times \vec{\mathbf{P}}\right), \tag{3.8}$$

usando o fato de $\vec{E} = -\nabla V(\vec{r})$, substituindo na equação anterior temos:

$$H_R = \frac{\hbar}{(2m_0c)^2} \nabla V(\vec{r}) \cdot \left(\vec{\sigma} \times \vec{\mathbf{P}}\right), \tag{3.9}$$

sendo P_x, P_y e P_z componentes do momento $\mathbf{P} = \vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}$. Em coordenadas cilíndricas (para facilitar a álgebra), podemos escrever estas componentes como

$$P_x = -i\hbar \left(\cos\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \text{sen}\varphi \frac{\partial}{r\partial\varphi}\right) + \frac{e}{c}A_x, \tag{3.10}$$

$$P_y = -i\hbar \left(\text{sen}\varphi \frac{\partial}{\partial r} - \cos\varphi \frac{\partial}{r\partial\varphi}\right) + \frac{e}{c}A_y, \tag{3.11}$$

e

$$P_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z} + \frac{e}{c}A_z, \tag{3.12}$$

onde e, c é a carga do elétron e a velocidade da luz, respectivamente. $A_x = -\frac{1}{2}Br\text{sen}\varphi$, $A_y = \frac{1}{2}Br\cos\varphi$, $A_z = 0$ são as componentes do vetor potencial magnético $\vec{A}$.

As componentes da matriz de Pauli $\vec{\sigma}$ são escritas como:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.13}$$

Fazendo a operação $\left(\vec{\sigma} \times \vec{\mathbf{P}}\right)$, teremos:

$$\vec{\sigma} \times \vec{P} = \hat{x}\omega_x + \hat{y}\omega_y + \hat{z}\omega_z, \tag{3.14}$$

com $\omega_x, \quad \omega_y \quad e \quad \omega_z$ são dados por:

$$\omega_x = \sigma_y P_z - \sigma_z P_y, \tag{3.15}$$

$$\omega_y = \sigma_z P_x - \sigma_x P_z, \tag{3.16}$$

$$\omega_z = \sigma_x P_y - \sigma_y P_x. \tag{3.17}$$

Substituindo na Equação (3.14) os vetores unitários, $\hat{x}, \quad \hat{y} \quad e \quad \hat{z}$, chegamos a:

$$\vec{\sigma} \times \vec{P} = \left(\cos\phi\hat{r} - \mathrm{sen}\phi\hat{\phi}\right)\omega_x + \left(\mathrm{sen}\phi\hat{r} + \cos\phi\hat{\phi}\right)\omega_y + \hat{z}\omega_z. \tag{3.18}$$

Manipulando a equação acima, temos:

$$\vec{\sigma} \times \vec{P} = \hat{r}\left(\cos\phi\omega_x + \mathrm{sen}\phi\omega_y\right) + \overbrace{\hat{\phi}\left(\cos\phi\omega_y - \mathrm{sen}\phi\omega_x\right)} + \hat{z}\omega_z. \tag{3.19}$$

O segundo termo da equação acima não contribui, já que o potencial é dependente apenas do confinamento em r e do confinamento na direção z de crescimento. Substituindo $\omega_x, \quad \omega_y \quad e \quad \omega_z$, encontramos:

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \times \vec{P} &= \hat{r}\left(\cos\phi\omega_x + \mathrm{sen}\phi\omega_y\right) + \hat{z}\omega_z \\ &= \hat{r}\left[\cos\phi\left(\sigma_y P_z - \sigma_z P_y\right) + \mathrm{sen}\phi\left(\sigma_z P_x - \sigma_x P_z\right)\right] + \hat{z}\left(\sigma_x P_y - \sigma_y P_x\right). \end{aligned} \tag{3.20}$$

Após manipulações algébricas da Equação (3.9), é possível mostrar que utilizando das definições das Equações (3.10-3.13), e usando o fato de $\langle p_z \rangle = 0$ [69], chegamos a seguinte matriz:

$$H_R^d = \frac{\hbar^2}{\left(2m_0c\right)^2}\frac{\partial V\left(r\right)}{\partial r}\begin{pmatrix} i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{e}{2c}rB & 0 \\ 0 & -i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{e}{2c}rB \end{pmatrix}, \tag{3.21}$$

devido ao confinamento radial, onde $\frac{\partial V(r)}{\partial r} = \frac{-2a_1}{r^3} + 2a_2 r$. A matriz associada à Hamiltoniana de Rashba devido ao confinamento na direção z fica:

$$H_R^{nd} = \frac{\hbar^2}{\left(2m_0c\right)^2}\frac{\partial V_z}{\partial z}\begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi}\left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + e^{-i\varphi}\frac{e}{2c}rB \\ e^{i\varphi}\left(-\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r}\frac{\partial}{\partial\varphi}\right) + e^{i\varphi}\frac{e}{2c}rB & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.22}$$

onde $\frac{\partial V(z)}{\partial z}$ é um campo elétrico aplicado na direção z, que no caso de um poço triangular

seria da forma $-eE$, sendo E o campo elétrico [71].

3.2.1 Elementos de matriz

Utilizando como função de base, a função de onda do problema não-pertubado, $H_0\psi_{n,m,\sigma_z} = E_{n,m,\sigma_z}\psi_{n,m,\sigma_z}$, para o cálculo da contribuição de Rashba no acoplamento spin-órbita. Com esta função de base, é calculado os elementos devido à contribuição de Rashba. Definindo as integrais $f_i, \quad i = 1, ..., 7$, que surgem no cálculo dos elementos de matriz, $\langle\psi_{n,m,\sigma_z}|H_R|\psi_{n,m,\sigma_z}\rangle$, sendo:

$$f_1 = \int_0^\infty e^{-x}x^{M-2}{}_1F_1\left(-n', M+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx, \tag{3.23}$$

$$f_2 = \int_0^\infty e^{-x}x^{\frac{1}{2}(M+M'+1)}{}_1F_1\left(-n', M'+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx, \tag{3.24}$$

$$f_3 = \int_0^\infty e^{-x}x^{\frac{1}{2}(M+M'-1)}{}_1F_1\left(-n', M'+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx, \tag{3.25}$$

$$f_4 = \int_0^\infty e^{-x}x^{\frac{1}{2}(M+M'+1)}{}_1F_1\left(-n', M'+1, x\right){}_1F_1\left(-n+1, M+2, x\right)dx, \tag{3.26}$$

$$f_5 = \int_0^\infty e^{-x}x^{M}{}_1F_1\left(-n', M+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx, \tag{3.27}$$

$$f_6 = \int_0^\infty e^{-x}x^{M-1}{}_1F_1\left(-n', M+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx, \tag{3.28}$$

$$f_7 = \int_0^\infty e^{-x}x^{M+1}{}_1F_1\left(-n', M+1, x\right){}_1F_1\left(-n, M+1, x\right)dx. \tag{3.29}$$

Os elementos da diagonal da matriz 2×2, $\langle\psi_{n,m,\sigma_z}|H_R|\psi_{n,m,\sigma_z}\rangle$, serão dados por:

$$H_{11}^{n,n',m,m'} = C_{n,m}\cdot C_{n',m'}a_2\alpha_R\left[m\left(f_1\cdot 2^{M-1}\left(\frac{r_0}{\lambda}\right)^2 - f_5\cdot 2^{M+1}\right) + \frac{1}{\ell_B^2}\left(\frac{1}{2}f_6\left(\frac{r_0}{\lambda}\right)^2 r_0 - 2f_7\frac{r_0}{\lambda}\right)\right]\delta m, m', \tag{3.30}$$

$$H_{22}^{n,n',m,m'} = -C_{n,m}\cdot C_{n',m'}a_2\alpha_R\left[m\left(f_1\cdot 2^{M-1}\left(\frac{r_0}{\lambda}\right)^2 - f_5\cdot 2^{M+1}\right) + \frac{1}{\ell_B^2}\left(\frac{1}{2}f_6\left(\frac{r_0}{\lambda}\right)^2 r_0 - 2f_7\frac{r_0}{\lambda}\right)\right]\delta m, m', \tag{3.31}$$

onde $C_{n,m} = \frac{1}{\lambda}\left(\frac{\Gamma[n+M+1]}{2^{M+1}n!(\Gamma[M+1])^2\pi}\right)^{\frac{1}{2}}$, são as constantes de normalização das funções de onda base; $\ell_B = \frac{eB}{\hbar c}$ e α_R são o comprimento magnético de Landau e o parâmetro de Rashba, característico de cada material, respectivamente.

Fora das diagonais da matriz teremos elementos para a contribuição de Rashba da forma:

$$H_{12}^{n,n',m,m'} = C_{n,m} \cdot C_{n',m'} \alpha_R \frac{dV}{dz} \left[J_+\right] \delta m', m+1, \tag{3.32}$$

$$H_{21}^{n,n',m,m'} = -C_{n,m} \cdot C_{n',m'} \alpha_R \frac{dV}{dz} \left[J_-\right] \delta m', m-1, \tag{3.33}$$

onde $J_\pm$ é definido como

$$J_+ = \frac{1}{\lambda^{\frac{1}{2}}} \left((m+M)\, 2^{\frac{1}{2}(M+M'-1)} f_3 - 2^{\frac{1}{2}(M+M'-1)} f_2 - \frac{n \cdot 2^{\frac{1}{2}(M+M'+1)} f_4}{(M+1)} \right) + \frac{\lambda^{\frac{1}{2}}}{\ell_B^2} f_2, \tag{3.34}$$

$$J_- = \frac{1}{\lambda^{\frac{1}{2}}} \left((-m+M)\, 2^{\frac{1}{2}(M+M'-1)} f_3 - 2^{\frac{1}{2}(M+M'-1)} f_2 - \frac{n \cdot 2^{\frac{1}{2}(M+M'+1)} f_4}{(M+1)} \right) + \frac{\lambda^{\frac{1}{2}}}{\ell_B^2} f_2. \tag{3.35}$$

3.3 Contribuição de Dresselhaus

Para levar em consideração o efeito de Dresselhaus no acoplamento spin-órbita, temos a seguinte Hamiltoniana que descreve a interação linear de Dresselhaus em sistemas 2-D, devida a assimetria da inversão *bulk* [65]:

$$H_D = \frac{\beta}{\hbar} \left(\sigma_x P_x - \sigma_y P_y \right), \tag{3.36}$$

onde $\beta = \gamma_c \langle k_z^2 \rangle$ é o parâmetro de Dresselhaus, γ_c é a constante de acoplamento spin-órbita de Dresselhaus, que carrega a informação do campo cristalino causado pela a assimetria da inversão estrutural, característica do material *bulk* e $\langle k_z^2 \rangle = \left(\frac{\pi}{L}\right)^2$ é a média do quadrado do vetor de onda k_z avaliada no estado fundamental de um poço quântico de largura L.

Fazendo as mesmas manipulações algébricas da contribuição de Rashba, chegamos a seguinte matriz:

$$H_D = \beta \begin{pmatrix} 0 & ie^{i\varphi} \left(\frac{-\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) + ie^{i\varphi} \frac{e}{2c} rB \\ -ie^{-i\varphi} \left(+\frac{\partial}{\partial r} - \frac{i}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) - ie^{-i\varphi} \frac{e}{2c} rB & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.37}$$

3.3.1 Elementos de Matriz

Novamente, como feito na contribuição de Rashba, os elementos de matriz $\langle\psi_{n,m}|H_D|\psi_{n,m}\rangle$ serão dados apenas por elementos fora da diagonal da matriz 2×2, sendo escritas como:

$$H_{12}^{n,n',m,m'} = iC_{n,m}\cdot C_{n',m'}\frac{\beta}{\lambda^{\frac{1}{2}}}\left[J_+\right]\delta m', m-1, \tag{3.38}$$

$$H_{21}^{n,n',m,m'} = -iC_{n,m}\cdot C_{n',m'}\frac{\beta}{\lambda^{\frac{1}{2}}}\left[J_-\right]\delta m', m+1, \tag{3.39}$$

onde $J_\pm$ foram definidas na Equação (3.35). É importante notar que ambas as matrizes (2×2) relativa as Hamiltoniana de Rashba (H_R) e Dresselhaus (H_D) são lineares e hermiteanas.

3.4 Problema de Autovalores

A Hamiltoniana total do elétron num ponto ou anel quântico em presença da interação spin-órbita é $H = H_0 + H_R + H_D$. Um autoestado da Hamiltoniana H pode ser expandido como uma combinação linear dos autoestados da Hamiltoniana H_0 da seguinte forma

$$\Psi = \sum_{n,m} C_{nm\uparrow}|nm\uparrow\rangle + C_{nm\downarrow}|nm\downarrow\rangle, \tag{3.40}$$

onde $|n,m,\uparrow\rangle$ e $|n,m,\downarrow\rangle$ representam os autoestados de H_0. Os coeficientes da expansão $C_{nm\sigma_z}$ são obtidos a partir da equação matricial de autovalores

$$\sum_{n',m',\sigma'_z}\langle nm\sigma|H|n'm'\sigma'\rangle C_{n'm'\sigma'} = EC_{nm\sigma}, \tag{3.41}$$

notar que o índice que identifica a subbanda na direção z do poço quântico foi suprimida, já que restringimos nosso cálculo ao estado fundamental na direção z. O problema de autovalores é resolvido através de diagonalização númerica, utilizando-se de rotinas padrões [70] para o cálculo dos efeitos de spin-órbita.

Na próxima seção é calculado o efeito das contribuições no acoplamento spin-órbita em pontos quânticos e anéis quânticos semicondutores.

4 Resultados

Neste capítulo apresentaremos cálculos da estrutura eletrônica em presença de campos magnéticos externos e levando-se em conta a interação spin-órbita. Os cálculos são realizados em pontos e anéis quânticos de InAs. A interação de Rashba leva em conta os gradientes de potencial produzidos na direção de confinamento lateral e na direção z. Na interação de Dresselhaus consideramos apenas a contribuição linear ($\propto k$), os efeitos do confinamento na direção z são inclusos através do termo $\langle p_z^2 \rangle$ que é inversamente proporcional à largura do poço quântico. Analisaremos neste trabalho, o comportamento dos autoestados de spin em presença do campo magnético, além de diversos parâmetros geométricos que caracterizam pontos e anéis quânticos. Estudaremos o impacto das diversas contribuições da interação SO nos processos de mistura de spin, e discutiremos possíveis mecanismos de manipulação das propriedades do spin eletrônico.

Para os resultados que se seguem, os parâmetros dos materiais utilizados são aqueles relativos a um anel de Arseneto de Índio (ver Tabela 2 para parâmetros de InAs). Os parâmetros geométricos escolhidos dos anéis, tais como raio médio, largura, etc., são compatíveis com os reportados experimentalmente. Os valores experimentais típicos do raio interno são aproximadamente de 20nm e o raio externo varia entre 60-140nm para anéis de InAs crescidos sobre substrato de GaAs [27] e também para anéis de InAs crescidos sobre InP na direção $[1\bar{1}0]$, onde os raios interno e externo são aproximadamente de 20nm e 110nm, respectivamente. Na direção [110] variam entre 90nm e 220nm [26]. A altura característica dos anéis variam em torno de 2-5nm. A energia de confinamento lateral $\hbar\omega_0$ varia em torno de 5-10meV, sendo estes valores característicos de confinamento parabólico em pontos quânticos de InAs [72], pois o potencial em torno de r_0, é aproximadamente parabólico, como visto no capítulo relativo a teoria. Para a diagonalização númerica, foram utilizado 106 estados eletrônicos, que permitiram obter uma boa convergência das energias.

Parâmetro	GaAs	InAs	InSb
g_0	-0,44	-15	-50,6
m_0/μ	0,067	0,0239	0,0136
α_R [Å^2]	4,4	110	500
γ_c [eV-Å^3]	26	130	228

Tabela 2: Parâmetros dos materiais utilizados nos cálculos [71].

4.1 Anel sem acoplamento spin-órbita

Para estudar o comportamento da estrutura eletrônica em ausência das contribuições de Rashba e Dresselhaus à interação spin-órbita, fizemos o cálculo para ambos os sistemas: pontos quânticos e anéis quânticos, através da escolha dos parâmetros a_1 e a_2 característicos do potencial de confinamento [ver Equação (3.1)]. Estes parâmetros por sua vez estão relacionados com o confinamento lateral e massa efetiva por $\omega_0 = \sqrt{\frac{8a_2}{\mu}}$ e com o raio médio r_0 através da Equação (3.2). Assim, nos cálculos é mais conveniente manipular $\hbar\omega_0$, r_0 e a massa efetiva.

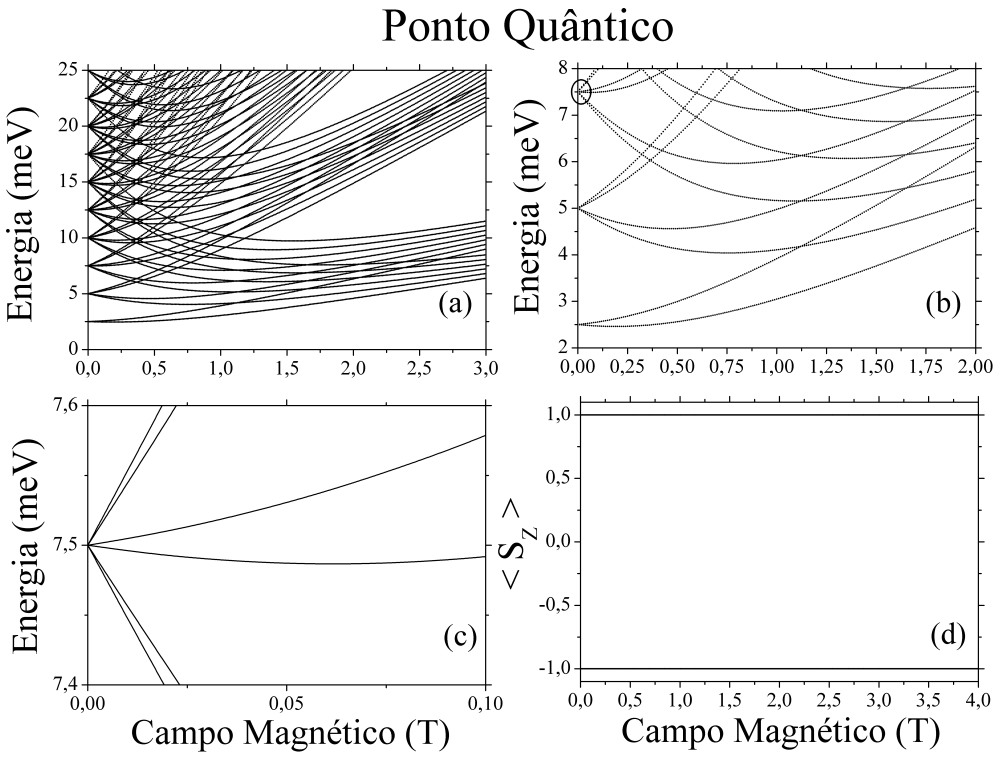

Figura 13: a) Espectro de energia para um ponto quântico sem efeitos de SO em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando que não há *spin splitting* a $B = 0$T, c) Ampliação mais localizada dos níveis $|n = 0, m = -2, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 1, m = 2, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 1, m = 0, \sigma_z = \pm 1\rangle$ (circulados no painel), confirmando que não há quebra da degenerescência para $B = 0$T, d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ dos 106 estados, em unidades de $\hbar/2$.

Na Figura 13 (a), está representado o espectro de energia obtido através da Equação (3.5) para um ponto quântico de InAs, com energia de confinamento lateral de $\hbar\omega_0 = 5$meV, em função do campo magnético. De acordo com a Equação (3.2), o raio médio para pontos quânticos é $r_0 = 0$. Ao se aplicar um campo magnético externo, surge um confinamento adicional nos elétrons no plano perpendicular a aplicação do campo, causando uma transição contínua de regime espacial para o regime de quantização do campo magnético também conhecido como quantização de Landau, que pode ser visto na Figura 13 (a) com as formações dos quase-níveis de Landau. Na Figura 13 (b) e (c) é feito um painel mais ampliado dos níveis de energias mais baixos, mostrando que há degenerescência a campo nulo.

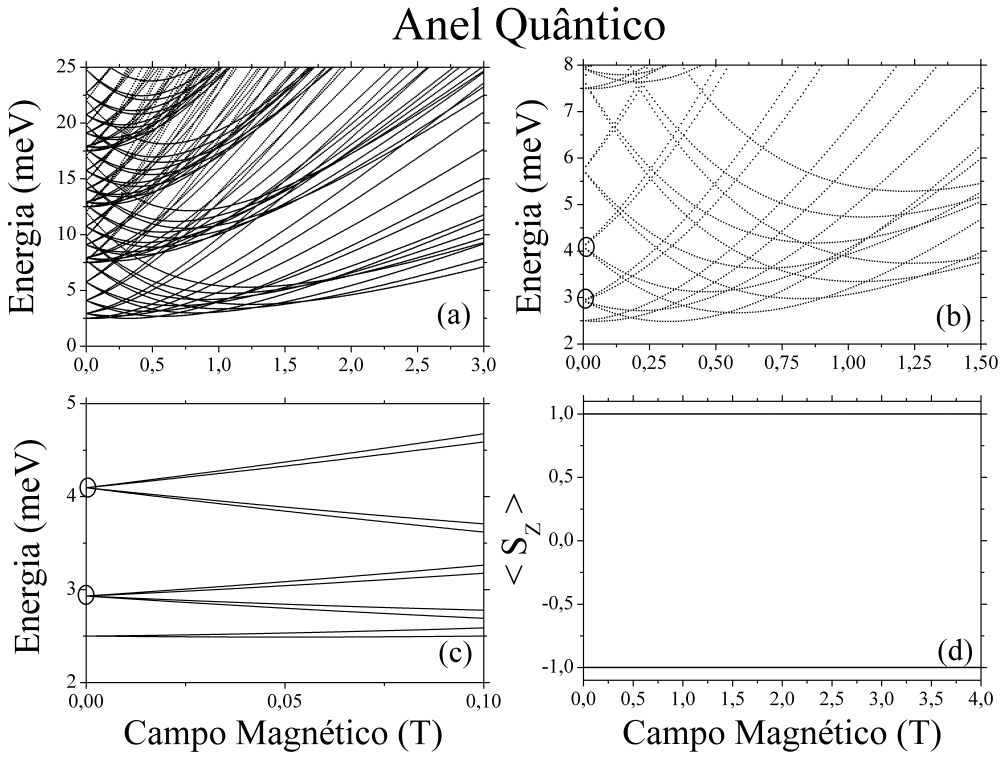

Figura 14: a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm sem efeitos de SO em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando que não há *spin splitting* a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos dez primeiros estados $|n = 0, m = -2, \ldots, 2, \sigma_z = \pm 1\rangle$ confirmando que não há quebra da degenerescência (circulados no painel), d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

Ao se analisar o comportamento do valor esperado da projeção do spin na direção de quantização z, $\langle S_z \rangle = \langle \Psi | S_z | \Psi \rangle = \sum_{n,m} |C_{nm\uparrow}|^2 - |C_{nm\downarrow}|^2$ em função do campo magnético para os 106 estados, onde as constantes $C_{nm\uparrow}$ e $C_{nm\downarrow}$ são constantes calculadas na diagonalização númerica, podemos notar que o spin se preserva, não havendo misturas devido apenas a interação de Zeeman, como pode ser visto na Figura 13 (d).

Na Figura 14, mostramos o cálculo para a estrutura eletrônica em um anel quântico de InAs com raio médio de $r_0 = 60$nm e igual energia de confinamento lateral do ponto quântico $\hbar\omega_0 = 5$meV, em função do campo magnético. Na Figura 14 (a) e (b) pode-se notar o efeito Aharonov-Bohm para o estado fundamental, que em função do campo magnético altera seu estado no número quântico m de $|n = 0, m = 0, \sigma_z = 1\rangle$ para $m = -1, -2, -3, \ldots$. Aqui também se observa a degenerescência a campo nulo (Figura 14 (c)) e o mesmo comportamento do valor esperado $\langle S_z \rangle$ da projeção do spin em função do campo magnético, não havendo mistura como mostra a Figura 14 (d).

4.2 Anel com contribuição diagonal de Rashba

Ao se incluir o termo diagonal de Rashba, definido na Equação (3.21), que surge devido ao confinamento radial na nanoestrutura, começam a aparecer os efeitos da interação spin-órbita.

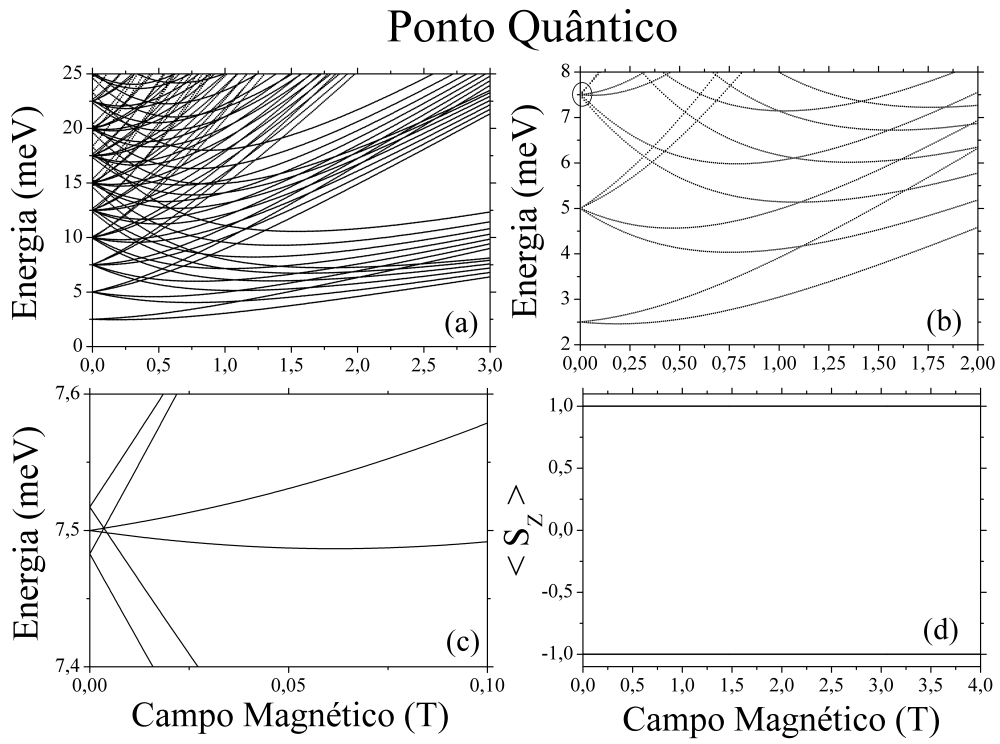

Figura 15: a) Espectro de energia para um ponto quântico com efeitos de SO, neste caso a contribuição diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando o *spin splitting* a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos níveis circulados no painel (b) confirmando que há quebra da degenerescência, d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

Na Figura 15 (a) e (b), está mostrado o espectro de energia para um ponto quântico de InAs com energia de confinamento lateral de $\hbar\omega_0 = 5$meV, em função do campo magnético. Na Figura 15 (c) é mostrada uma ampliação dos níveis circulados no painel (b), mostrando a quebra da degenerescência dos estados $|n = 2, m = 0, \pm 1, \sigma_z = \pm 1\rangle$ a campo nulo. Na Figura 15 (d) está mostrado o valor esperado da projeção do spin $\langle S_z \rangle$ em função do campo magnético. Podemos notar que o termo diagonal devido a contribuição de Rashba não induz misturas dos estados, preservando o estado original do spin.

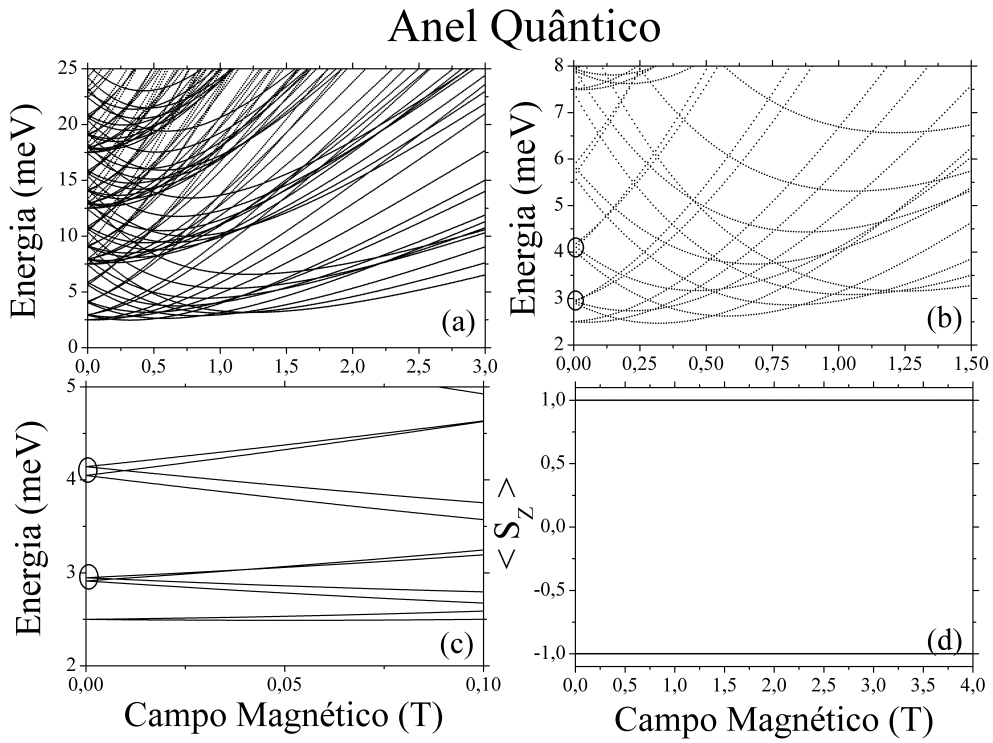

Figura 16: a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60$nm e efeitos de SO, neste caso a contribuição diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando o splitting a $B = 0$T, c) ampliação mais localizada dos níveis circulados no painel (b), d) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

O mesmo comportamento descrito acima, também pode ser observado para um anel quântico. Na Figura 16 (a) e (b) é mostrado o espectro eletrônico em função do campo magnético para um anel com raio médio de $r_0 = 60$nm e $\hbar\omega_0 = 5$meV. A inclusão da interação spin-órbita diagonal de Rashba causa quebra da degenerescência nos estados com $|n = 0, \ldots, m = \pm 1, \pm 2, \ldots, \sigma_z = \pm 1\rangle$. Na Figura 16 (c), está representada a ampliação dos níveis circulados no painel (b), mostrando a quebra da degenerescência dos níveis a campo nulo. Na Figura 15 (d) está representado o valor esperado da projeção do spin $\langle S_z \rangle$, em função do campo magnético. Aqui, novamente, podemos notar que o termo

diagonal devido a Rashba não induz misturas dos estados de spin.

4.3 Anel com contribuição não-diagonal de Rashba

Ao se incluir o termo não-diagonal de Rashba, definida na Equação (3.22), na Hamiltoniana H_0 [Equação (3.5)], isto faz ocorrer o surgimento de efeitos de acoplamento entre os estados eletrônicos $|m, \sigma_z = \pm 1\rangle$ com estados $|m \pm 1, \sigma_z = \mp 1\rangle$. Aqui é importante citar que a interação SO produz acoplamentos muitos fracos (10^{-3}meV) entre estados com n diferente, em comparação aos produzidos no número quântico m. Devido a isto as regras de seleção associadas ao número quântico n para acoplamentos fora da diagonal não foram consideradas no cálculo.

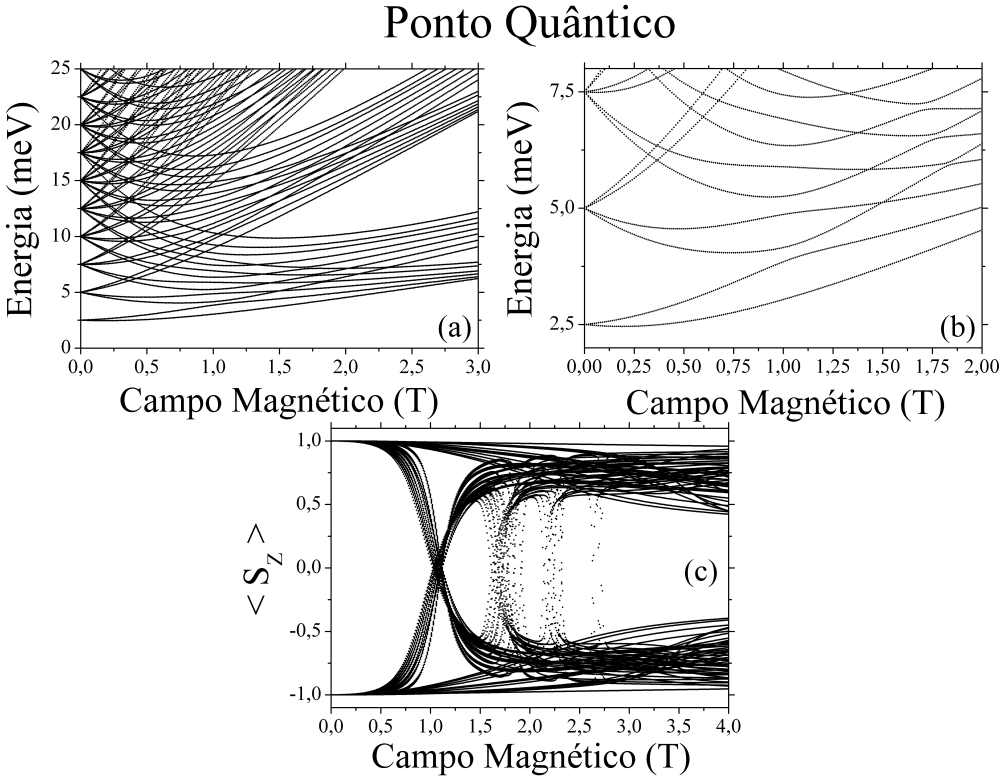

Figura 17: a) Espectro de energia para um ponto quântico incluindo os efeitos de SO, neste caso a contribuição não-diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

Na Figura 17 (a) e (b) temos representado o espectro eletrônico para um ponto quântico, com $dV/dz = 1,0$meV/nm. Os estados são acoplados seguindo a regra de seleção dada por $\Delta m = m' - m = \pm 1$, que induz ao aparecimento de *anticrossings* com *minigaps* de energia proporcionais ao parâmetro dV/dz para B próximo a 1,04T nos primeiros estados, como pode ser visto na Figura 17 (b). A Figura 17 (c) apresenta o comportamento

do valor esperado da projeção do spin na direção $\langle S_z \rangle$ em função do campo magnético. Aqui podemos ver que a inclusão do termo não-diagonal de Rashba começa a provocar misturas nos estados a partir de $B \geq 1,04\text{T}$.

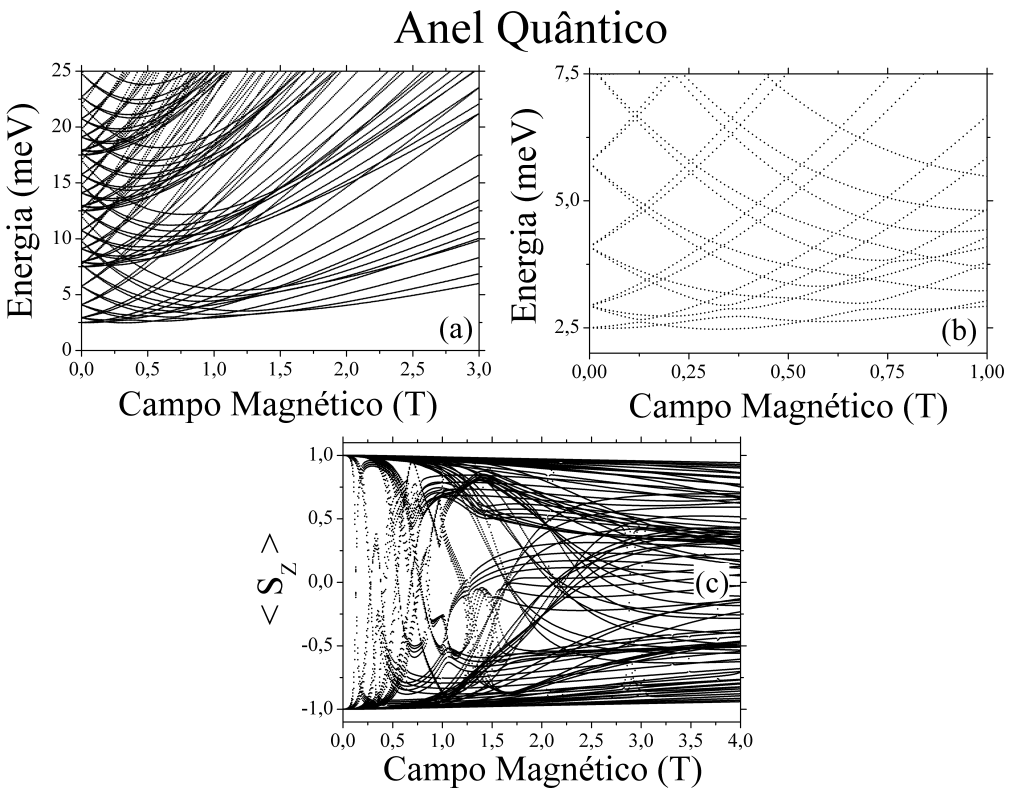

Figura 18: a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60\text{nm}$ e efeitos de SO, neste caso a contribuição não-diagonal de Rashba, em função do campo magnético, b) Ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

A inclusão do termo não-diagonal de Rashba na Hamiltoniana H_0 Equação (3.5) para um anel quântico de $r_0 = 60\text{nm}$, também acarretará efeitos de acoplamento entre os estados eletrônicos $|m, \sigma_z = \pm 1\rangle$ com estados $|m \pm 1, \sigma_z = \mp 1\rangle$. Na Figura 18 (a) e (b) representamos, o espectro eletrônico considerando $dV/dz = 1,0\text{meV/nm}$. Aqui também os estados são fortemente acoplados pela regra de seleção $\Delta m = \pm 1$, que induz ao aparecimento de *anticrossings* com *minigaps* de energia proporcionais ao parâmetro dV/dz.

É importante notar que no caso de anel há um maior número de oscilações na diferença de energia do estado fundamental, $\Delta E = E(n = 0, m = 0, \sigma_z = -1) - E(n = 0, m = 0, \sigma_z = 1)$, devido ao acoplamento SO, como é evidenciado na Figura 18 (b). Na Figura 18 (c) é representado o comportamento do valor esperado $\langle S_z \rangle$ em função do campo magnético, aqui

podemos ver que a inclusão do termo não-diagonal de Rashba provoca uma forte mistura nos estados do spin, que nesse caso é bem mais pronunciado do que no caso de um ponto quântico, misturas podem ser notadas a partir de $B = 0,04\text{T}$.

4.4 Anel quântico com todas as contribuições

Quando se inclui ambas as contribuições devido a Rashba [Equação (3.21-3.22)] e Dresselhaus [Equação (3.37)] no acoplamento spin-órbita, aparecem novos acoplamentos entre estados de spin opostos, o que deverá misturar mais os estados de spin do sistema. Enquanto a contribuição de Rashba para um elemento da matriz acopla estados $|n, \delta_{m,m'-1}, \sigma_z = \pm 1\rangle$, a contribuição de Dresselhaus para esse mesmo elemento irá acoplar estados $|n, \delta_{m,m'+1}, \sigma_z = \pm 1\rangle$, acarretando em uma competição nos acoplamentos. Para as situações estudadas, o termo de Rashba apresenta a contribuição dominante no processo de mistura de estados de spin, este comportamento foi recentemente verificado por de Souza *et al.* [71].

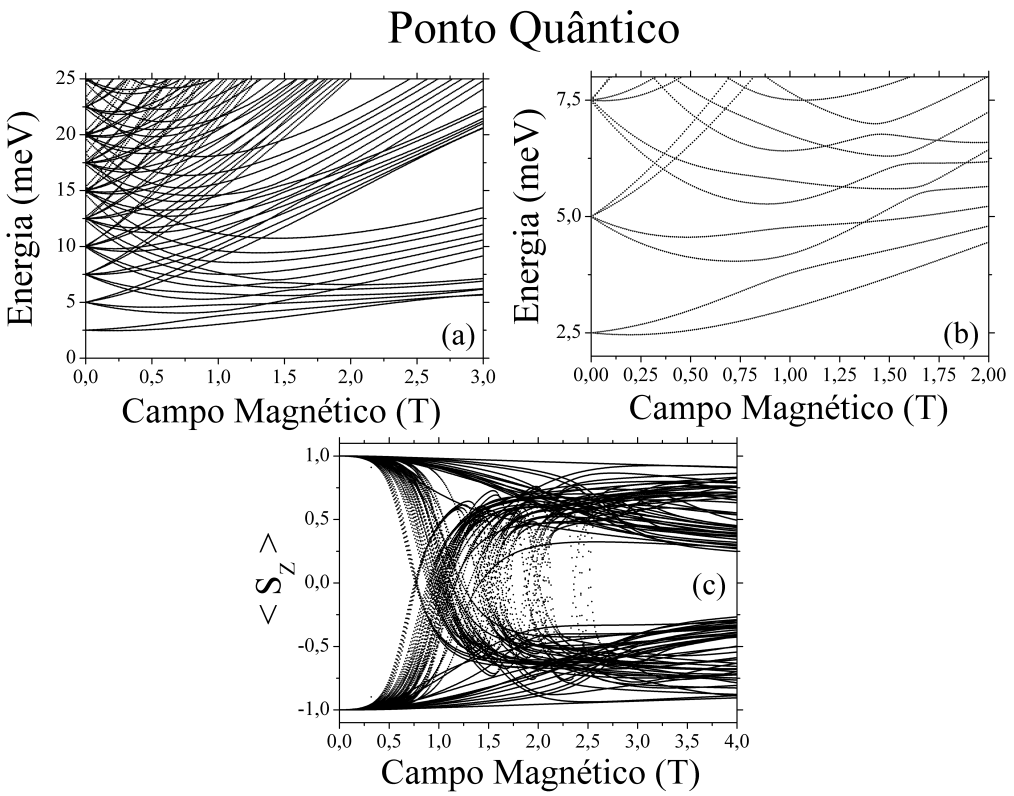

Figura 19: a) Espectro de energia para um ponto quântico levando em considerção ambas contribuições de Rashba e Dresselhaus no acoplamento SO, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

Na Figura 19 (a) e (b) representamos o espectro eletrônico para um ponto quântico em função do campo magnético considerando $dV/dz = 1,0\text{meV/nm}$ e $\beta = 1,3\text{meV-nm}$, evidenciando os *anticrossings* devido ao acoplamento spin-órbita, com *minigaps* de energia maiores que no caso da Figura 17 (a) e (b) devido ao termo de Dresselhaus. Na Figura 19 (c) é mostrado o valor esperado de $\langle S_z \rangle$. Note que em comparação com a Figura 17 (c), para um dado campo magnético os estados apresentam maior mistura, e também os cruzamento entre estados ocorrem a campos magnéticos mais baixos em torno de $B = 0,72\text{T}$. Este comportamento ficará mais evidente na próxima seção quando é estudado o comportamento do $\langle S_z \rangle$ para os estados de energia mais baixa.

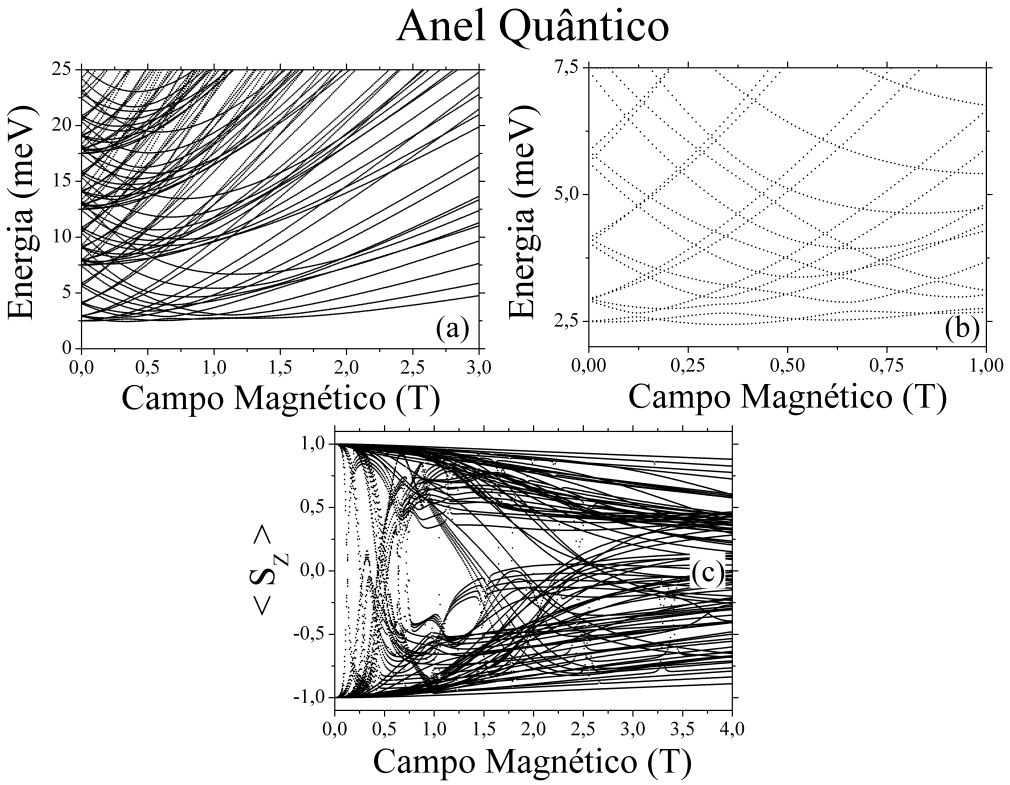

Figura 20: a) Espectro de energia para um anel quântico com $r_0 = 60\text{nm}$ e efeitos de SO, considerando todas as contribuições no acoplamento spin-órbita, em função do campo magnético, b) ampliação do painel (a) mostrando os *anticrossings*, c) valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$.

Na Figura 20 (a) e (b) é mostrado o espectro eletrônico, com $dV/dz = 1,0\text{meV/nm}$ e $\beta = 1,3\text{meV-nm}$, em função do campo magnético para um anel com raio médio $r_0 = 60\text{nm}$. Na Figura 20 (c) é apresentado o comportamento do valor esperado $\langle S_z \rangle$ do spin em função do campo magnético. Aqui podemos observar a forte mistura nos estados do spin que é acentuada devida a contribuição de Dresselhaus, que provoca acoplamentos adicionais entre os estados descritos acima, para o ponto quântico.

4.5 Manipulação do spin através de parâmetros de acoplamento e tamanho do anel

Para estudar o comportamento do valor esperado $\langle S_z \rangle$ em função do campo magnético, para diferentes parâmetros externos tais como, raio médio r_0, parâmetro de confinamento lateral $\hbar\omega_0$, campo elétrico dV/dz e presença do termo de Dresselhaus, foram considerados os mesmos parâmetros das seções anteriores e novamente, utilizados 106 estados eletrônicos para diagonalização. Para um ponto quântico, os seis estados de mais baixa energia representados nas figuras são: $|n = 0, m = 2, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 0, m = -2, \sigma_z = \pm 1\rangle$ e $|n = 1, m = 0, \sigma_z = \pm 1\rangle$; para o anel quântico $|n = 0, m = 0, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 0, m = 1, \sigma_z = \pm 1\rangle$, $|n = 0, m = -1, \sigma_z = \pm 1\rangle$.

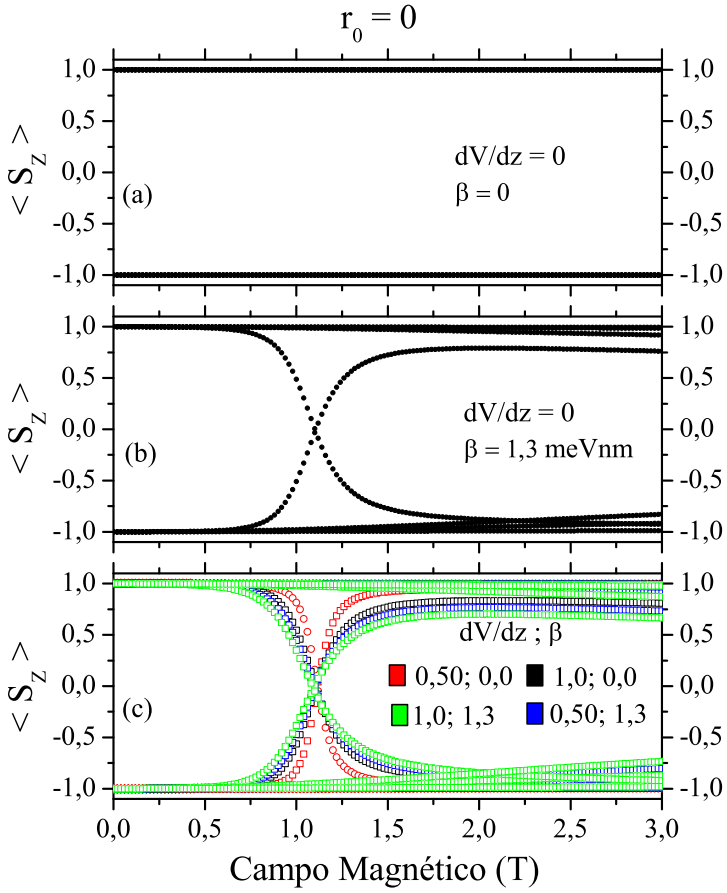

Figura 21: Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ para um ponto quântico em diferentes configurações SO em função do campo magnético. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com valores distintos de dV/dz em presença e ausência da contribuição de Dresselhaus β.

Na Figura 21 mostramos o valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em diferentes conjuntos de parâmetros de acoplamento spin-órbita para pontos quânticos de InAs com $\hbar\omega_0 = 5$meV; no painel (a) não foi considerada a interação SO, como era de se esperar não há misturas de

estados, o que não ocorre nos painéis (b) e (c), onde a inclusão da contribuição de Dresselhaus [Figura 21 (b)] e a contribuição de Rashba [Figura 21 (c)]. Esta inclusão ocasiona em misturas que podem ser manipuladas através dos parâmetros dV/dz e de Dresselhaus β, tornando os estados mais ou menos fortemente acoplados; porém como pode-se notar os parâmetros de Rashba e Dresselhaus não modificam os campos críticos de cruzamento no valor esperado $\langle S_z \rangle$.

Na Figura 22, mostramos o comportamento do valor esperado de $\langle S_z \rangle$ para um anel quântico de InAs de raio médio $r_0 = 60$nm considerando o mesmo conjunto de parâmetros da interação SO da Figura 21. Uma característica importante de se notar aqui é o fato de haver dois campos magnéticos críticos $B = 0,31$T e $B = 1,2$T de cruzamento entre os primeiros estados, o que não ocorre para o ponto, onde possui apenas um ponto crítico bem definido de $B = 0,31$T.

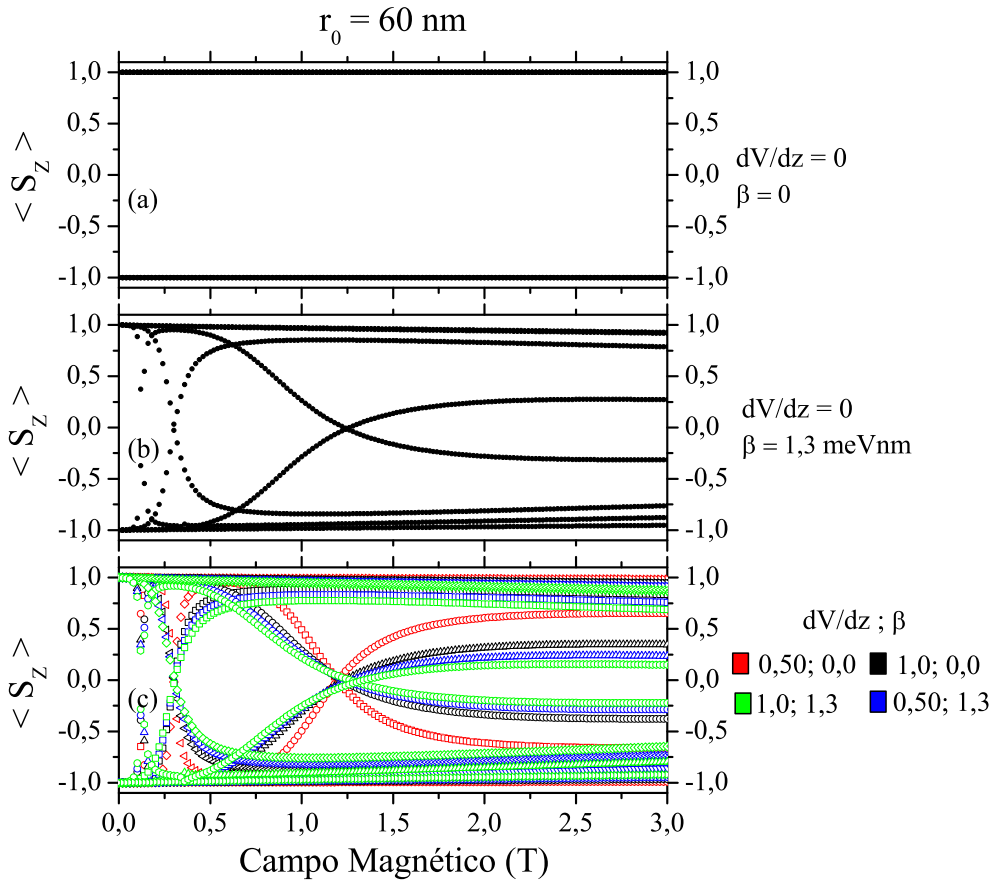

Figura 22: Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ para um anel quântico com $r_0 = 60$nm em diferentes configurações SO em função do campo magnético. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com valores distintos de dV/dz em presença e ausência da contribuição de Dresselhaus. O esquema de cores o mesmo utilizado na Figura 21.

Na Figura 23, anéis quânticos de InAs de raio médios $r_0 = 30$nm e $r_0 = 90$nm

são usados para analisar o comportamento do valor esperado $\langle S_z \rangle$, em função do campo magnético, para diferentes parâmetros dV/dz e Dresselhaus β. No painel (a) nenhuma mistura de estados é percebida, mesmo quando é alterado o tamanho do anel, já que não há presença de efeitos de acoplamento SO. Quando é levado em consideração as contribuições de Rashba e Dresselhaus no acoplamento spin-órbita, pode-se perceber que a posição dos campos magnéticos onde é encontrada máxima mistura dos estados de spin depende fortemente do raio médio do anel. Na situação $dV/dz = 0$ [painel (b)], podemos observar que a posição do primeiro cruzamento varia de 0,40T para 0,25T quando o raio médio do anel é mudado de 30nm para 90nm. A posição dos pontos de máxima mistura é praticamente igual quando é considerada a presença da interação de Rashba [painel (c)]. Desta forma, verificamos que a possibilidade de misturar estados de spin pode ser controlada eficientemente com uma apropriada escolha do campo elétrico, parâmetro de Dresselhaus e parâmetros geométricos característicos do anel.

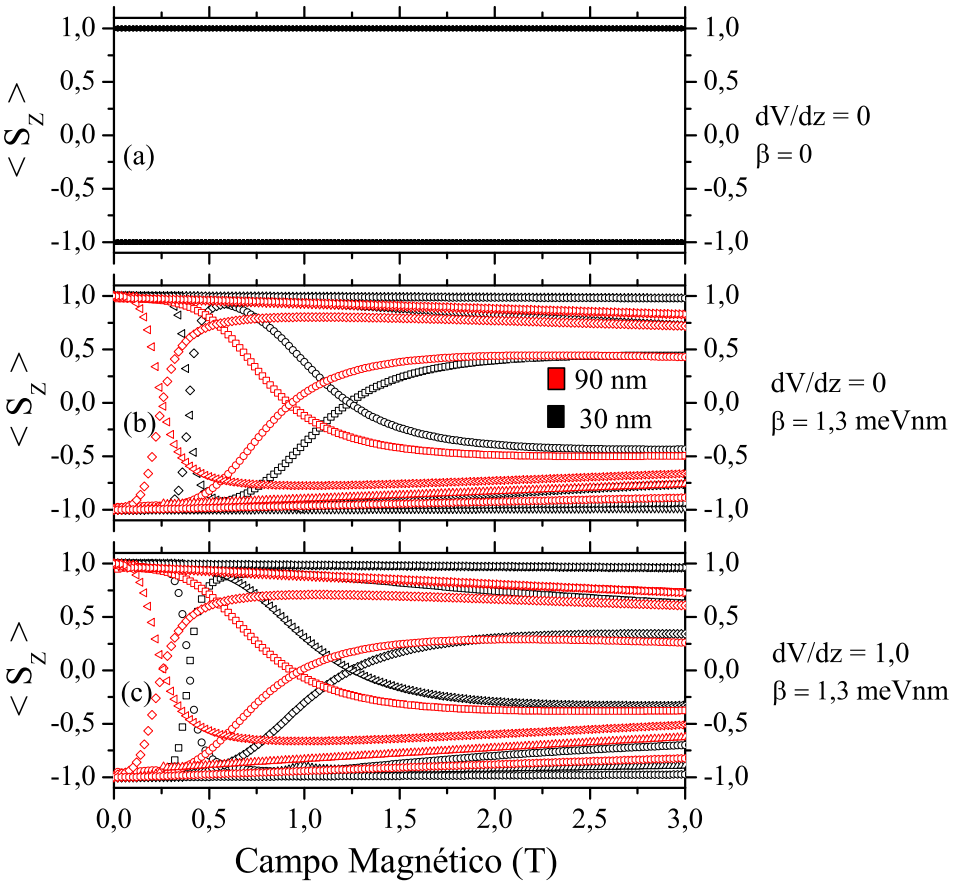

Figura 23: Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ em unidades de $\hbar/2$ em função do campo magnético para diferentes tamanhos de r_0. a) Sem interação spin-órbita, b) apenas a contribuição de Dresselhaus e em c) com ambas as contribuições de Dresselhaus e Rashba.

Uma importante característica de se ressaltar quando são consideradas as contribuições de Rashba e Dresselhaus no acoplamento SO, é a mistura de estados de spins a campo

nulo. Na Figura 24 (a) e (c), temos representado o valor esperado da projeção do spin na direção z para um ponto quântico de InAs com $\hbar\omega_0$ =5meV, e novamente considerando uma base truncada de 106 estados eletrônicos.

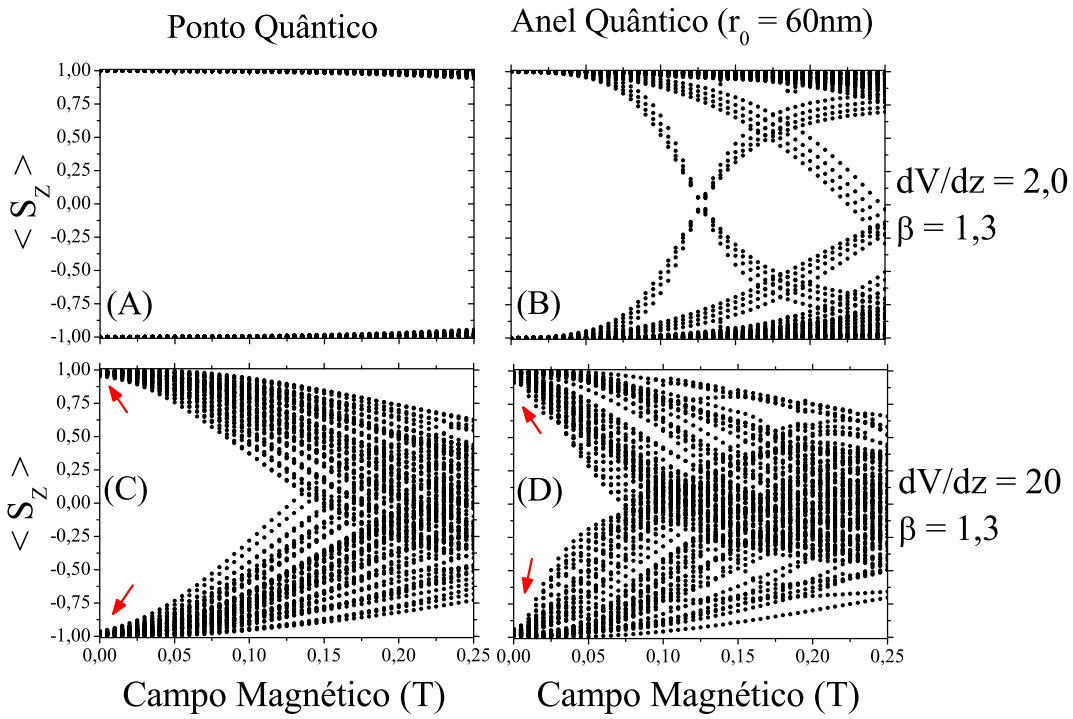

Figura 24: Valor esperado de $\langle S_z \rangle$ com ambas contruibuições de Rashba e Dresselhaus, em função do campo magnético, para diferentes valores de dV/dz e nanoestruturas. a) Ponto Quântico com dV/dz =2,0meV/nm, b) Anel Quântico com dV/dz =20meV/nm, c) Ponto Quântico com dV/dz =2,0meV/nm, d) Anel Quântico com dV/dz =20meV/nm. Em ambos os casos o parâmetro de Dresselhaus utilizado é de β =2meV-nm, setas são utilizadas para indicar as misturas a campo nulo.

Podemos perceber, que ao aumentar consideravelmente o valor do campo elétrico, dV/dz de 2 para 20meV/nm, temos que os efeitos de spin-órbita, neste caso devido a contribuição de Rashba, começa a provocar uma mistura significativa a campo nulo. O mesmo comportamento é visto para o anel quântico, neste caso com r_0 =60nm e mesma energia de confinamento lateral $\hbar\omega_0$, como mostrado nos painéis (b) e (d) da Figura 24. Aqui podemos notar, novamente, que há uma maior mistura de estados na transição de estrutura ponto-anel, como já foi notado nas figuras anteriores. Esta mistura a campo nulo, é dependente do material, como já foi reportado anteriormente em pontos quânticos de InSb [69]. Porém, como ainda não há evidencias experimentais de crescimento de anéis quânticos de InSb, fizemos tal análise apenas para nanoestruturas de InAs.

4.6 Dependência do Zeeman *splitting* com os parâmetros geométricos e de SO

Nesta seção, faremos uma breve análise do comportamento do Zeeman spin-*splitting* associado ao estado fundamental, para diferentes valores de confinamento lateral $\hbar\omega_0$, em presença de campo magnético. Consideraremos os efeitos da interação SO (Rashba e Dresselhaus), para pontos e anéis quânticos. Efetuaremos comparações com a situação sem interação SO. É importante mencionar que o Zeeman *splitting* para o estado fundamental pode ser definido como $\Delta E = E_{0,0,\downarrow} - E_{0,0,\uparrow}$. Esta definição é válida quando a interação SO é nula, e é parcialmente válida para campos muito baixos, onde a interação SO produz pouca mistura de estados de spin. Analisaremos o comportamento dos níveis de Zeeman de mais baixa energia, os quais na medida que o campo aumenta mudam continuamente de caráter tanto no numero quântico m quanto no spin.

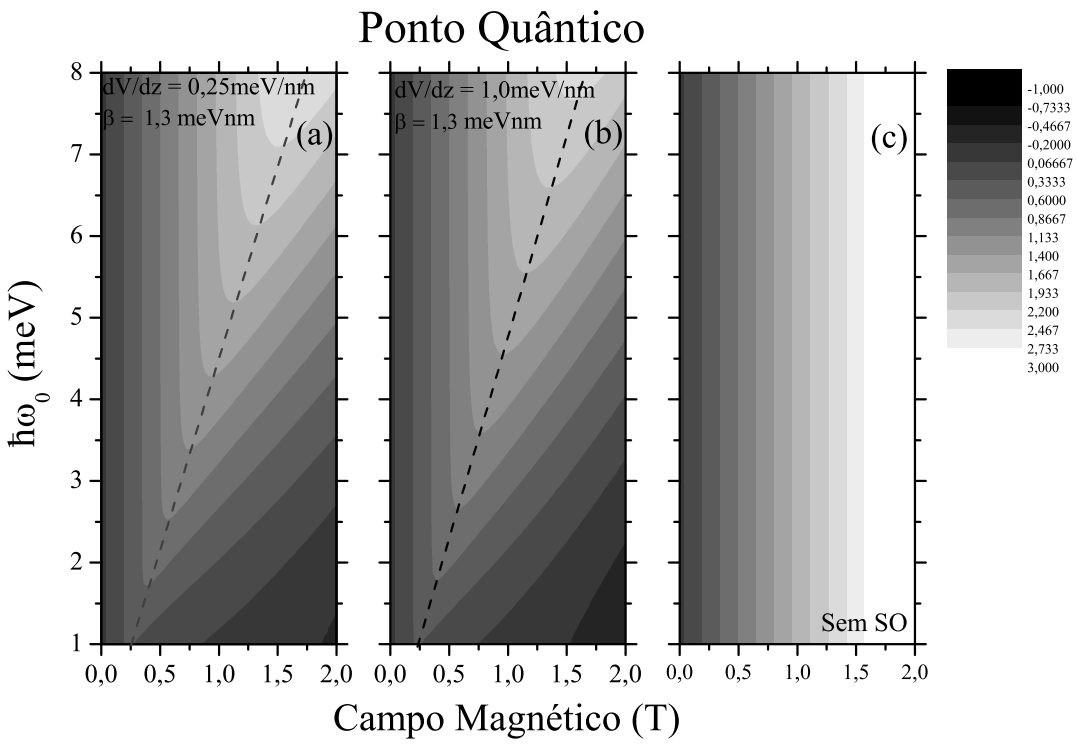

Figura 25: ΔE do estado fundamental de Zeeman em função de $\hbar\omega_0$ e do campo magnético B, em presença da interação SO com dV/dz=0,25 e 1,0meV/nm e β =1,3meV-nm para um ponto quântico.

Na Figura 25 representamos a diferença de energia (ΔE) para os estados de Zeeman de mais baixa energia (ver Figura 20), como função do confinamento lateral ($\hbar\omega_0$) e do campo magnético, para um ponto quântico em presença de acoplamento SO (aqui estão inclusas todas as contribuições). Deste gráfico, podemos observar duas importantes

características: i) Dos painéis (a) e (b) podemos notar que a interação SO produz um pico na dependência de ΔE com o campo magnético (linhas tracejadas). A posição deste pico depende fortemente com o parâmetro $\hbar\omega_0$ e está relacionada com a mistura dos estados de spin.; ii) A posição do pico depende fortemente com o campo magnético e do parâmetro de confinamento lateral; iii) Quando não são considerados os efeitos da interação SO, os acoplamentos entre estados de spin oposto desaparecem e ΔE varia de forma linear e crescente com o campo magnético, como pode ser visto no painel (c).

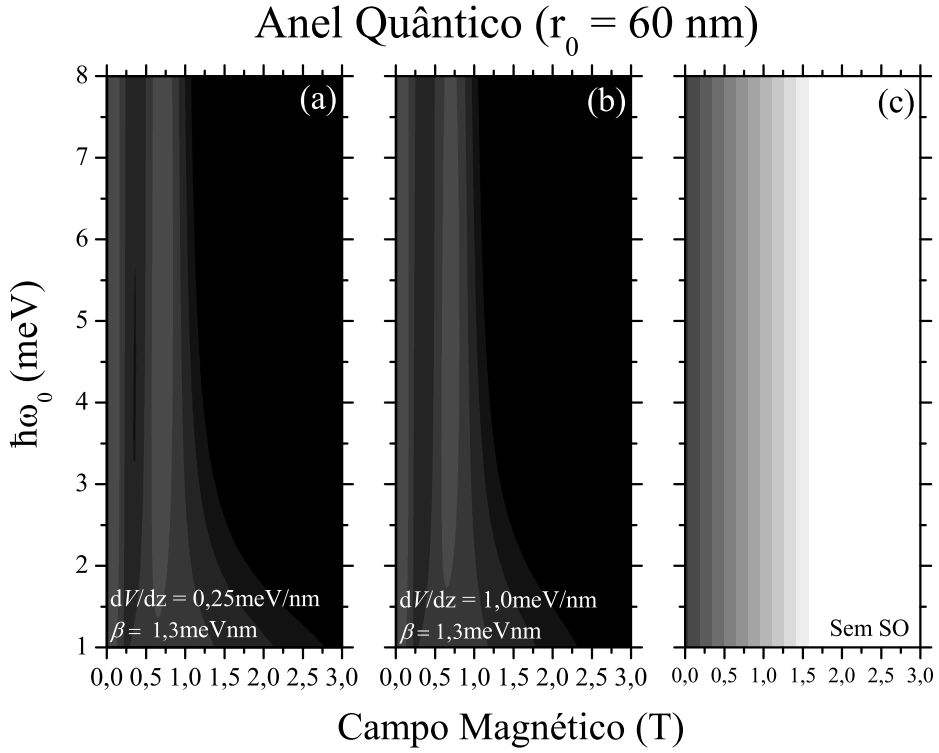

Figura 26: ΔE do estado fundamental de Zeeman em função de $\hbar\omega_0$ e do campo magnético B, em presença de interação SO com dV/dz=0,25 e 1,0meV/nm e β =1,3meV-nm para um anel quântico de $r_0 = 60$nm. Aqui foi usado o mesmo esquema de cores da Figura 25.

Ao se analisar o comportamento da diferença de energias ΔE, descrito acima, numa nanoestrutura do tipo anel quântico, de raio médio r_0 =60nm, podemos notar que a principal modificação que ocorre, é o a aparecimento de oscilações da ΔE como função do campo magnético, como é mostrado na Figura 26 (a) e (b). Este comportamento difere do observado em pontos quânticos, onde apenas uma oscilação é percebida. Este é um fator importante na determinação do fator-g eletrônico, como veremos a seguir. As posições dos picos correspondentes as oscilações do ΔE com o campo magnético, apresentam pouca dependência com o parâmetro de confinamento lateral $\hbar\omega_0$, diferentemente do observado para pontos quânticos. Notar que estas oscilações estão diretamente relacionadas com os dois pontos de máxima mistura observados na Figura 20. Como é esperado, em ausência

da interação SO, a diferença de energias de Zeeman aumenta linear e progressivamente com o campo magnético [ver painel (c)].

4.7 Fator-g em pontos e anéis quânticos

As propriedades de spins em sistemas de baixa dimensionalidade, bem como a compreensão detalhada do comportamento magnético de tais sistemas, são de grande interesse para implementação de spintrônica em nanoestruturas. O parâmetro central, que caracteriza, a resposta do spin de um elétron (ou um buraco), à presença de campo magnético, aplicado em uma nanoestrutura, é o fator de Landé ou também conhecido como fator-g. Estudos sobre os efeitos de diferentes parâmetros externos, sobre o valor do fator-g em nanoestuturas, como por exemplo o campo elétrico [71], são tópicos de intenso interesse teórico [73, 74, 75] e experimental [76, 77].

Uma das principais componentes que produz modificações do fator-g, em nanoestruturas, é o acoplamento spin-órbita, devido as contribuições de Rashba e Dresselhaus (em estruturas *zinc-blende*). Também foi bem estabelecido que as propriedades magneto-ópticas, dependem diretamente do comportamento do fator-g. Em particular, tem-se comprovado, que as taxas de relaxação de spins (W) em pontos quânticos, devido ao acoplamento elétron-fônon, depende com o fator-g, da seguinte forma: $W \sim (\mu g B)^n$ [63]; onde n é um número inteiro que depende do tipo de acoplamento elétron-fônon e g é o fator de Landé. Assim, analisar o comportamento do fator-g, com os diversos processos SO, é atualmente, de grande importância em problemas de decoerência de spins. Devido a esta importância, fizemos um estudo qualitativo do comportamento do fator-g em pontos e anéis quânticos.

O espectro eletrônico característico, em presença de ambas as contribuições de Rashba (dV/dz =2,0meV/nm) e Dresselhaus (β=1,3meV-nm), em função do campo magnético, está representado na Figura 27. No painel (a) temos o espectro para um ponto quântico, e no painel (b) um anel quântico com r_0 =30nm. As linhas vermelhas representam o espectro de energias sem interações SO, apenas levando em considerando o efeito Zeeman devido ao campo magnético aplicado. Neste caso, podemos perceber que não há formações de *minigaps* de energia. Quando é considerado o efeito de spin-órbita, representado no espectro pelas linhas pretas, as formações de *minigaps* de energia, tornam-se visíveis, e neste caso como vimos nas seções anteriores, ocorre uma forte mistura entre os estados de spins devido as contribuições de Rashba e Dresselhaus.

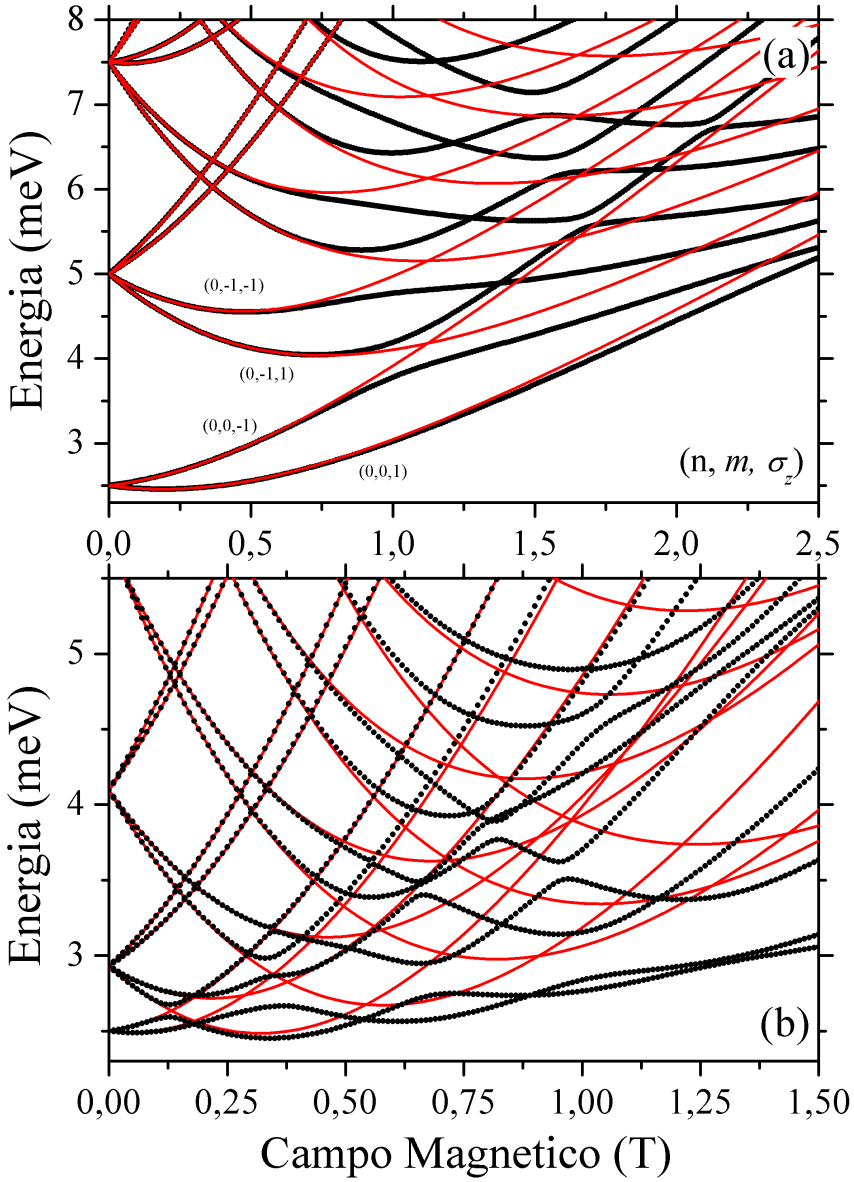

Figura 27: a) Espectro de energia em função do campo magnético. Painel (a) para um ponto quântico, e em (b) um anel quântico com $r_0 = 30$nm. Linhas vermelhas sem acoplamento SO, e linhas pretas em presença de ambas contribuições de Rashba (dV/dz =2,0meV/nm) e Dresselhaus (β =1,3meV-nm).

A escolha do valor do raio médio (r_0), neste caso r_0 =30nm, é devida a ter uma maior variação do *minigap* de energia quando em presença do acoplamento SO, como pode-se notar na Figura 28, onde está representada a diferença de energia para os estados de Zeeman de mais baixa energia para diferentes conjuntos de parâmetros de acoplamento SO e raios médios r_0.

Para determinar o fator-g efetivo nestas nanoestruturas, existem duas definições [75] normalmente aceitas. Uma dessas definições relaciona o fator-g com a diferença das

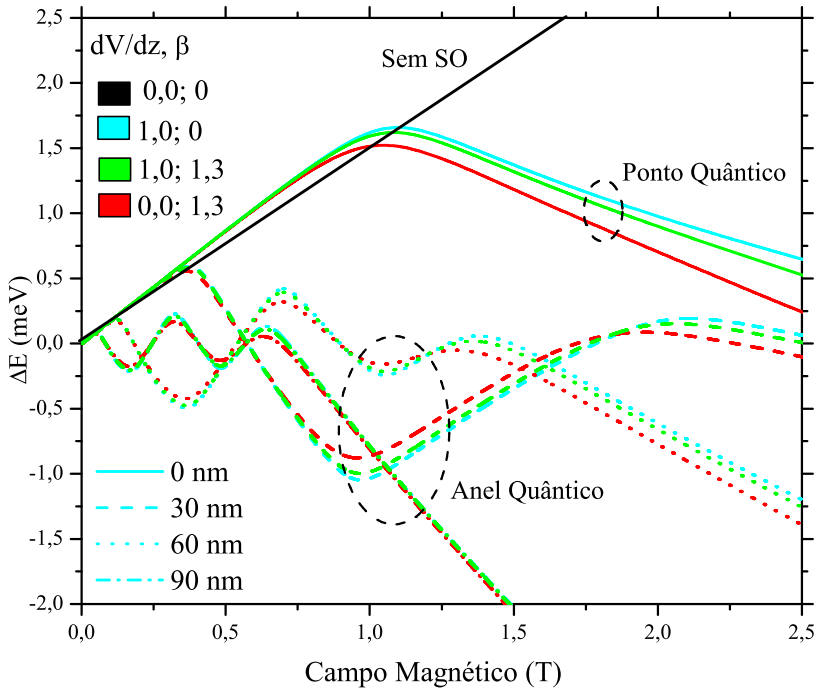

Figura 28: a) Diferença de energia para o estado fundamental, $(E_{0,0,\downarrow} - E_{0,0,\uparrow}$, para vários conjuntos de parâmetros de acoplamento SO e raios médios r_0.

energias dos dois níveis de Zeeman de spin oposto.

$$g \propto E_{n,m,\sigma_z} - E_{n,m,\sigma_z'}. \tag{4.1}$$

Desta forma, o fator-g será proporcional ao Zeeman *splitting*. Uma outra definição relaciona o fator-g com a diferença do valor esperado da projeção do spin $\langle S_z \rangle$ na direção de aplicação do campo magnético para o estado fundamental, $g \propto \Delta S_z$.

Para a nossa análise, partimos da primeira definição, já que em princípio, a diferença de energias entre níveis de Zeeman pode ser medida experimentalmente, por exemplo, através de magneto-absorção óptica intra-banda. É importante salientar dois fatos importantes: i) A definição da Equação (4.1) é estritamente válida em situações onde não existe interação SO e os números quânticos m e de spin σ_z são preservados para todos os campos magnéticos considerados. ii) A interação SO é uma perturbação fraca quando comparada por exemplo ao efeito Zeeman. Sendo assim, não esperamos que o comportamento do fator-g em presença da interação SO sofra mudanças drásticas em relação à definição (4.1) (situação sem SO)

Em nossa descrição do fator-g, é necessário levar em consideração que nos pontos críticos de *anticrossings* das energias, o valor esperado da projeção do spin na direção z, inverterá seu caracter (ou orientação), como verificamos nas seções anteriores. Desta

forma, identificamos inicialmente o nível fundamental de Zeeman para campos baixos ($n = 0, m = 0, \sigma_z = \pm 1$), e em presença da interação SO, acompanhamos a evolução dos correspondentes estados de spin como função do campo magnético. Para cada valor de B, procuramos estados de caráter dominante ($n = 0, m = 0$) e de spin oposto. A diferença de energias destes níveis sera proporcional ao fator-g eletrônico compatível com a definição estabelecida na Equação (4.1).

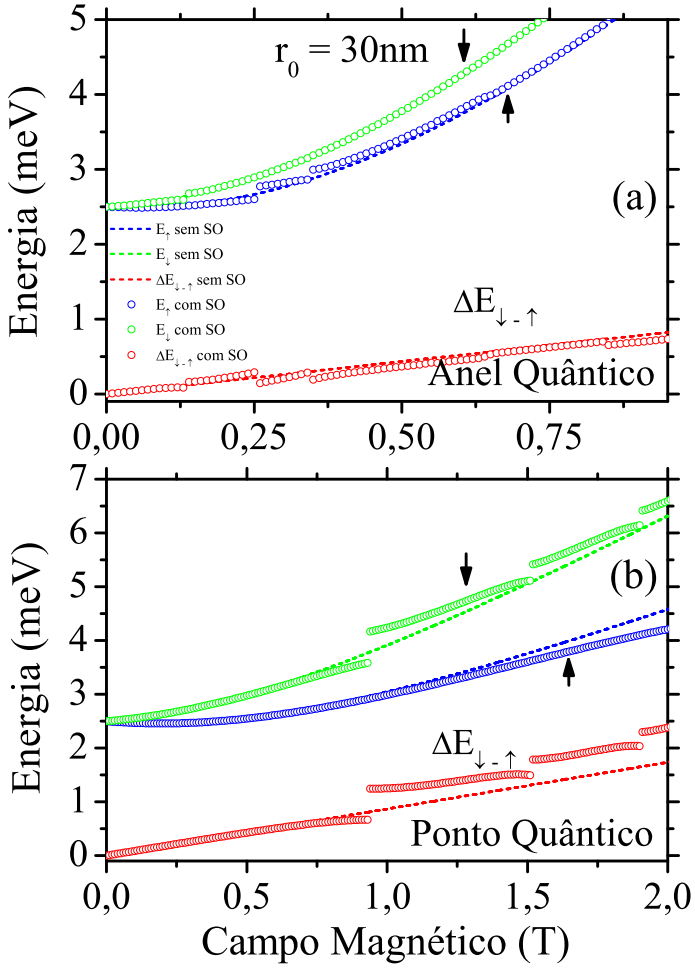

Figura 29: Energia do estado fundamental para spin *up* e spin *down* em função do campo magnético. Linhas tracejadas não são incluídos efeitos de spin-órbita e círculos em presença com dV/dz =2,0meV/nm. O estado down é representado pela cor verde, azul para o estado up e o vermelho para a diferença e energia $\Delta E_{\uparrow-\downarrow}$ em a) anel quântico com raio médio de $r_0 = 30$nm e b) um ponto quântico.

Na Figura 29 temos representado os estados de Zeeman com caráter dominante do tipo $(0, 0, -1)$ e $(0, 0, 1)$ em função do campo magnético. Os dados representados nesta figura são relativos ao spin *down* (cor verde) e *up* (cor azul) extraídos da Figura 27. Na figura, os círculos representam as energias em presença de interação SO, e as linhas tracejadas sem acoplamento SO. No painel (a) é referido a um anel quântico e o painel (b) corresponde a um ponto quântico. As descontinuidades, que podem ser vistas nos painéis (a) e (b),

são causadas pela necessidade de preservar estados de spin oposto na determinação do fator-g. É importante notar que estas discontinuidades produzem *minigaps* de energia, que serão proporcionais à magnitude do acoplamento SO (dV/dz e β). Assim, a diferença dos estados de spin oposto e dominantemente de carater ($n = 0, m = 0$), será então o fator-g ($g \propto \Delta E$), que na Figura 29, está representada pela cor vermelha, círculos abertas com SO, e linha tracejada sem acoplamento SO (apenas efeito Zeeman).

Experimentalmente, existe uma grande quantidade de formas de se determinar o fator-g numa nanoestrutura, entre elas, podemos citar espectroscopia por capacitância [77], rotação Faraday resolvida no tempo [78], espectroscopia por tunelamento magnético [79], dentre outras. Neste trabalho, propomos uma forma alternativa de se medir experimentalmente o spin *splitting*, através de espectroscopia de absorção óptica interbanda, em presença de campo magnético externo aplicado na nanoestrutura. Usando esta técnica, incidindo luz circulamente polarizada $\sigma^{\pm}$ (configuração de Faraday) ou linearmente polarizada $\hat{e}_z$, (configuração de Voigt) [80], estados com momento angular total $j = m + s$, realizam transições intra-banda (lembre-se que neste trabalho só foi considerado a banda de condução), definidas pelas regras de seleção ópticas: $\Delta j = 0$ (para a configuração de Voigt) e $\Delta j = \pm 1$ (para a configuração de Faraday).

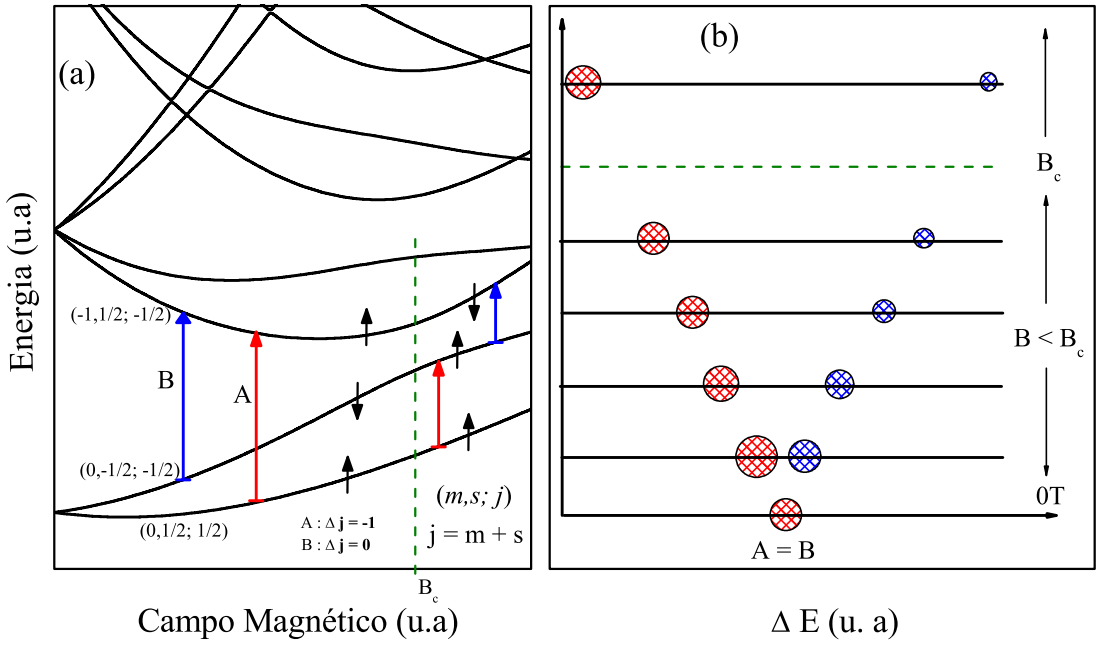

Figura 30: No painel (a) representamos o espectro de energia para um ponto quântico com efeitos de SO, em função do campo magnético. As setas vermelhas indicam a transição $\Delta j = -1$, as setas azuis a transição $\Delta j = 0$, e as setas pretas o estado dominante de spin. No painel (b), temos um esquema representando as intensidades das transições ópticas através do diâmetro dos círculos, vermelhas para a transição $\Delta j = -1$ (σ^-), azuis para a transição $\Delta j = 0$.

Na Figura 30, à nível de ilustração, temos representado o espectro de um ponto quântico no painel (a), quando em presença de acoplamento SO. A seta A, representa a transição $\Delta j = -1$ e a seta B representa uma transição com $\Delta j = 0$. Estas transições são obtidas com luz circularmente polarizada à esquerda e linear, respectivamente. A diferença das energias destas transições: $\Delta E(A) - \Delta E(B)$, define experimentalmente o fator-g de Landé para o estados de Zeeman com caráter dominante ($n = 0, m = 0, \sigma_z = \pm 1$). Ao variar o campo magnético, devido aos efeitos do acoplamenento SO, há uma forte mistura dos estados eletrônicos, como foi visto anteriormente, e o carácter dos estados que definiam o fator-g, muda à medida que o campo magnético aumenta. No entanto, as transições ópticas acompanham a evolução dos estados de spin, através das correspondentes regras de seleção. No painel (B), representamos esquematicamente as diferenças de energias para estas transições, podemos observar uma região de discontinuidade (*minigaps*), próxima do campo crítico B_c. Estas quebras de continuídade devem ser observadas experimentalmente e são claras assinaturas da presença da interação spin-órbita. A posição e a largura dos *minigaps* no espectro de absorção óptica interbanda, permitem por exemplo, identificar o tamanho da nanoestrutura e quantificar a magnitude da interação spin-órbita.

5 Conclusão

Utilizando a técnica da diagonalização númerica, tendo como base a Hamiltoniana não-perturbada de uma partícula simples, em presença de um campo magnético na direção z, com um potencial de confinamento ajustável, estudamos os efeitos do acoplamento SO, levando em consideração as contribuições de Rashba e Dresselhaus.

Os efeitos devido ao acoplamento SO, mostraram ser extremamente importantes na estrutura eletrônica, provocando fortes acoplamentos entre estados, com aparecimento de *anticrossings* nas energias em campos magnéticos críticos B_c, com *minigaps* bem definidos, proporcionais aos parâmtros de acoplamento SO. Analisamos o comportamento do espectro de energia para duas geometrias: ponto quântico e anel quântico. Para um mesmo regime de parâmetros de Rashba (dV/dz) e Dresselhaus (β), comprovamos que a geometria tipo anel quântico fornece uma estrutura mais rica de mistura de estados de spin, permitindo identificar e manipular regiões onde uma determinada orientação do spin seja dominante. Mostramos que a mistura de estados afeta significativamente o comportamento dos estados de mais baixa energia produzindo *minigaps* e oscilações em função do campo magnético.

Considerando os efeitos da interação SO, analisamos o comportamento do fator-g, usando a definição $g \propto \Delta E$, onde ΔE é a Zeeman spin *splitting*. Vimos que, quando são considerados os efeitos de SO, devido ao forte acoplamento entre os estados eletrônicos, dados pela regra de seleção $\Delta m = m - m' = \pm 1$, os estados tem seu estado quântico de spin alterado, sendo assim, o fator-g, que é proporcional ao spin *splitting* do estado fundamental, apresentará um comportamento do tipo função *degrau*. A "altura"dos degraus estão associadas as formações de *minigaps* nos *anticrossings* das energias do estado fundamental.

Também, propomos um esquema experimental para medir o fator-g em nanoestruturas em presença da interação SO, através de absorção óptica intrabanda, em presença de campo magnético externo aplicado na nanoestrutura. A incidência de luz com polarizações

bem definidas, tornaria possível acompanhar o spin *splitting*, já que as transições ópticas seguem regras de seleção bem definidas.

Encontramos desta forma, em nosso trabalho, regimes característicos de campo magnético, confinamento lateral e geometria para manipular as misturas de estados eletrônicos e o fator-g. Uma correta compreensão do comportamento deste parâmetro é de vital importância nos processos de decoerência e manipulação de estados de spins em nanoestruturas semicondutoras, para implementação em dispositivos spintrônicos e de informação quântica.

Referências

[1] TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Electron states in a two-dimensional ring - an exactly soluble model. ***Semicond. Sci. Technol.***, v. 11, p. 1635, nov. 1996.

[2] CIORGA, M. S. *et al.* Addition spectrum of a lateral dot from Coulomb and spin-blockade spectroscopy. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 61, p. R16315, jun. 2000.

[3] TARUCHA, S. *et al.* Shell Filling and Spin Effects in a Few Electron Quantum Dot. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 77, p. 3613, out. 1996.

[4] SIRKOSKI, Ch.; MERKT, U. Spectroscopy of electronic states in InSb quantum dots. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 62, p. 2164, maio 1989.

[5] ASHOORI, R. C. Electrons in artificial atoms. ***Nature***, v. 379, p. 413, fev. 1996.

[6] HAWRYLAK, P.; PFANNKUCHE, D. Magnetoluminescence from correlated electrons in quantum dots. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 70, p. 485, jan. 1993.

[7] HAWRYLAK, P. Single-electron capacitance spectroscopy of few-electron artificial atoms in a magnetic field: Theory and experiment. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 71, p. 3347, nov. 1993.

[8] WÓJS, A.; HAWRYLAK, P. Charging and infrared spectroscopy of self-assembled quantum dots in a magnetic field. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 53, p. 10841, abr. 1996.

[9] SCHIMIDT, K. H. *et al.*. Electron transport through a single InAs quantum dot. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 62, p. 15879, dez. 2000.

[10] ADAMS, Edward N. Some Consequences of Possible Degeneracy of Energy Bands in Ge. ***Phys. Rev.***, v. 92, p. 1063-1064, nov. 1953.

[11] DRESSELHAUS, G.; KIP, A. F.; KITTEL, C. Spin-Orbit Interaction and the Effective Masses of Holes in Germanium. ***Phys. Rev.***, v. 95, p. 568, jul. 1954.

[12] PARMENTER, R. H. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. ***Phys. Rev.***, v. 100, p. 580, out. 1955.

[13] ROTH, L. M.; LAX, B.; ZWERDLING, S. Theory of Optical Magneto-Absorption Effects in Semiconductors. ***Phys. Rev.***, v. 114, p. 90, abr. 1959.

[14] WINKLER, R. **Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems**. Berlim: Springer-Verlag, 2003.

[15] JACAK, L.; WÓJS, A.; HAWRYLAK, P. **Quantum Dots**. Berlim: Springer-Verlag, 1998.

[16] ASHCROFT, Neil W.; MERMIN, David N. **Solid State Physics**. Philadelphia: Saunder College. 1976.

[17] DEMEL, T. *et al.* Nonlocal dynamic response and level crossings in quantum-dot structures. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 64, p. 788, fev. 1990.

[18] REED, M. A. *et al.* Spatial Quantization in GaAs-AlGaAs multiple Quantum Dots. ***Journ. Vac. Sci. Technol. B***, v. 4, p. 358, jan. 1986.

[19] BRUNNER, K. *et al.* Photoluminescence from a single GaAs/AlGaAs quantum dot. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 69, p. 3216, nov. 1992.

[20] FUKUI, T.; ANDO, S.; TOKURA, Y.; TORIYMA, T. GaAs tetrahedral quantum dot structures fabricated using selective area metalorganic chemical vapor deposition. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 58, p. 2018, maio 1991.

[21] LEBENS, J. A.; TSAI, C. S.; VAHALA, K. J.; KUECH, T. F. Application of selective epitaxy to fabrication of nanometer scale wire and dot structures. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 56, p. 2642, jun. 1990.

[22] FUHRER, A. *et al.* Energy spectra of quantum rings. ***Nature***, v. 413, p. 822, out. 2001.

[23] GRANADOS, D. Vertical order in stacked layers of self-assembled In(Ga)As quantum rings on GaAs (001). ***Appl. Phys. Lett.***, v. 86, p. 071918, fev. 2005.

[24] GRANADOS, D.; MOLINA, J. M. G. In(Ga)As self-assembled quantum ring formation by molecular beam epitaxy. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 82, p. 2401, abr. 2003.

[25] CUI, J. *et al.* Self-assembled SiGe quantum rings grown on Si(001) by molecular beam epitaxy. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 83, p. 2907, out. 2003.

[26] RAZ, T.; RITTER, D.; BAHIR, G. Formation of InAs self-assembled quantum rings on InP. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 82, p. 1706, mar. 2003.

[27] LORKE, A. *et al.* Spectroscopy of Nanoscopic Semiconductor Rings. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 84, p. 2223, mar. 2000.

[28] KIM, T. W. *et al.* Formation and optical properties of CdTe self-assembled quantum rings with electronic states embedded in ZnTe barriers. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 84, p. 595, jan. 2004.

[29] MANO, T. *et al.* Self-Assembly of Concentric Quantum Double Rings. ***Nano Letters***, v. 5, p. 425, fev. 2005.

[30] WILLIANSON, A. J.; ZUNGER, A. InAs quantum dots: Predicted electronic structure of free-standing versus GaAs-embedded structures. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 59, p. 15819, jun. 1999 e referências inclusas.

[31] FANYAO, Q. *et al.* Finite element method for electronic properties of semiconductor nanocrystals. ***Journ. of Appl. Phys.***, v. 94, p. 3462, set. 2003.

[32] SANTOS JR., D. R. *et al.* Influence of the quantum dot shape on the determination of the electronic structure and electron decoherence. ***Physica E***, v. 26, p. 331, fev. 2005.

[33] LUTTINGER, J. M.; KOHN, W. Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields. ***Phys. Rev.***, v. 97, p. 869, fev. 1955.

[34] KANE, E. O. Band structure of indium antimonide. ***Journ. Phys. Chem. Solids.***, v. 1, p. 249, jan. 1957.

[35] CHENG, S. J.; SHENG, W.; HAWRYLAK, P. Theory of excitonic artificial atoms: InGaAs/GaAs quantum dots in strong magnetic fields. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 68, p. 235330, dez. 2003.

[36] DARWIN, C. G. The diamagnetism of the free electron. **Proc. Cambridge Phil. Soc.**, v. 27, p. 86, 1930.

[37] FOCK, V. Bemerkung zur Quantelung des harmonischen Oszillators im Magnetfeld. ***Z. Phys.***, v. 47, p. 446, maio 1928.

[38] COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOË, B. **Quantum Mechanics**; Wiley; New York (1977).

[39] BRUNO-ALFONSO, A.; LATGÉ, A. Aharonov-Bohm oscillations in a quantum ring: Eccentricity and electric-field effects. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 71, p. 125312, mar. 2005.

[40] CLIMENTE, J. I.; PLANELLES, J. Far-infrared absorption of vertically coupled self-assembled quantum rings. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 72, p. 155322, out. 2005.

[41] LLORENS, J. M. *et al.* Electronic structure of a quantum ring in a lateral electric field. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 64, p. 035309, jun. 2001.

[42] KORKUSINSK, M.; **Correlations in Semiconductor Quantum Dots**, Tese (doutorado em Física) - Carleton Institute of Physics, Ottawa, Ontario, Canada, 2004.

[43] AHARONOV, Y.; BOHM, D. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory ***Phys. Rev.***, v. 115, p. 485, ago. 1959.

[44] PLANELLES, J.; CLIMENTE, J. I. Semiconductor concentric double rings in a magnetic field ***European Physical Journal B***, v. 48, p. 65-70, 2005.

[45] SIMONIN, J. *et al.* Single-particle electronic spectra of quantum rings: A comparative study. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 70, p. 205305, nov. 2004.

[46] SZAFRAN, B.; PEETERS, F. M. Few-electron eigenstates of concentric double quantum rings. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 72, p. 155316, out. 2005.

[47] TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Landau quantization and the Aharonov-Bohm effect in a two-dimensional ring. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 53, p. 6947, mar. 1996.

[48] GROCHOL, M.; GROSSE, F.; ZIMMERMANN, R. Optical exciton Aharonov-Bohm effect, persistent current, and magnetization in semiconductor nanorings of type I and II. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 74, p. 115416, set. 2006.

[49] KÖNIG, M. *et al.* Direct Observation of the Aharonov-Casher Phase. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 96, p. 076804, fev. 2006.

[50] TAN, W.-C.; INKSON, J. C. Magnetization, persistent currents, and their relation in quantum rings and dots. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 60, p. 5626, ago. 1999.

[51] VOSKOBOYNIKOV, O. *et al.* Energy states and magnetization in nanoscale quantum rings. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 66, p. 155306, out. 2002.

[52] CHEN, Y. N.; CHUU, D. S.; CHENG, S. J. Shot noise of quantum ring excitons in a planar microcavity. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 72, p. 233301, dez. 2005.

[53] FUHRER, A. *et al.* Fano effect in a quantum-ring, quantum-dot system with tunable coupling. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 73, p. 205326, maio 2006.

[54] LOSS, D.; DIVINCENZO, David. P. Quantum computation with quantum dots. ***Phys. Rev.*** **A**, v. 57, p. 120, jan. 1998.

[55] FÖLDI, P. *et al.* Spintronic single-qubit gate based on a quantum ring with spin-orbit interaction. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 71, p. 033309, jan. 2005.

[56] LANDAU, L. D.; LIFSHITZ, E. M. **Relativistic Quantum Theory; Vol. 4 of Course of theoretical physics**. Oxford: Pergamon Press, 1971.

[57] GRIFFITHS, David J. **Introduction to Quantum Mechanics**. New Jersey: Prentice Hall, 1995.

[58] KITTEL, C. **Quantum Theory of Solids**. New York: Willey, 1963.

[59] BAIBICH, M. N. *et al.* Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 61, p. 2472, nov. 1988.

[60] DATTA, S.; DAS, B. Electronic analog of the electro-optic modulator. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 56, p. 665, fev. 1990.

[61] FANYAO, Q.; VASILOPOULOS, P. Spin transport across a quantum dot doped with a magnetic ion. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 89, p. 122512, set. 2006.

[62] FANYAO, Q.; HAWRYLAK, P. Magnetic Exchange Interactions in Quantum Dots Containing Electrons and Magnetic Ions. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 95, p. 217206, nov. 2005.

[63] ALCALDE, A. M.; FANYAO, Q.; MARQUES, G. E. Electron-phonon induced spin relaxation in InAs quantum dots. ***Physica E***, v. 20, p. 228, jan. 2004.

[64] BYCHKOV, Yu. A.; RASHBA, E. I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. ***Journ. of Phys. C***, v. 17, p. 6039, nov. 1984.

[65] MOROZ, A. V.; BARNES, C. H. W. Spin-orbit interaction as a source of spectral and transport properties in quasi-one-dimensional systems. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 61, p. R2464, jan. 2000.

[66] DRESSELHAUS, G. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. ***Phys. Rev.***, v. 100, p. 580, out. 1955.

[67] GANICHEV, S. D. *et al.* Experimental Separation of Rashba and Dresselhaus Spin Splittings in Semiconductor Quantum Wells. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 92, p. 256601, jun. 2004.

[68] ARFKEN, G. **Mathematical Methods for Physicists**. New York: London Academy, 1970.

[69] DESTEFANI, C. F.; ULLOA, Sergio E.; MARQUES, G. E. Spin-orbit and electronic interactions in narrow-gap quantum dots. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 70, p. 205315, nov. 2004.

[70] Disponível em: www.netlib.org/eispack. acesso em 26 fev. 2007.

[71] SOUZA, R. de; DAS SARMA, S. Gate control of spin dynamics in III-V semiconductor quantum dots. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 68, p. 155330, out. 2003.

[72] Hai, G.-Q.; OLIVEIRA, S. S. Electron relaxation induced by electron longitudinal acoustic-phonon scattering in single and coupled quantum dots in external magnetic and electric fields. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 74, p. 193303, nov. 2006.

[73] PRYOR, Craig E.; FLATTÉ, Michael E. Landé g Factors and Orbital Momentum Quenching in Semiconductor Quantum Dots. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 96, p. 026804, jan. 2006.

[74] LOPÉZ-RICHARD, V. *et al.* Manipulation of g-factor in diluted magnetic semiconductors quantum dots: Optical switching control. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 88, p. 052101, jan. 2006.

[75] DESTEFANI, C. F.; ULLOA, Sergio E. Anisotropic electron g factor in quantum dots with spin-orbit interaction. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 71, p. 161303, abr. 2005.

[76] HANSON, R. *et al.* Zeeman Energy and Spin Relaxation in a One-Electron Quantum Dot. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 91, p. 196802, nov. 2003.

[77] MEDEIROS-RIBEIRO, G. *et al.* Spin splitting of the electron ground states of InAs quantum dots. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 80, p. 4229, jun. 2002.

[78] STICH, D. *et al.* Effect of Initial Spin Polarization on Spin Dephasing and the Electron g Factor in a High-Mobility Two-Dimensional Electron System. ***Phys. Rev. Lett.***, v. 98, p. 176401, abr. 2007.

[79] THORNTON, A. S. G. *et al.* Observation of spin splitting in single InAs self-assembled quantum dots in AlAs. ***Appl. Phys. Lett.***, v. 73, p. 354, jul. 1998.

[80] PRADO, S. J. *et al.* Magneto-optical properties of nanocrystals: Zeeman splitting. ***Phys. Rev.*** **B**, v. 67, p. 165306, abr. 2003.

APÊNDICE A – Resumos e Artigos

A.1 Resumos em congressos

Resumos apresentados em congressos, encontros e escolas especializadas:

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Rashba spin-orbit interaction in quantum rings*, XXIX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, maio de 2006, São Lourenço - MG

⋆ **G. S. Diniz, T. V. Sousa, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Rashba spin-orbit effects on the electronic structure of InAs quantum rings*, X Escola Brasileira de Estrutura Eletrônica, julho de 2006, Niterói - RJ

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Rashba spin-orbit effects on the electronic structure of InAs quantum rings*, V Mostra da Física, agosto de 2006, Uberlândia - MG

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Magnetic field effects in quantum rings in presence of Rashba spin-orbit interaction*, V Mostra da Física, setembro de 2006, Uberlândia - MG

⋆ **G. S. Diniz, T. V. Sousa, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Rashba spin-orbit and morphology effects on the electronic structure of InAs quantum rings*, 13^{th} Brazilian Workshop on Semiconductor Physics, abril de 2007, São Paulo - SP

A.2 Artigos em Revistas Especializadas

Artigos publicados em revistas indexadas:

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Rashba Spin-Orbit and Morphology effects on the electronic structure of InAs quantum rings*, submetido na revista Brazilian Journal of Physics em Abril de 2007

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, G. E. Marques, A. M. Alcalde**, *Spin-orbit interaction effects on electron g-factor in quantum rings*, em fase de conclusão para ser submetido na revista Applied Physics Letters em Julho de 2007

⋆ **G. S. Diniz, O. O. Diniz Neto, A. M. Alcalde**, *Spin-orbit interaction effects on the electronic structure of InAs quantum rings*, em fase de conclusão para ser submetido na revista Physical Review B em Agosto de 2007

Livros Grátis

(http://www.livrosgratis.com.br)

Milhares de Livros para Download:

Baixar livros de Administração
Baixar livros de Agronomia
Baixar livros de Arquitetura
Baixar livros de Artes
Baixar livros de Astronomia
Baixar livros de Biologia Geral
Baixar livros de Ciência da Computação
Baixar livros de Ciência da Informação
Baixar livros de Ciência Política
Baixar livros de Ciências da Saúde
Baixar livros de Comunicação
Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE
Baixar livros de Defesa civil
Baixar livros de Direito
Baixar livros de Direitos humanos
Baixar livros de Economia
Baixar livros de Economia Doméstica
Baixar livros de Educação
Baixar livros de Educação - Trânsito
Baixar livros de Educação Física
Baixar livros de Engenharia Aeroespacial
Baixar livros de Farmácia
Baixar livros de Filosofia
Baixar livros de Física
Baixar livros de Geociências
Baixar livros de Geografia
Baixar livros de História
Baixar livros de Línguas

Baixar livros de Literatura
Baixar livros de Literatura de Cordel
Baixar livros de Literatura Infantil
Baixar livros de Matemática
Baixar livros de Medicina
Baixar livros de Medicina Veterinária
Baixar livros de Meio Ambiente
Baixar livros de Meteorologia
Baixar Monografias e TCC
Baixar livros Multidisciplinar
Baixar livros de Música
Baixar livros de Psicologia
Baixar livros de Química
Baixar livros de Saúde Coletiva
Baixar livros de Serviço Social
Baixar livros de Sociologia
Baixar livros de Teologia
Baixar livros de Trabalho
Baixar livros de Turismo