



POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES

**“ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA EN
HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**MAESTRO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES**

P R E S E N T A

I.Q. ARTURO WONG LÓPEZ

Tutor: Dr. Francisco Mireles Higuera





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas

Tesis Digitales

Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©

PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

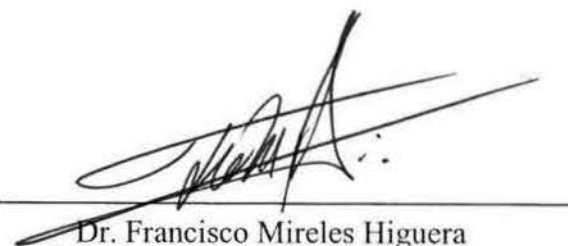
El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

ESTA TESIS NO SALE
DE LA BIBLIOTECA

Resumen

El reciente interés en la manipulación del *espín* del electrón ha dado origen a un campo de investigación de frontera en la Física de Estado Sólido conocido como *Espintrónica* (electrónica basada en el espín). Uno de los mecanismos que han sido propuestos para lograr una eficiente manipulación del espín de los electrones, es el *acoplamiento espín-órbita de Rashba*. Aunque el acoplamiento Rashba para electrones ha sido ampliamente estudiado tanto teórica como experimentalmente en los últimos años, poco trabajo se ha realizado para el caso de huecos en heteroestructuras semiconductoras. En el presente trabajo, utilizando el formalismo de la teoría *k.p* de masa efectiva dentro de la aproximación de la función envolvente, se obtuvo la forma explícita de los Hamiltonianos que describen adecuadamente el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba, tanto para huecos ligeros como para los huecos pesados, en heteroestructuras semiconductoras tipo zinc-blenda. Para la deducción de tales Hamiltonianos se emplearon los modelos de Kane y de Luttinger-Kohn extendido que acoplan las bandas de conducción, huecos ligeros y huecos pesados. La forma exacta obtenida de los Hamiltonianos de Rashba tanto de huecos ligeros como de huecos pesados, depende explícitamente de la posición, la energía y el vector de onda *k*. Con el fin de explorar la física relevante detrás de las expresiones obtenidas, el Hamiltoniano de Rashba en ambos casos (huecos ligeros y huecos pesados) fue expandido en series, y se conservaron los términos dominantes. Esto permitió obtener expresiones analíticas simples tanto para los Hamiltonianos de Rashba como para las constantes de acoplamiento, así como para las dispersiones y los desdoblamientos de espín. Particularmente para el caso de los huecos pesados se obtuvo que el Hamiltoniano de acoplamiento Rashba está compuesto por un término lineal y un término cúbico en el vector de onda *k* cerca del vector de onda de Fermi. La contribución dominante está dada por el término lineal, en contraste de lo que se ha obtenido por otros autores mediante teoría de invariantes y modelos simplificados, donde el acoplamiento Rashba está dado solamente por un término cúbico. Para el caso de huecos ligeros, se obtuvo que el Hamiltoniano de acoplamiento Rashba está compuesto solamente por un término lineal en *k*, resultado que concuerda perfectamente con lo que se ha reportado en la literatura para estos sistemas. También se realizaron cálculos numéricos del acoplamiento Rashba para diversos compuestos utilizando las expresiones obtenidas, y se discutió la relevancia e implicaciones de tales expresiones para el diseño de dispositivos espintrónicos prototipo basados en la manipulación del espín de los huecos en heteroestructuras semiconductoras.

Aprobado:



Dr. Francisco Mireles Higuera

Director de Tesis

Agradecimientos

Es un placer expresar mi más sincera gratitud por la dirección de mi trabajo de tesis al Dr. Francisco Mireles Higuera, a quién más allá de su paciencia, sabios consejos y ayuda desinteresada, le agradezco el haberme permitido descubrir lo maravillosa y apasionante que es la ciencia de la Física.

Agradezco a los Drs. Ernesto Cota Araiza y Mario H. Farías Sánchez por su participación en mi comité tutorial.

A los Drs. Leonel Cota Araiza y Jesús L. Heiras Aguirre, y al Centro de Ciencias de la Materia Condensada por el apoyo brindado durante mis estudios de maestría.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología y a la Dirección General de Estudios de Posgrado de la UNAM (DGEP) por el apoyo económico recibido para la realización de mis estudios.

A los Drs. Ernesto Cota Araiza, Francisco Mireles Higuera, Jorge Alberto Villavicencio Aguilar, Jesús María Siqueiros Beltrones y Jesús Alberto Maytorena Córdova por su participación como miembros del jurado en mi examen de grado.

De manera muy especial a mi madre, María del Carmen, por su gran amor y gran ejemplo de tenacidad; a mi padre, Arturo, que nunca ha dejado de estar conmigo; a mis hermanos Alfredo y Adainalí por su cariño; y a Sayuri por sus constantes palabras de aliento.

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo recepcional.

NOMBRE:

Wong López Arturo

FECHA:

09/06/05

FIRMA:

[Firma] Lic. Wilma García

Contenido

1. Introducción.....	1
1.1 Antecedentes: Nacimiento de la Espintrónica.....	3
1.2 Materiales con aplicaciones espintrónicas	5
1.3 Inyección, transporte y detección de espín.....	7
1.4 Manipulación del espín.....	11
1.5 El transistor de espín de Datta y Das.....	12
1.6 Acoplamiento espín-órbita en semiconductores.....	14
1.7 Acoplamiento Rashba de los estados de valencia y objetivo de la tesis...	19
2. Teoría $k.p$	23
2.1 Física básica de semiconductores.....	23
2.2 Teoría $k.p$: Generalidades.....	27
2.2.1 Teoría $k.p$: Conceptos básicos.....	31
2.2.2 Teoría $k.p$ para bandas múltiples no degeneradas.....	34
2.2.2.1 Caso de dos bandas acopladas.....	36
2.3 Teoría $k.p$ con interacción espín-órbita: Modelo de Kane.....	38
2.3.1 Funciones base y la matriz Hamiltoniana de Kane.....	41
2.3.2 Soluciones para los eigenvalores y las eigenfunciones de la matriz de interacción.....	43
2.4 El método $k.p$ para bandas degeneradas: Modelo de Luttinger-Kohn.....	46
2.4.1 El Hamiltoniano y las funciones base en el modelo de Luttinger- Kohn.....	47
2.4.2 Soluciones del Hamiltoniano utilizando teoría de perturbaciones de Löwdin.....	48
2.4.3 Expresiones explícitas para la matriz de Luttinger-Kohn.....	50

3. Acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras.....	52
3.1 Física básica de Heteroestructuras semiconductoras.....	53
3.2 Aproximación de la función envolvente.....	55
3.3 Estudio de acoplamiento Rashba en heteroestructuras.....	58
3.3.1 Modelo de Kane para heteroestructuras.....	61
3.3.2 Cálculo de los elementos de matriz para el modelo de Kane.....	63
3.3.3 Modelo de Luttinger-Kohn.....	65
3.3.4 Expresiones explícitas para la matriz de Luttinger-Kohn (extendido).....	66
4. Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados.....	70
4.1 Hamiltoniano para huecos pesados: Modelo de Kane.....	71
4.2 Dispersiones para huecos pesados.....	82
4.2.1 Dispersiones de huecos pesados: Teoría de perturbaciones.....	83
4.2.2 Dispersión de huecos pesados: Método variacional.....	87
4.3 Resumen de resultados.....	90
4.4 Hamiltoniano para huecos pesados: Modelo de Luttinger-Kohn extendido.....	93
5. Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros.....	97
5.1 Hamiltoniano para huecos ligeros: Modelo de Kane.....	97
5.2 Dispersiones para huecos ligeros.....	102
5.2.1 Dispersiones de huecos ligeros: Teoría de perturbaciones.....	102
5.2.2 Dispersión de huecos ligeros: Método variacional.....	106
5.3 Resumen de resultados.....	107
5.4 Hamiltonianos para huecos ligeros: Modelo de Luttinger-Kohn extendido.....	109

6. Discusión de los resultados.....	113
6.1 Huecos pesados.....	113
6.2 Huecos ligeros.....	125
Conclusiones.....	134
Apéndice.....	138
A Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un pozo de potencial triangular.....	138
B Cálculo de los elementos de matriz de masa efectiva.....	142
C Parámetros de bulto para semiconductores con simetría zinc-blenda....	155
Referencias.....	156

Capítulo 1

Introducción

Es bien sabido desde los inicios de la Mecánica Cuántica que los electrones poseen una propiedad magnética fundamental, su momento angular intrínseco, *i.e.* el *espín*. Recientemente ha cobrado un gran interés el estudiar novedosas formas que permitan manipular, generar y detectar corrientes eléctricas con espines polarizados, con miras a una prometedora electrónica sin precedentes denominada *Espintrónica* [1] (electrónica basada en el espín). En Espintrónica (o *Magnetoelectrónica*, como se le denominó en los inicios de este campo de investigación) no sólo se explota la propiedad de carga eléctrica de los electrones, tal y como se ha venido haciendo en la electrónica convencional, sino que además, se toman en cuenta diferentes fenómenos cuánticos, principalmente el grado de libertad de espín de los portadores de carga en un material (electrones y/o huecos) e inclusive el espín nuclear. Se espera que al incorporar el grado de libertad de espín, se agregarán muchas más funciones y capacidades a los dispositivos electrónicos convencionales basados en la carga eléctrica; entre las ventajas que estos novedosos dispositivos tendrían sobre los dispositivos semiconductores convencionales, se pueden mencionar: el decrecimiento en el consumo de energía eléctrica, el aumento en la velocidad de procesamiento de datos y el incremento en las densidades de integración de información, entre otras [1]. De lograrse un completo control sobre el espín de los electrones y huecos, se abriría la puerta hacia una nueva era tecnológica en la que se vislumbra la posibilidad de construir una amplia gama de dispositivos *espintrónicos*, tales

como memorias no volátiles, baterías, diodos y transistores de espín, entre otros. Más aun, la manipulación de los estados cuánticos individuales permitiría la construcción de compuertas lógicas cuánticas espintrónicas, que darían paso al desarrollo y a la creación de una computadora basada en efectos cuánticos (computación cuántica) [2].

Sin embargo, para que todo esto se vuelva una realidad, se requiere contestar un sinnúmero de preguntas fundamentales, por ejemplo: ¿Es posible fabricar semiconductores que sean ferromagnéticos a temperatura ambiente?, ¿cómo generar corrientes de espines polarizados?, ¿cómo detectar una corriente de espines polarizados?, ¿cómo manipular una corriente de espines?, etc. [2]. Algunas de estas preguntas aun no han sido contestadas apropiadamente, otras de ellas han sido respondidas solo parcialmente hasta el momento. A pesar de ello, existen experimentos en los que por un lado, se ha logrado mantener la coherencia de los estados de espín durante varios cientos de nanosegundos, recorriendo distancias de más de $100\mu m$ en heteroestructuras semiconductoras [3]. Por otro lado, recientemente se ha podido demostrar experimentalmente la inyección de portadores de carga con espines polarizados de un material ferromagnético a un semiconductor no magnético [4]. Son estos experimentos los que han dado gran motivación e impulso a la Espintrónica recientemente [5].

En relación a la manipulación de las corrientes de electrones con espines polarizados, uno de los mecanismos físicos estudiados en la actualidad con mayor intensidad es el acoplamiento espín-órbita (acoplamiento del espín de los electrones con su grado de libertad traslacional); tal efecto en heteroestructuras semiconductoras se le

conoce como *acoplamiento Rashba* [6] y constituye la base del trabajo pionero de *Datta* y *Das* [7] en el que proponen un transistor de espines de efecto de campo (SFET, por sus siglas en inglés). Por otro lado, muy recientemente [8] y de manera independiente, dos grupos [9, 10] descubrieron de manera experimental el *efecto Hall de espín*, cuyo origen es el acoplamiento espín-órbita. Dependiendo si el acoplamiento espín-órbita es de tipo Rashba, o es acoplamiento con impurezas, se tienen dos tipos de efecto Hall de espín, conocidos en la literatura como efecto Hall de espín intrínseco y extrínseco respectivamente. El efecto Hall de espín es uno de los temas en Espintrónica que más ha capturado la atención en la actualidad, ya que proveería de una herramienta para lograr el filtrado y acumulación de espines por medios puramente electrostáticos.

Así pues, la Espintrónica es hoy en día una prometedora y excitante área de investigación, en la que aun resta mucho trabajo por hacer tanto en el ámbito científico (investigación básica, teórica y experimental) como en el tecnológico.

1.1 Antecedentes: Nacimiento de la Espintrónica

El inicio de la Espintrónica está ligado al descubrimiento del efecto de *Magnetorresistencia Gigante*¹ (GMR, por sus siglas en inglés) realizado por Baibich et al. en 1988 [11]. El efecto GMR tiene un origen netamente cuántico y se observa típicamente en estructuras estratificadas de películas delgadas, compuestas por capas

¹ El fenómeno de magnetorresistencia (ordinario), el cual se presenta en todos los metales, es el cambio en la resistencia eléctrica intrínseca longitudinal de un material conductor al aplicar un campo magnético; la resistencia se presenta debido a la fuerza de Lorentz que experimentan los electrones y que dan origen al efecto Hall clásico.

alternadas de materiales ferromagnéticos y no magnéticos. Cuando una corriente eléctrica se hace pasar a través de la estructura, se presenta un cambio en la resistencia eléctrica longitudinal si se cambia la dirección de la magnetización de una de las capas ferromagnéticas; este cambio resulta ser un orden de magnitud mayor a la Magnetorresistencia ordinaria (MR). Más precisamente, cuando los momentos magnéticos de las capas ferromagnéticas se encuentran en posiciones paralelas, la dispersión dependiente del espín de los portadores es minimizada, y el material tiene su resistencia mínima ante una corriente longitudinal a lo largo de la estructura (figura 1.1.

a). Cuando los momentos magnéticos de las capas ferromagnéticas se encuentran antiparalelos, la dispersión dependiente del espín de los portadores se maximiza debido a las múltiples dispersiones con las interfases y al principio de exclusión de Pauli; entonces el material tiene su resistencia máxima (figura 1.1. **b**). Si se procura que una de las capas sea un material ferromagnético que mantenga firme su orientación magnética ante un campo magnético externo (*hard ferromagnet*), mientras que la dirección del momento magnético de la otra capa pueda ser manipulada por dicho campo externo (*soft ferromagnet*) entonces se puede lograr que pequeños cambios en el campo magnético externo produzcan un substancial cambio en la señal de GMR, por lo que puede utilizarse el efecto para construir sensores magnéticos de campos extremadamente pequeños [12]. Hoy en día, estos materiales pueden ser fabricados para producir cambios significativos de respuesta GMR ante campos magnéticos relativamente pequeños y operar a temperatura ambiente. La primera aplicación tecnológica del fenómeno y que produjo un impacto económico substancialmente elevado, fue en las cabezas lectoras de discos duros (componente fundamental de cualquier computadora), introducidas al mercado por IBM

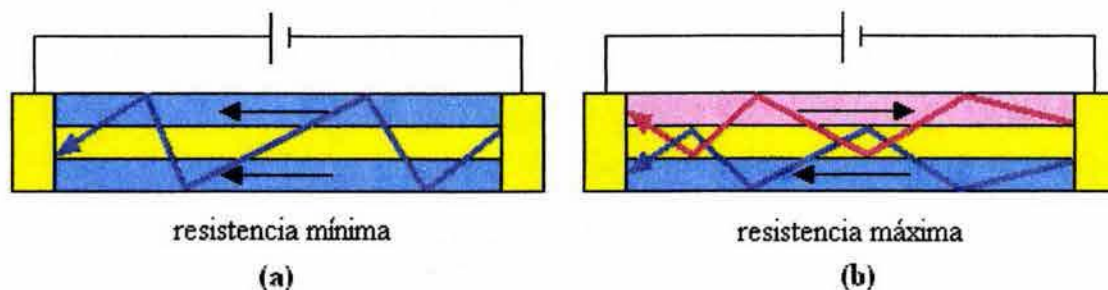


Figura 1.1 Representación esquemática del transporte paralelo al plano de las capas que conforman la estructura tipo "sandwich", formada para una capa de un metal no magnético (ejemplo *Cu*, *Au* y *Al*) entre dos capas de metales ferromagnéticos (ejemplo *Fe*, *Ni*, *Co*), orientados en direcciones (a) alineadas y (b) antialineadas, [12].

en 1997. Entre otras aplicaciones del efecto GMR, destaca la construcción de memorias no volátiles.

Posteriormente, cinco años después del descubrimiento del efecto GMR, fue reportada por Helmut et al. [13] la existencia de un material con estructura tipo perovskita (*LaBaMnO*) en el que se presenta una resistencia de un orden de magnitud mayor a la GMR a temperatura ambiente. Tal efecto es conocido como *Magnetorresistencia Colosal* (CMR), y sin duda, una potencial aplicación de estos materiales es construir sensores magnéticos.

1.2 Materiales con aplicaciones espintrónicas

En un metal ferromagnético, la densidad de estados a la energía de Fermi de los electrones con espín arriba difiere substancialmente de la de los electrones con espín abajo (figura 1.2); al aplicar una diferencia de potencial a través del material, esto da como resultado una corriente electrónica de espines polarizados. Esto hace de los

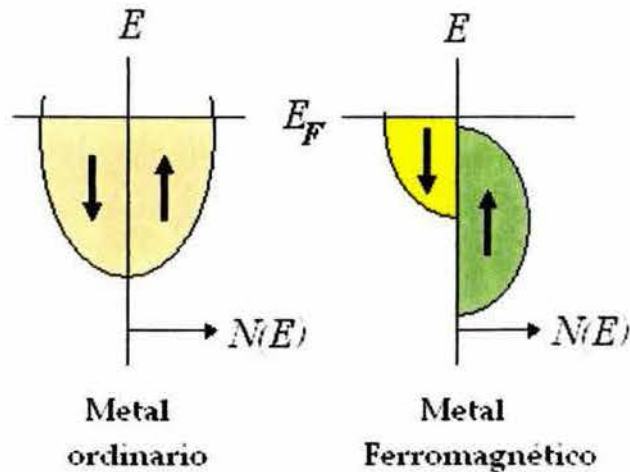


Figura 1.2 En un material ferromagnético, las densidades de estado entre espines arriba y espines abajo están corridas en energía, mientras que para un metal no ferromagnético están al mismo nivel en energía. E es la energía electrónica, E_F es el nivel de Fermi y $N(E)$ es la densidad de estados, [12]

metales ferromagnéticos candidatos ideales para generar corrientes de espines polarizados y por tanto funcionar como filtros polarizadores de espín. Sin embargo, resulta complicado incorporar metales ferromagnéticos en dispositivos semiconductores (siendo estos últimos los materiales básicos en la electrónica), por sus diferencias en estructura cristalina y enlace químico. Así pues, sería muy deseable tener un semiconductor que fuese ferromagnético, con temperatura de Curie por encima de la temperatura ambiente y capaz de incorporar dopantes tipo p y tipo n . Y aunque de hecho existen semiconductores ferromagnéticos, tales como calcogenuros de Europio, éstos poseen una temperatura de Curie por debajo de la temperatura ambiente. Recientemente se descubrieron aleaciones semiconductoras III-V dopadas con impurezas magnéticas (como Mn^{+2}) con propiedades ferromagnéticas y que poseen una temperatura de Curie tan elevada como 110 K [14]. Tales materiales son conocidos como semiconductores magnéticos diluidos (DMS, por sus siglas en inglés) y han generado gran expectación.

Más aun, se ha predicho recientemente que compuestos como ZnO , $ZnSe$ y GaN dopados con Mn , deberían presentar temperaturas de Curie de más de 300 K [15, 16].

El desarrollo de nuevos materiales para aplicaciones espintrónicas continúa a pasos agigantados. Científicos japoneses han descubierto ferromagnetismo a temperatura ambiente en TiO_2 dopado con 6% a 8% de cobalto, preparado mediante ablación láser [17]. Este material es transparente a la luz visible, lo que lo hace un material con posibles aplicaciones optoelectrónicas. Otros materiales como el CaB_6 dopado con La , y capas epitaxiales $CrSb/GaAs/CrSb$ han mostrado temperaturas de Curie por encima de la temperatura ambiente. Más recientemente, Liu et al. [18] reportaron experimentos con películas de GaN y AlN dopadas con Cr , en los que se observa ferromagnetismo a temperaturas superiores a los 900 K. Así pues, resulta aparente que el desarrollo de nuevos materiales seguirá siendo una parte importante en el desarrollo de la Espintrónica.

1.3 Inyección, transporte y detección de espín

Históricamente, la idea de inyectar espines en semiconductores fue propuesta a principios de 1970, con el fin de realizar estudios de tunelaje utilizando electrodos ferromagnéticos [19]. Posteriormente se realizaron estudios teóricos sobre inyección de espines, relacionados con cálculos sobre el decaimiento espacial de la polarización de espín de los portadores de carga (longitudes de coherencia) [20]. Años después, Johnson y Silsbee [21] realizaron experimentos pioneros en los que inyectaban electrones con espines polarizados de un ferromagneto a un paramagneto. Para una exitosa aplicación

de fenómenos dependientes del espín, es requisito indispensable lograr una eficiente inyección de corrientes de portadores de carga con espines polarizados. Diversas metodologías de inyección de espines han sido estudiadas. Entre ellas es posible mencionar las siguientes:

- **Inyección óhmica.** La forma mas directa de inyección de espines es la formación de contactos óhmicos entre un ferromagneto y un semiconductor, esperando una corriente de espines polarizados en éste último. Sin embargo, los contactos óhmicos típicos metal-semiconductor son logrados mediante un fuerte dopaje en la superficie del semiconductor, conduciendo a dispersiones en las que el espín del electrón cambia y se pierde la polarización de la corriente. Hasta hoy, se han reportado inyecciones óhmicas de espines con una eficiencia del 4.5% a temperaturas menores a 10 K [22]. Un trabajo de Schmidt [23] señala que la efectividad de la inyección depende de la razón entre las conductividades de los electrodos ferromagnéticos y no ferromagnéticos, σ_f y σ_{nf} respectivamente. Si $\sigma_f \leq \sigma_{nf}$ (lo cual es el caso típico en metales), entonces puede ocurrir una eficiente inyección de espines. Sin embargo, cuando $\sigma_f \gg \sigma_{nf}$, lo cual sucede cuando el material no ferromagnético es un semiconductor, la eficiencia en la inyección de espines se vuelve significativamente pequeña.
- **Inyección mediante tunelaje.** En 1992, Alvarado y Renaud utilizaron un STM, logrando inyectar electrones con espines polarizados de *Ni* a *GaAs* con una polarización del 30% mediante tunelaje al vacío [24]. El desarrollo de uniones túnel

ferromagneto-aislante-ferromagneto con una alta magnetorresistencia ha demostrado que las barreras de tunelaje pueden resultar en una conservación de la polarización del espín durante el proceso mismo de tunelaje, sugiriendo que dicho proceso puede ser mucho más efectivo para la inyección de espines que en el transporte difusivo.

- **Inyección balística.** Otra alternativa es la inyección de espines a través de la interfaz *ferromagneto-semiconductor* en el régimen balístico, en el que se asume que se conserva el momento transversal del electrón incidente y en el que la longitud del dispositivo es mucho menor a la longitud de onda de Fermi (λ_F). Además, la probabilidad de que el electrón con espín polarizado sea elásticamente dispersado de regreso al ferromagneto debe ser muy pequeña. Experimentos recientes con contactos puntuales entre metales no magnéticos y ferromagnéticos han demostrado inyección balística con una eficiencia mayor al 40%. [25, 26].
- **Inyección a altas energías.** Otra técnica de inyección requiere el uso de electrones polarizados con energías mucho mayores a la energía de Fermi. Se han reportado experimentos en los que los electrones de alta energía atraviesan una capa de cobalto de 3 nm, dando como resultado una corriente de electrones balísticos con una polarización del 90% [27]. Esta corriente altamente polarizada puede continuar hacia una interfaz subyacente *metal-semiconductor*, donde una porción entrará al semiconductor, y si no hay dispersión en la interfaz, la corriente se mantendrá polarizada. La desventaja de esta técnica es que posee una muy baja eficiencia total.

En el contexto teórico, una de las cuestiones importantes concernientes al estudio de transporte e inyección de espines en semiconductores es la validez de utilizar un modelo de electrón independiente y qué tan importantes son las interacciones electrón-electrón para la interpretación de resultados experimentales. En particular, Sham y Ostreich [28] encontraron que a temperaturas muy bajas, estas correlaciones entre partículas se vuelven importantes al momento de explicar los tiempos de relajación del espín (tiempo que duran coherentes los estados de espín).

En 1997, Awschalom et al. [29] realizaron experimentos con *GaAs*, en el que utilizaban pulsos de luz polarizada circularmente para excitar grupos de electrones hacia estados idénticos de espín, los cuales permanecieron coherentes por varios nanosegundos y fueron arrastrados por más de $100\text{ }\mu\text{m}$, esto a muy bajas temperaturas. Ha sido éste uno de los trabajos que ha dado mayor ímpetu a la Espintrónica, ya que mostró la factibilidad de alcanzar largos tiempos de relajación y grandes longitudes de coherencia.

Por otro lado, la detección del espín es el proceso inverso a la inyección de espín, y en primera instancia, las técnicas de inyección de espín antes descritas podrían ser utilizadas para la detección. Pero aunado a esto se encuentran las ya mencionadas desventajas en las técnicas de inyección, las cuales también aplican en la detección de espines polarizados. De esta manera, parece ser que las técnicas que ofrecen mayores ventajas tanto para la detección como para la inyección son los contactos balísticos y los contactos de tunelaje. Una técnica alternativa de detección de espín es el realizar una

medida potenciométrica mediante electrodos ferromagnéticos del potencial químico de las poblaciones de espín fuera de equilibrio [30].

1.4 Manipulación del espín

Para la implementación de dispositivos semiconductores espintrónicos, además de generar y detectar corrientes de espines polarizados, es indispensable lograr la manipulación de los estados de espín, y que éstos se mantengan coherentes durante tiempos largos. Los espines nucleares han sido propuestos como candidatos para el almacenamiento de información, tanto clásica como cuántica, debido a que el tiempo de vida de los espines del núcleo es de varios órdenes de magnitud mayor al de los electrones, además del grado de control que provee la Resonancia Magnética Nuclear sobre dichos espines. Existe evidencia experimental que avala el hecho de que es posible utilizar materiales ferromagnéticos para “marcar” los espines nucleares en semiconductores [31], ofreciendo un camino diferente hacia la manipulación y almacenamiento de información a escala atómica.

El acoplamiento espín-órbita es otro de los mecanismos físicos propuestos para la manipulación del espín. En este contexto, uno de los trabajos más importantes y pioneros en el campo de la Espintrónica, ha sido el transistor de espín sugerido por Datta y Das [7], el cual es similar en operación a un modulador electro-óptico y planteó la posibilidad de controlar los estados de espín mediante campos puramente eléctricos, tal como se detalla a continuación.

1.5 El transistor de espín de Datta y Das

Uno de los trabajos pioneros en el campo de la Espintrónica, es el prototipo del transistor de efecto de campo de espín (SFET) propuesto en 1990 por S. Datta y B. Das [7]. En un transistor de efecto de campo convencional, las cargas eléctricas son introducidas vía un electrodo fuente y recibidas en un electrodo colector. Una compuerta de voltaje genera un campo eléctrico que aumenta o disminuye la corriente de la fuente al colector. En el dispositivo de Datta y Das, una heteroestructura de *InAlAs* / *InGaAs* es la que proporciona un canal de transporte para los electrones, los cuales se encuentran en la interfaz, confinados en la dirección de crecimiento de la heteroestructura y forman un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D). Dicho canal une dos electrodos ferromagnéticos (figura 1.3). Uno de ellos actúa como fuente y el otro como colector. La fuente emite electrones con espines orientados a lo largo de la dirección de magnetización de dicho electrodo, mientras que el colector (el cual posee la misma magnetización que el electrodo fuente) actúa como un filtro de espín y sólo “permite pasar” electrones con espines orientados en la misma dirección que la magnetización del electrodo colector. Si no se presenta cambio alguno en los espines durante el transporte, cada electrón emitido entrará al colector [32]. Sin embargo, una compuerta de voltaje produce un campo que induce una precesión en el espín del electrón vía acoplamiento espín-órbita, el cual es un efecto relativista en el que se acoplan el momento magnético orbital y el momento magnético de espín debido a la presencia de un campo eléctrico (gradiente de potencial). Este fenómeno (el cual se detallará más adelante) se observa en sistemas de gases bidimensionales de electrones en heteroestructuras semiconductoras, de

modo tal que es posible cambiar la dirección de polarización del espín del electrón por medios puramente eléctricos (voltajes de compuerta). De tal suerte que si la polarización del espín del electrón es antiparalela a la magnetización del colector, dicho electrón no pasará. En otras palabras, la corriente eléctrica de espín polarizada es modulada mediante el grado de precesión en el espín, el cual es posible manipular mediante campos eléctricos externos. Tal efecto se espera sea importante en semiconductores de brecha angosta tal como *InGaAs*, los cuales poseen interacciones espín-órbita relativamente grandes. Sin embargo, a pesar de varios años de grandes esfuerzos, el SFET de Datta y Das aun no se ha podido construir, ya que las técnicas de inyección, transporte y detección de espín aun no han sido perfeccionadas, tal y como se mencionó anteriormente. Por otro lado, se tienen avances significativos en las técnicas de crecimiento de películas delgadas, que permiten la construcción de heteroestructuras en las que se crean sistemas bidimensionales, necesarios para la fabricación del transistor de Datta y Das. Más aun, los recientes progresos en la fabricación de semiconductores ferromagnéticos (DMS) ofrece expectativas prometedoras para la realización del SFET.

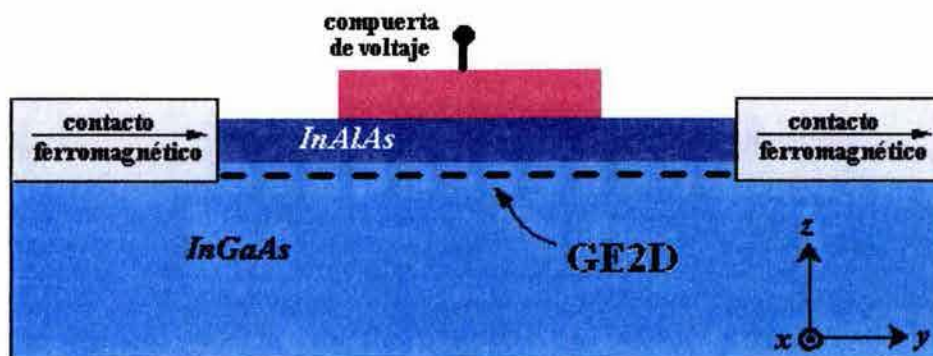


Figura 1.3 Representación esquemática del transistor de efecto de campo de espín de Datta y Das. [7]

1.6 Acoplamiento espín-órbita en semiconductores

Antes de discutir en mayor detalle el acoplamiento espín-órbita en semiconductores, por razones que serán evidentes posteriormente, es importante describir la formación de gases de electrones bidimensionales.

Existen diversas formas de crear gases (o sistemas) quasi-bidimensionales de portadores de carga (electrones o huecos). Una de ellas es construir heteroestructuras dopadas, utilizando técnicas de crecimiento tales como epitaxia de haces moleculares (MBE, por sus siglas en inglés) y deposición química de vapores metal-orgánicos (MOCVD, por sus siglas en inglés). Para evitar problemas de dispersión por interacción electrostática, se utiliza lo que se conoce como dopaje modulado, en el que sólo uno de los materiales que conforman la heteroestructura es afectado con impurezas. Esto es ilustrado en la figura 1.4. En el lado izquierdo de dicha figura, se muestra la banda de conducción de una heteroestructura $n\text{-AlGaAs/GaAs}$ antes de que los donadores desprendan electrones (figura 1.4 **a**). Una vez que las impurezas liberan electrones (Figura 1.4 **b**), estos migran hacia el material intrínseco, en el que la energía de la banda de conducción está por debajo de la banda de conducción del material dopado, provocando un desequilibrio de carga y creando con ello un campo eléctrico efectivo, formándose así un pozo de potencial triangular que confina a los electrones en la dirección de crecimiento de la heteroestructura (dirección z en la figura 1.4), pero manteniéndolos libres en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento (plano x - y en el caso de la figura 1.4).

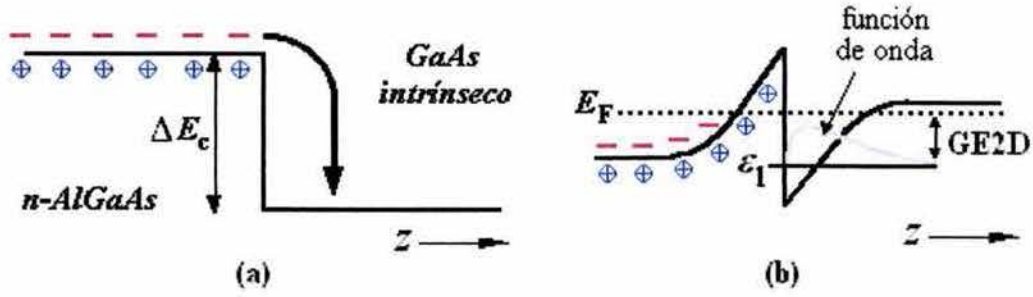


Figura 1.4 Banda de conducción de una heteroestructura, mostrando cómo se separan los electrones de sus donadores para formar un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D); E_F es la energía de Fermi y ΔE_c es la diferencia entre en las energías de conducción entre el material I y el material II ($n\text{-AlGaAs}$ y GaAs respectivamente para la figura) y ε_1 es la energía del estado base. Ref. [34]

El campo eléctrico producido en la interfaz (y paralelo a la dirección de crecimiento) debido a la asimetría de inversión estructural (SIA), se transforma (debido al acoplamiento espín-órbita) en un campo magnético efectivo que actúa en el espín de los portadores de carga confinados. A este fenómeno se lo conoce como *efecto Rashba* [35] y es el responsable de romper la degeneración en el vector de onda k de los estados de espín del gas de electrones bidimensional (GE2D), a diferencia del *efecto Zeeman*, que rompe la degeneración en energía. En un artículo extensamente citado, Bychkov y Rashba [6] propusieron el siguiente Hamiltoniano para describir al acoplamiento espín-órbita en un GE2D

$$H_{SO} = \alpha_R (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \hat{z}$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector operador de espín de Pauli, $\mathbf{k}$ es el vector de onda, $\hat{z}$ es un vector unitario perpendicular al GE2D y α_R es una constante de acoplamiento que depende del material y es conocida como *parámetro de Rashba*. Este Hamiltoniano produce dos

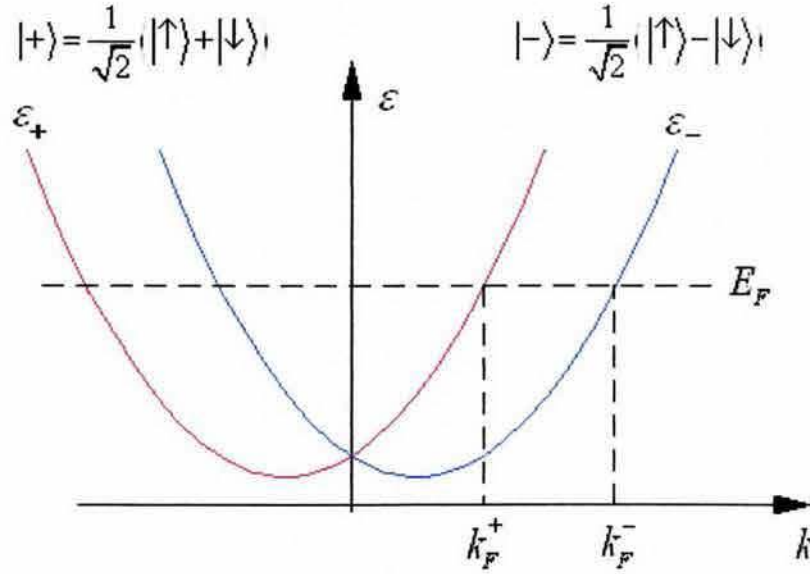


Figura 1.5 Dispersión para un gas bidimensional de electrones con acoplamiento Rashba. Para una energía de Fermi (E_F) dada, se tiene un valor del vector de onda k_F^+ y un valor k_F^- , para los estados $|+\rangle$ y $|-\rangle$ respectivamente, dando lugar a un rompimiento de la degeneración de los estados de espín en k .

ramas en la dispersión de los electrones (figura 1.5), dadas por

$$\varepsilon_+ = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 + \alpha_R k \quad \text{y} \quad \varepsilon_- = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 - \alpha_R k$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones y $k = |\mathbf{k}|$. El desdoblamiento de los estados de espín del GE2D puede ser detectado experimentalmente, por ejemplo, a través de las oscilaciones de Shubnikov-de Haas. El valor de α_R en materiales III-V tipo zinc-blenda ha sido estimado a través de expresiones analíticas utilizando el modelo de Kane de varias bandas, dentro de la teoría $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ [36, 37, 38, 39], teoría y modelos que describiremos más adelante. Los valores experimentales de α_R para materiales III-V tipo zinc-blenda van desde 0.06 a 0.4 eV-Å [40], lo cual conduce a una energía de

desdoblamiento de espín del orden de 1 a 10 meV a la energía de Fermi, dependiendo del nivel de dopaje. Recientemente, Litvinov [41] calculó el valor de α_R utilizando el modelo de Kane (al igual que sus antecesores) pero para materiales tipo wurtzita.

Lassnig [42] fue el primero en reconocer que el desdoblamiento SIA en la banda de conducción está relacionado con el gradiente del potencial incluyendo los bordes de banda (band offsets) de los estados de valencia en la interfaz [43]. Aunque aparentemente el efecto Rashba no es proporcional al campo eléctrico interfacial, sí depende de dicho campo y, en principio, podría ser aumentado o disminuido mediante compuertas de voltaje, tal y como se sugiere en el transistor de efecto de campo de espín de Datta y Das. En un trabajo experimental, Grundler [44] encontró que la barrera de potencial en los bordes de banda (band offsets), también contribuye al desdoblamiento de los estados de espín, debido a la penetración de las funciones de onda en las barreras.

Cabe mencionar que en semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda, existe otra contribución al desdoblamiento de los estados de espín y es ocasionada por la asimetría de inversión en el bulto (BIA), tal y como fue mostrado por Dresselhaus [45]. Dicha contribución es proporcional a k^3 para valores pequeños de k . Este desdoblamiento ha sido ampliamente investigado con el uso de métodos ópticos y de transporte. A diferencia del acoplamiento Rashba, el acoplamiento Dresselhaus es intrínseco de cada material, y no puede ser afectado o modificado de forma externa. Dependiendo del material semiconductor, el acoplamiento Dresselhaus resulta ser del orden o menor al acoplamiento Rashba.

Las primeras observaciones experimentales de desdoblamiento de espín en la subbanda de conducción fueron reportadas por Luo et al. [46] en pozos cuánticos de $GaSb/InAs$, y de forma independiente Das et al. [47] en heteroestructuras semiconductoras de $In_xGa_{1-x}As/In_yAl_{1-y}As$, ambos utilizando patrón de oscilaciones Shubnikov-de Haas (SdH). Jusserand et al. [48] y Richards et al. [49] proporcionaron el conjunto de datos más completo sobre desdoblamiento de espín disponible hasta ahora, utilizando dispersión Raman de electrones de conducción en pozos cuánticos de $GaAs/GaAlAs$. Engels et al. [37] y Nitta et al. [50] comenzaron a realizar experimentos sobre el efecto que tiene un campo eléctrico sobre el desdoblamiento de espín, en heteroestructuras con compuertas de voltaje. Sato et al. [51] midió la dependencia en el voltaje de compuerta del parámetro de Rashba en una heteroestructura $In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$ obteniendo valores para el desdoblamiento de espín extraordinariamente grandes (de 10 meV).

En el contexto teórico, en 1999, Moroz y Barnes [52] en un estudio teórico sobre el efecto de la interacción espín-órbita de Rashba en la conductancia balística y la estructura de bandas en sistemas quasi-uni-dimensionales (Q1D, alambres cuánticos), mostraron que un cambio drástico en la dependencia en k del espectro, con respecto al sistema puro bidimensional, ocurre cuando se considera un acoplamiento relativamente grande, dando lugar a picos anómalos en la conductancia de gases quasi-uni-dimensionales. En 2001, Mireles y Kirczenow [53] realizaron cálculos de propiedades de transporte de espín balístico de alambres Q1D en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba, desarrollando un método de amarre fuerte que modela apropiadamente el

efecto Rashba. Encontraron que una fuerte interacción espín-órbita de Rashba puede producir cambios dramáticos en la transmisión de electrones con espines polarizados inyectados a alambres cuánticos. Después de los trabajos de Moroz – Barnes y Mireles – Kirczenow, ha habido una avalancha de trabajos donde se estudia el acoplamiento espín-órbita (Rashba + Dresselhaus) en una gran variedad de sistemas mesoscópicos (alambres cuánticos, puntos cuánticos, anillos cuánticos, etc.).

Recientemente, Schliemann et al. [54] propusieron un transistor de efecto de campo de espín, basado en ambos tipos de acoplamiento espín-órbita, Rashba y Dresselhaus y que es tolerante a procesos de dispersión dependientes del espín cuando la constante de acoplamiento Rashba es igual a la constante de acoplamiento Dresselhaus, lo que sugiere que al menos en este régimen no es estrictamente necesario el transporte de forma balística.

1.7 Acoplamiento Rashba de los estados de valencia y objetivo de la tesis

Los primeros trabajos experimentales sobre desdoblamiento de los estados de espín, para las subbandas de valencia en materiales tipo zinc-blenda, (debido a la asimetría de Inversión Estructural) fueron realizados por Stormer et al. [55], quien en experimentos de magnetorresistencia observó un desdoblamiento en la resonancia de ciclotrón de huecos en una heteroestructura *GaAs/GaAlAs*. Por su parte, Wieck et al. [56] observó desdoblamientos de los estados de espín en transiciones ópticas intersubbanda de

huecos en capas de Silicio con alta concentración de portadores de carga en ausencia de campos magnéticos. Por otro lado, recientemente Wunderlich et al. [9] y de manera independiente Kato et al. [10] descubrieron experimentalmente el efecto Hall de espín, el cual puede ser producido por acoplamiento espín-órbita de Rashba, predicho teóricamente por Hirsch [57] y Sinova et al. [58].

En cuanto al desdoblamiento de los estados de espín en huecos, las primeras teorías fueron introducidas por Ohkawa y Uemura [59], Bangert y Landwehr [60], y Ando [61]. Gerchikov y Subashiev [36] utilizando teoría de grupos, mostraron explícitamente que el término de acoplamiento de Rashba en la subbanda de huecos pesados debería seguir la forma

$$H_R = \beta_R (\sigma_+ k_-^3 + \sigma_- k_+^3),$$

con $\sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ y β_R es una constante análoga a α_R ; en contraste para los huecos ligeros, en el que sugieren que el acoplamiento Rashba debería ser similar al de los electrones, es decir lineal en k . Utilizando el modelo de Luttinger-Kohn de 6×6 , Gerchikov y Subashiev encontraron una expresión para β_R que depende de las masas efectivas de huecos pesados y huecos ligeros, de la magnitud del campo eléctrico en la interfaz y de integrales de la función de Airy. El Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros y pesados obtenido por Gerchikov y Subashiev, fue confirmado posteriormente por Winkler et al. [62] mediante teoría de invariantes y el modelo simplificado de Luttinger-Kohn de 4×4 .

Objetivo del presente proyecto de tesis

Como hemos visto, la gran importancia del efecto Rashba en el campo de la Espintrónica ha dado lugar a una intensa investigación del fenómeno, tanto teórica como experimentalmente para electrones de conducción. Sin embargo, resultan escasos los trabajos teóricos concernientes al estudio del acoplamiento espín-órbita de Rashba en los estados de la banda de valencia (huecos), esto debido a que la descripción de la física involucrada en el mecanismo de acoplamiento espín-órbita de huecos resulta ser de un grado de dificultad mayor al caso de los electrones.

El presente trabajo esta enfocado al estudio del acoplamiento espín-órbita en los estados de valencia de materiales tipo zinc-blenda, con brecha energética (E_g) pequeña (tales como *InAs*, *InSb*, etc.). Mediante teoría $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ se obtendrán los Hamiltonianos que describen adecuadamente el acoplamiento Rashba en huecos, así como fórmulas explícitas para las respectivas constantes de acoplamiento. Para ello, se empleará el modelo de Kane de 6 bandas, y el modelo de Luttinger Kohn extendido, que considera explícitamente el acoplamiento de las bandas de conducción, de huecos ligeros y de huecos pesados. Estas expresiones serían de gran utilidad para el cálculo de propiedades de transporte de huecos en heteroestructuras semiconductoras.

En el siguiente capítulo (capítulo 2) se revisará de forma detallada la teoría $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, herramienta fundamental del presente trabajo de tesis. En el capítulos 3 se estudiará la aproximación de la función envolvente y la teoría $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ para heteroestructuras. Además, se

describirá el modelo a utilizar para el estudio de acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras. En el capítulo 4, utilizando los modelos de Kane y Luttinger-Kohn extendido, se obtendrá el Hamiltoniano que describe el acoplamiento Rashba para huecos pesados. En el capítulo 5 se hará un tratamiento similar al del capítulo 4 para obtener el Hamiltoniano que describe el acoplamiento Rashba de huecos ligeros. En el capítulo 6 se discutirán los resultados obtenidos y se presentarán cálculos numéricos realizados con los Hamiltonianos obtenidos en los dos capítulos previos (4 y 5), para finalmente dar paso a las conclusiones del presente trabajo.

Capítulo 2

Teoría $k.p$

La herramienta fundamental para el desarrollo del presente trabajo de tesis es la teoría $k.p$ de masa efectiva; ésta es una teoría muy poderosa para analizar la estructura de bandas de un semiconductor cerca de un punto particular k_0 , especialmente cuando éste se encuentra cerca de un punto crítico (máximo o mínimo) de la estructura de bandas del semiconductor. Sin embargo, antes de dar paso a la descripción detallada del formalismo de la teoría $k.p$, es útil revisar primeramente algunos conceptos básicos tales como estructura de bandas en semiconductores y masa efectiva.

2.1 Física básica de semiconductores

Históricamente, los semiconductores fueron definidos como materiales con conductividades intermedias entre las de los metales y los aislantes, variando en un intervalo de 10^2 a 10^{-9} ($\Omega \text{ cm}$)⁻¹. Esta definición (enfaticada en el transporte electrónico), muestra que la conductividad en semiconductores puede ser variada en un amplio intervalo de once órdenes de magnitud. Sin embargo, tal definición no indica o explica los mecanismos que dan origen a este comportamiento. La definición formal de conductividad puede ser dada en términos de modelos clásicos o cuánticos de electrón libre, pero de una manera simple puede decirse que está determinada por la concentración y la movilidad de los portadores de carga (electrones o huecos) en el material.

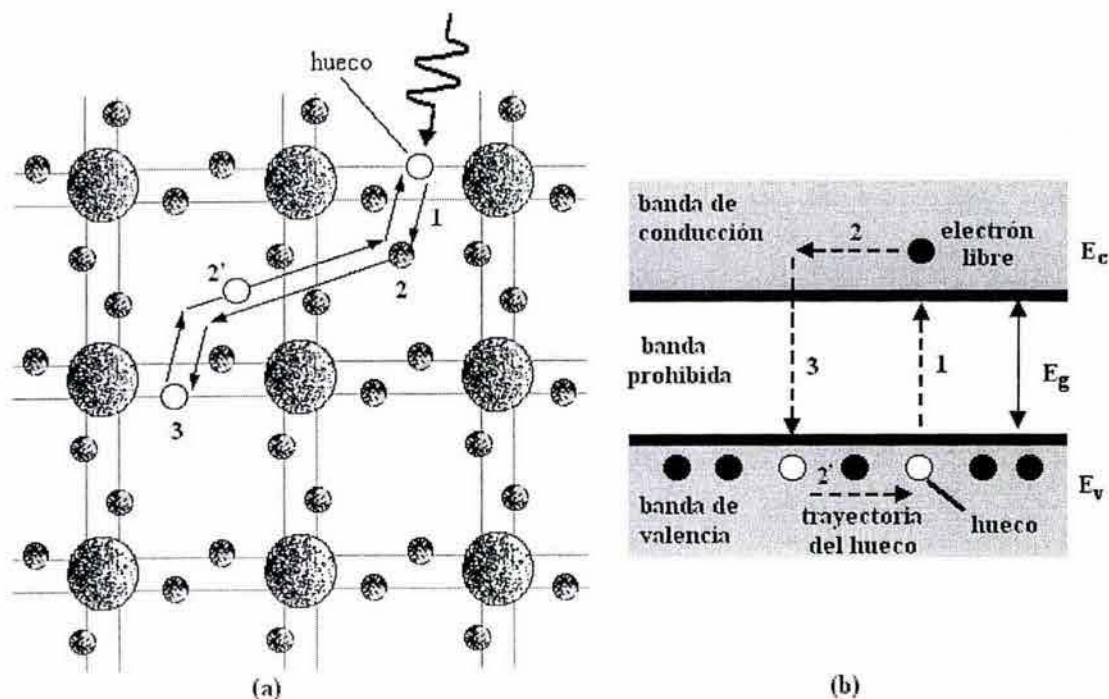


Figura 2.1 Modelo de enlace (a) y estructura de bandas de manera simple (b). Ref. [35]

Considérese la figura 2.1, donde se muestra un modelo simple de enlace (a), y un esquema simple de estructura de bandas (b). Todos los electrones de valencia, los cuales están “amarrados” mediante enlaces covalentes, son representados en la figura 2.1 (b) mediante la *banda de valencia*. A $T = 0$ K, en el diagrama de energía, todos los estados en la banda de valencia están ocupados y la banda de conducción esta completamente vacía. Entonces el semiconductor se comporta como aislante. Si alguna forma de energía (como fotones, fonones, etc.) es absorbida por los electrones, se rompe un enlace electrónico y el electrón se convierte en un portador de carga libre (transición 1), capaz de conducir corriente eléctrica (transición 2). El “hueco” dejado por el electrón es inmediatamente ocupado por otro electrón de valencia, y entonces tal hueco puede ser considerado como un portador de carga libre, pero con carga positiva, y también contribuye a la conductividad del semiconductor (transición 2’). Posteriormente el

electrón regresa a la banda de valencia y se recombina con otro hueco (transición 3) emitiendo un fotón. La diferencia de energía entre las bandas de valencia y de conducción, la zona prohibida, se conoce como brecha energética (*energy gap*, E_g) y es uno de los parámetros más importantes en semiconductores, ya que determina cuánta energía se requiere para generar portadores de carga a través de transiciones electrón-hueco de un semiconductor.

La estructura de bandas real de un semiconductor es más compleja que el esquema mostrado en la figura 2.1, debido a las propiedades ondulatorias de los electrones y a la periodicidad de la red cristalina del semiconductor (teorema de Bloch). La figura 2.2 muestra la estructura de bandas de *Si* y *GaAs*, semiconductores típicos ampliamente utilizados en la industria electrónica e investigación básica. El punto Γ

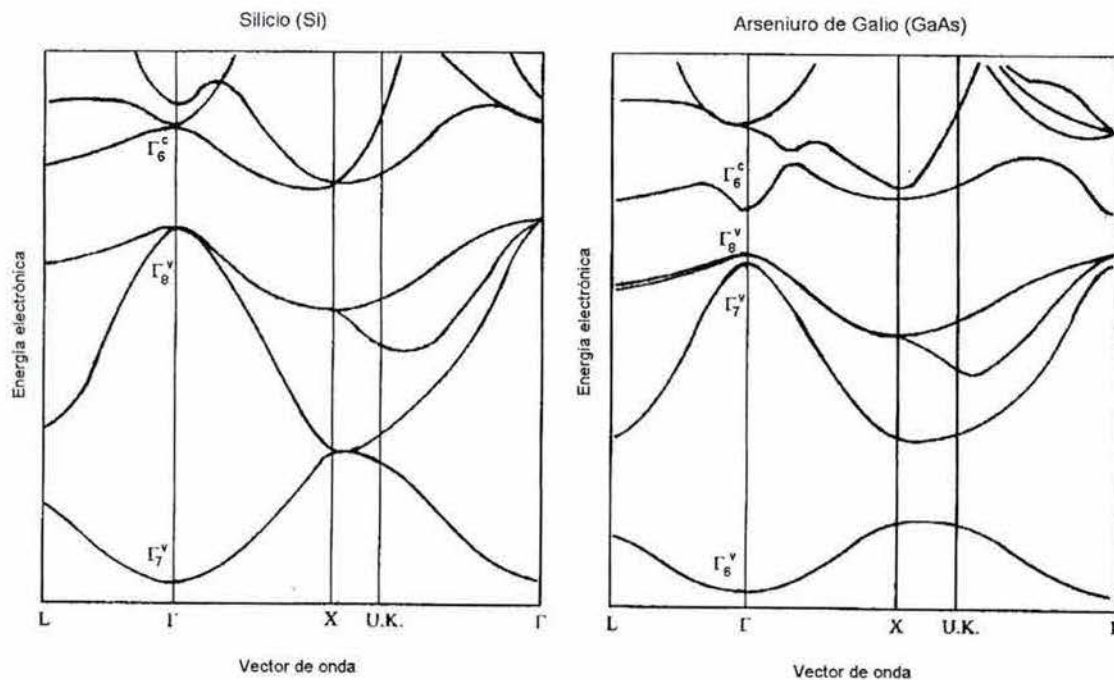


Figura 2.2 Estructura de bandas de Silicio y Arseniuro de Galio. Ref. [63]

define la zona central [000] (el origen en el espacio recíproco) y representa el punto con más alta simetría para ambos semiconductores, de estructura cristalina cúbica (diamante) y zinc-blenda respectivamente. En materiales zinc-blenda (*GaAs* en la figura 2.2), el punto Γ_6 corresponde a los estados de conducción; por debajo de éstos, separadas por la energía E_g , se ubica el punto Γ_8 de valencia, donde se encuentran degeneradas las bandas denominadas hueco ligero y hueco pesado respectivamente; el punto Γ_7 de valencia corresponde a la banda que se conoce como *split-off*. El punto L denota la frontera [111] y el punto X la frontera [100].

La brecha principal está dada por la menor diferencia en energía entre la banda de conducción y la banda de valencia (E_g). Cuando el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción coinciden en un eje de simetría (con una brecha finita), se dice que el semiconductor es de brecha directa, tal como sucede con el *GaAs* ($E_g = 1.52$ eV); caso contrario, se dice que es un semiconductor de brecha indirecta, como sucede con el Silicio ($E_g = 1.17$ eV).

La curvatura de las bandas cerca de los extremos ($\mathbf{k} = 0$ para el punto Γ) está relacionada con la *masa efectiva* (m^*) de los portadores de carga. La masa efectiva la podemos definir como

$$m^* = \left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)^{-1}$$

donde E es la dispersión electrónica del semiconductor. Esta propiedad describe la forma en que la interacción con la red cristalina afecta la dinámica de los portadores de carga. Por ejemplo, para los portadores de carga en el punto Γ_8 de valencia (en compuestos tipo zinc-blenda) se tienen dos bandas degeneradas. Una de ellas posee alta curvatura, es decir, tiene un valor grande de $\frac{d^2 E}{dk^2}$ y por tanto una masa efectiva pequeña en relación a la otra banda; de modo tal que dicha banda es llamada banda de *hueco ligero* y la que posee menor curvatura es la banda de *hueco pesado*. Tal como puede verse de los diagramas de banda, la masa efectiva es en general una propiedad anisotrópica (varía con la dirección) por lo que la definición general para la masa efectiva es:

$$\frac{1}{m_{\alpha,\beta}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_\alpha \partial k_\beta} \quad \alpha, \beta = x, y, z \quad (2.1)$$

Explicados ya estos conceptos básicos, es posible ahora describir en detalle la teoría $k.p$.

2.2 Teoría $k.p$: Generalidades

Para entender las propiedades opto-electrónicas y magneto-electrónicas de los semiconductores, resulta necesario conocer en detalle su estructura electrónica de bandas incluyendo su correspondiente función de onda, y la densidad de estados electrónicos. Existe una gran familia de métodos para el cálculo de la estructura de

bandas, tales como métodos de funciones de Green, método de amarre fuerte (tight binding), pseudopotenciales parametrizados, ondas planas ortogonalizadas, combinaciones lineales de orbitales atómicos (LCAO), entre otros. Cada uno de ellos puede brindar una descripción muy amplia de la estructura de bandas (y las funciones de onda) a lo largo de diferentes direcciones en el espacio recíproco. Estas metodologías, pueden incorporar explícitamente los efectos de muchos cuerpos tales como intercambio y correlación electrón-electrón; sin embargo, requieren de gran consumo de tiempo computacional, lo que limita en gran medida el número de átomos a simular en una red cristalina. Y aunque todos ellos involucran cálculos muy complejos y proporcionan resultados relativamente precisos, es difícil (y a veces imposible) obtener una idea clara de la física involucrada en el problema, convirtiéndose en una especie de “caja negra”. Más aun, como los resultados que se obtienen con estos métodos son puramente numéricos, no hay lugar para resultados o expresiones analíticas que revelen la importancia de los diferentes mecanismos físicos.

La teoría $k \cdot p$ resulta ser una metodología alterna a los diferentes tipos de cálculo numérico empleados para la obtención de la estructura de bandas. Es uno de los métodos más simples y poderosos para el cálculo del espectro de bandas de los portadores de carga (y su correspondiente función de onda) alrededor de un punto de alta simetría en el espacio recíproco. El hecho de que muchos semiconductores poseen brecha directa y de que las propiedades físicas de mayor interés ocurren cerca de los bordes de banda, hace al modelo muy apropiado, particularmente para el estudio de propiedades electrónicas y ópticas. Una de las cualidades más importantes de este método es que permite la

obtención de expresiones analíticas, por ejemplo, para las masas efectivas, los factores g de Landé y las relaciones de dispersión cerca de los puntos críticos (máximos o mínimos) del esquema de bandas. Además, los datos de “entrada” que se requieren pueden ser medidos experimentalmente, tal como las brechas y las intensidades de las transiciones electrón hueco. La teoría $k.p$ puede incorporar y tratar de forma relativamente simple e intuitiva, efectos de acoplamiento espín-órbita, interacciones de intercambio, estados de impurezas, esfuerzos, campos magnéticos y eléctricos etc., lo que lo convierte en una herramienta muy versátil para el estudio de propiedades ópticas y de transporte en sistemas mesoscópicos basados en semiconductores.

La teoría $k.p$ fue desarrollada por Bardeen [64] y Seitz [65] entre 1938 y 1940. Desde entonces, el método ha sido aplicado con gran éxito para el estudio de propiedades ópticas y electrónicas de semiconductores y heteroestructuras que, mediante cálculos de primeros principios (*ab initio*) serían simplemente intratables. Particularmente, existen dos modelos muy populares, debido a su gran efectividad y simplicidad. Uno de ellos es el modelo de Kane [66], el cual sólo toma en cuenta la banda de conducción y las tres bandas de valencia: hueco ligero, hueco pesado, y split off. El otro de ellos es el modelo de Luttinger-Kohn [67], que sólo considera las tres bandas de valencia, tomando en cuenta la degeneración que hay entre las bandas de hueco ligero y hueco pesado, además de incorporar la interacción de éstas con el resto mediante teoría de perturbaciones para estados degenerados (teoría de perturbaciones de Löwdin). Ambos modelos incorporan el acoplamiento espín-órbita dentro de la teoría $k.p$. En la figura 2.3 se puede ver una representación de los diferentes modelos existentes en la descripción de la estructura de

bandas de electrones y huecos; éstas van desde la simple aproximación parabólica (cuadro verde), hasta el modelo de ocho bandas de Pidgeon-Brown (PB) [68] (cuadro azul), pasando por el modelo de cuatro bandas (hueco ligero y hueco pesado; cuadro rojo) y el modelo de Luttinger-Kohn (LK) (cuadro café). La diferencia entre el modelo de Kane y el modelo de Pidgeon-Brown, es que éste último toma en cuenta la degeneración de las bandas de hueco pesado y hueco ligero en el punto Γ_8 , no así el modelo de Kane; es decir, el modelo PB es una extensión a ocho bandas del modelo LK

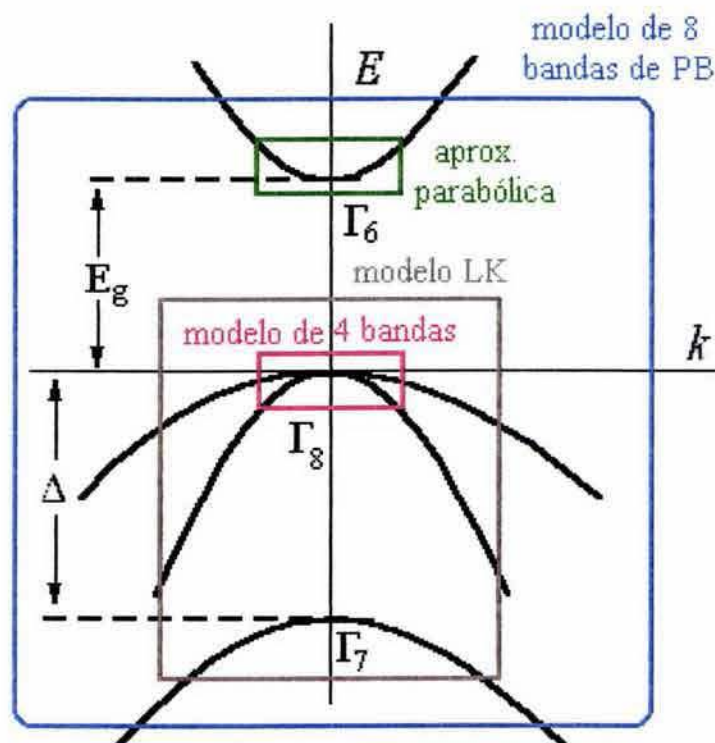


Figura 2.3 Estructura de bandas del bulto de un semiconductor típico de brecha directa con estructura tipo zinc-blenda y bordes de banda en el punto Γ de la zona de Brillouin. Los cuadros muestran la región de aplicabilidad de los diferentes modelos para el cálculo de las dispersiones de electrones y huecos. Ref. [69]

2.2.1 Teoría $\mathbf{k}, \mathbf{p}$: conceptos básicos

Considérese el bulto de un sólido semiconductor cristalino. Dentro de la aproximación de electrón independiente, la ecuación de Schrödinger para este sistema es:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (2.2)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico del cristal, $\frac{\hat{p}^2}{2m_0}$ es el operador de energía cinética, con $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, m_0 es la masa en reposo del electrón y $E_n(\mathbf{k})$ es la energía del n -ésimo estado con vector de onda $\mathbf{k}$ (dentro de la primera zona de Brillouin). Del teorema de Bloch, la función de onda $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de dicho sistema debe ser de la forma:

$$\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (2.3)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es una función que tienen la periodicidad del potencial cristalino $V(\mathbf{r})$. Si la expresión (2.3) se introduce explícitamente en (2.2), la ecuación de Schrödinger queda escrita en términos de las funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left[E_n(\mathbf{k}) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.4)$$

Note que aparece un término proporcional a $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}}$; este término da origen al nombre de la teoría. Para un valor dado de $\mathbf{k}$, el conjunto de todas las funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ forman un conjunto completo. Entonces, la ecuación (2.4) puede ser expandida cerca de un punto $\mathbf{k}_0$ de interés particular en la estructura de bandas, del cual se conozca el conjunto de funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Particularmente, cuando $\mathbf{k}_0 = 0$ se tiene:

$$H_0 u_{n0}(\mathbf{r}) = \left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n0}(\mathbf{r}) = E_n(0) u_{n0}(\mathbf{r}) , \quad (2.5)$$

Los términos adicionales a la ecuación (2.5) que resultan en la ecuación (2.4), pueden ser considerados como perturbaciones al sistema. Si se utiliza teoría de perturbaciones independiente del tiempo para estado no degenerados, en la ecuación (2.4), la energía a segundo orden en perturbación es explícitamente:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{|\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'}|^2}{E_n(0) - E_{n'}(0)} , \quad (2.6)$$

mientras que la función de onda (hasta primer orden en perturbación) estaría dada por $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ con

$$\begin{aligned} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= u_{n0}(\mathbf{r}) + \sum_{n' \neq n} \left[\frac{\hbar}{m_0} \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{n'n}}{E_n(0) - E_{n'}(0)} \right] u_{n'0}(\mathbf{r}) \\ &\equiv \sum_{n'} a_{n'} u_{n'0}(\mathbf{r}) , \end{aligned} \quad (2.7)$$

donde el elemento de matriz del operador de momento $\mathbf{p}_{nn'}$ está definido como

$$\mathbf{p}_{nn'} = \int_{\substack{\text{celda} \\ \text{unitaria}}} u_{n0}^*(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{p}} u_{n'0}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} \equiv \langle u_{n,0} | \hat{\mathbf{p}} | u_{n',0} \rangle, \quad (2.8)$$

y las funciones $u_{nk}(\mathbf{r})$ siguen la condición de ortonormalidad dada por,

$$\int_{\substack{\text{celda} \\ \text{unitaria}}} u_{n0}^*(\mathbf{r}) u_{n'0}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{nn'}, \quad (2.9)$$

Note que si $\mathbf{k}_0 = 0$ es un extremo de $E_n(\mathbf{k})$, entonces $E_n(\mathbf{k})$ debe depender cuadráticamente de $\mathbf{k}$ cerca de $\mathbf{k}_0$ y por simetría $\mathbf{p}_{nn} = 0$. Es por ello que resulta necesario ir a segundo orden en teoría de perturbaciones para la corrección de la energía y sólo a primer orden en la función de onda. Debido a que $\mathbf{k}_0$ se fijó (arbitrariamente) en cero, la ecuación (2.6) se puede reescribir como

$$E_n(\mathbf{k}) - E_n(0) = \sum_{\alpha,\beta} D^{\alpha,\beta} k_\alpha k_\beta = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{\alpha,\beta} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha,\beta} k_\alpha k_\beta \quad (2.10)$$

con

$$D^{\alpha,\beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \delta_{\alpha,\beta} + \frac{\hbar^2}{2m_0^2} \sum_{n' \neq n} \frac{P_{nn'}^\alpha P_{n'n}^\beta + P_{nn'}^\beta P_{n'n}^\alpha}{E_n(0) - E_{n'}(0)} = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{m^*} \right)_{\alpha,\beta} \quad (2.11)$$

donde $\alpha, \beta = x, y, z$. Nótese que la matriz $D^{\alpha, \beta}$ se ha definido de modo tal que es una matriz simétrica. La matriz $D^{\alpha, \beta}$ es el inverso de la masa efectiva en forma tensorial multiplicada por $\hbar^2/2$. Ésta expresión concuerda con la definición de masa efectiva dada en (2.1).

La expresión (2.10) es un tensor (de masa efectiva) genérico que incluye n bandas. Es posible hacer un tratamiento en el que sólo se tomen en cuenta unas cuantas bandas de interés, por ejemplo las bandas de conducción y de valencia, las cuales son las que normalmente determinan las propiedades de transporte de un material. Un análisis en el que únicamente se consideran éstas bandas se presenta en la siguiente sección.

2.2.2 Teoría $\mathbf{k}, \mathbf{p}$ para bandas múltiples no degeneradas.

Si sólo se consideran dos (o más) bandas no degeneradas pero fuertemente interactuantes entre ellas, a éstas les llamamos clase A y el resto (ver Apéndice B, sección B.1.2) las agrupamos en un conjunto llamado clase B (Figura 2.4 a). Para resolver la ecuación (2.4), se expande la solución de $u_{n\mathbf{k}}$ en términos de la solución en $\mathbf{k} = 0$, *i.e.* en términos de $u_{n0}(\mathbf{r})$, como sigue

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} a_{n'}(\mathbf{k}) u_{n'0}(\mathbf{r}), \quad (2.12)$$

Sustituyendo explícitamente $u_{nk}(\mathbf{r})$ en la ecuación (2.4), multiplicando por $u_{n'0}^*(\mathbf{r})$ por la izquierda, e integrando sobre una celda unitaria, se obtiene:

$$\sum_{n'} \left\{ \left[E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{nn'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right\} a_{n'} = E_n(\mathbf{k}) a_n, \quad (2.13)$$

donde se ha utilizado la definición de $\mathbf{p}_{nn'}$ dada en la ecuación (2.8) y relación de ortogonalidad (2.9), además de la ecuación (2.5).

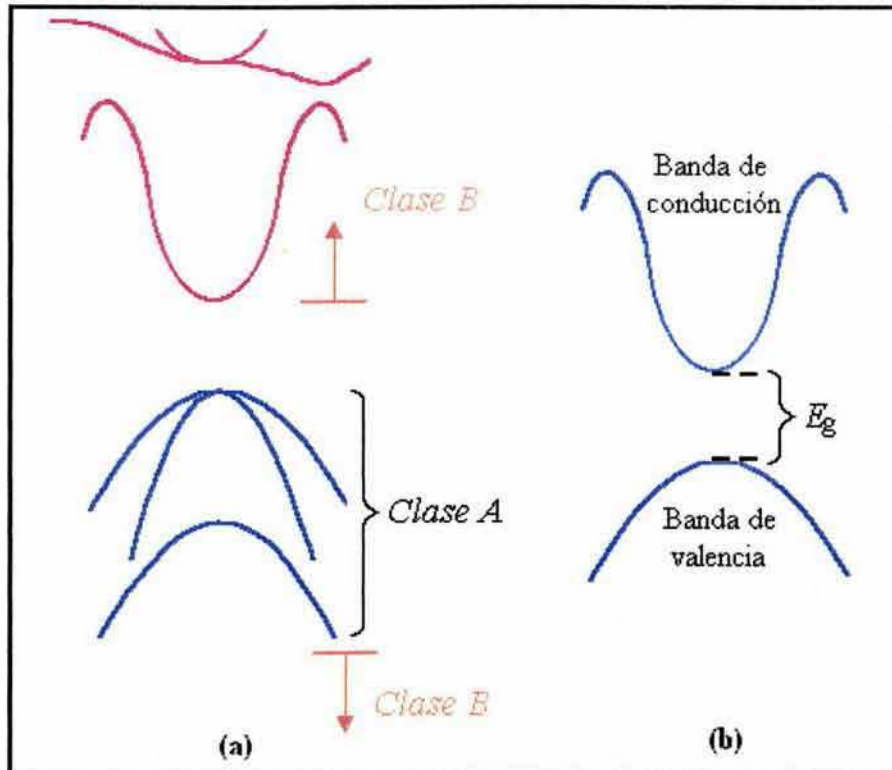


Figura 2.4 **a)** Representación esquemática de bandas fuertemente interactuantes entre sí (Clase A) y bandas que se consideran como perturbación (Clase B). **b)** Representación esquemática de dos bandas fuertemente interactuantes (banda de valencia y banda de conducción). Ref. [70]

2.2.2.1 Caso de dos bandas acopladas

Si sólo se consideran dos bandas acopladas (Figura 2.4 b), etiquetadas por los índices n y n' , la ecuación (2.13) es equivalente a resolver la ecuación de determinante:

$$\begin{vmatrix} E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E & \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} \\ \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{n'n} & E_{n'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E \end{vmatrix} = 0 \quad (2.14)$$

Sea ahora n el estado de valencia (bv) y n' el estado de conducción (bc) (Figura 2.4 b). Fijando la referencia en la energía de modo que $E_{bv}(0) = 0$, y $E_{bc}(0) = E_g$, y suponiendo que el material tiene simetría cúbica (*i.e.* $p_{bc,bv} = p_{bv,bc} \equiv P$), el determinante en (2.14) (con $\mathbf{k} = (0, 0, k)$) se convierte en:

$$\begin{vmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E & \frac{\hbar}{m_0} kP \\ \frac{\hbar}{m_0} kP & E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - E \end{vmatrix} = 0 ,$$

donde $P = \langle u_{bc} | \hat{p}_z | u_{bv} \rangle$. Resolviendo el determinante para encontrar el valor de la dispersión E se obtiene:

$$E = \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \pm \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \frac{\hbar^2 k^2 P^2}{m_0^2}} ,$$

Para valores pequeños de $\mathbf{k}$:

$$E_{vb}(\mathbf{k}) \approx \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left[1 - \frac{2P^2}{m_0 E_g} \right] \quad \text{y} \quad E_{bc}(\mathbf{k}) \approx E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left[1 + \frac{2P^2}{m_0 E_g} \right]$$

Por lo tanto, las masas efectivas $\left(\frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2} \right)$ son respectivamente,

$$\left(\frac{m_0}{m^*} \right)_{bv} = 1 - \frac{2P^2}{m_0 E_g} \quad \text{y} \quad \left(\frac{m_0}{m^*} \right)_{bc} = 1 + \frac{2P^2}{m_0 E_g},$$

donde el valor de P puede ser obtenido experimentalmente. Para semiconductores típicos, $P^2/m_0 \approx 20 \text{ eV}$ y E_g es del orden de 1 eV , por lo que $2P^2/m_0 E_g \gg 1$. Entonces se puede hacer la aproximación

$$\left(\frac{m_0}{m^*} \right)_{bc} \approx \frac{2P^2}{m_0 E_g} \quad \text{y} \quad \left(\frac{m_0}{m^*} \right)_{bv} \approx -\frac{2P^2}{m_0 E_g}$$

Nótese que las últimas expresiones predicen correctamente los signos de las masas efectivas. Nótese también que la masa efectiva resulta casi proporcional a la brecha (E_g). Este resultado es muy útil, ya que si se conoce el valor experimental de E_g de dos materiales y el valor de la masa efectiva de uno de ellos, la masa efectiva del otro semiconductor puede ser calculada directamente mediante la relación

$$\frac{m_{bc,II}^{ef}}{m_{bc,I}^{ef}} = \frac{E_g^{II}}{E_g^I} ,$$

Por ejemplo, para el caso de $GaAs$, $E_g^{GaAs} = 1.424 \text{ eV}$ y $m_{bc,GaAs}^* = 0.067$, mientras que para $AlAs$, $E_g^{AlAs} = 3.03 \text{ eV}$. Utilizando la relación anterior se obtiene $m_{bc,AlAs}^* = 0.14$, mientras que el valor experimental es $m_{bc,AlAs}^* = 0.15$, valor con extraordinaria precisión, tomando en cuenta las aproximaciones involucradas. Esto nos ofrece un excelente ejemplo de lo poderosa que resulta ser la teoría $\mathbf{k.p}$ de masa efectiva.

2.3 Teoría $\mathbf{k.p}$ con interacción espín-órbita: Modelo de Kane

La interacción espín-órbita es incorporada al método $\mathbf{k.p}$ en el modelo de Kane para semiconductores de brecha energética directa [66]. Las bandas de conducción, de hueco ligero, de hueco pesado y de “split-off” son consideradas, cada una con doble degeneración debido al espín.

El Hamiltoniano total cerca de la zona $\mathbf{k}_0 = 0$ es

$$H = H_0 + H_{SO} , \quad (2.15)$$

con

$$H_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) \quad (2.16)$$

y el Hamiltoniano que describe el acoplamiento espín-órbita está dado por

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} \quad (2.17)$$

donde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$. La expresión (2.17) para la interacción espín-órbita, es la forma genérica, la cual se deduce de la ecuación de Dirac al considerar efectos relativistas hasta orden $(v/c)^2$ (v es la velocidad de la partícula y c es la velocidad de la luz). En (2.16) y (2.17), $V(\mathbf{r})$ representa el potencial cristalino del semiconductor. Note que para un cristal con ausencia de simetría de inversión, en general $\nabla V(\mathbf{r}) \neq 0$. Por tanto, en todos los semiconductores con estructura cristalina zinc-blenda se presentará una contribución finita a la energía proveniente del acoplamiento espín-órbita. En materiales con simetría de inversión (cúbicos) con estructura tipo diamante (como el Silicio), el acoplamiento espín-órbita no se manifiesta. Por último, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de Pauli con componentes:

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} \quad \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

los cuales, al operar sobre los espinores,

$$|\uparrow\rangle \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad y \quad |\downarrow\rangle \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

producen

$$\sigma_x |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle, \quad \sigma_y |\uparrow\rangle = i|\downarrow\rangle, \quad \sigma_z |\uparrow\rangle = |\uparrow\rangle,$$

$$\sigma_x |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma_y |\downarrow\rangle = -i|\uparrow\rangle, \quad \sigma_z |\downarrow\rangle = -|\downarrow\rangle.$$

Al agregar el acoplamiento espín-órbita a la ecuación de Schrödinger se tiene

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_n(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

Ahora, si la expresión (2.3) ($\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$) se introduce explícitamente en

(2.18), nuevamente se obtiene una ecuación en términos de las funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$:

$$\left\{ \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma} + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \mathbf{k}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E'_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.19)$$

donde $E'_n(\mathbf{k}) = E_n(\mathbf{k}) - \hbar^2 k^2 / 2m_0$. El último término en el lado izquierdo de la ecuación (2.19) es una interacción espín-órbita dependiente de $\mathbf{k}$, que resulta ser despreciable comparada con los otros términos, debido a que el momento $\hbar\mathbf{k}$ del cristal es muy pequeño comparado con el momento $\mathbf{p}$ en el interior del átomo, donde la mayoría de las

interacciones espín-órbita ocurren [70]. Por lo que sólo los primeros cuatro términos son considerados en los cálculos subsecuentes, esto es

$$Hu_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \cong \left\{ H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma} \right\} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E'_n(\mathbf{k}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.20)$$

2.3.1 Funciones base y la matriz Hamiltoniana de Kane

El objetivo es encontrar los eigenvalores E' en (2.20) con la correspondiente eigenfunción

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} a_{n'}(\mathbf{k}) u_{n'\mathbf{0}}(\mathbf{r})$$

Las funciones de borde de banda $u_{n\mathbf{0}}(\mathbf{r})$ son

Para la banda de conducción: $|S \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle$ con correspondiente eigenenergía E_s ,

donde $S = S(r)$ es una función con simetría esférica.

Para la banda de valencia: $|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$ con eigenenergía E_p , donde $X = xf(r)$, $Y = yf(r)$, $Z = zf(r)$ y $f(r)$ es una función de la coordenada r .

Las funciones de onda en cada banda están degeneradas respecto a H_0 , es decir:

$$H_0|S \uparrow\rangle = E_s|S \uparrow\rangle, \quad H_0|S \downarrow\rangle = E_s|S \downarrow\rangle, \quad H_0|X \uparrow\rangle = E_p|X \uparrow\rangle, \quad H_0|Y \uparrow\rangle = E_p|Y \uparrow\rangle, \\ H_0|Z \uparrow\rangle = E_p|Z \uparrow\rangle, \text{ etc. Resulta conveniente escoger las funciones base [66]}$$

$$|iS \downarrow\rangle, \quad \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle, \quad |Z \downarrow\rangle, \quad \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle, \quad (2.21)$$

$$|iS \uparrow\rangle, \quad \left| -\frac{X+iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle, \quad |Z \uparrow\rangle, \quad \left| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \downarrow \right\rangle,$$

donde las funciones base de valencia son tomadas de los armónicos esféricos $\mathcal{Y}_{1,0}=|Z\rangle$ y

$$\mathcal{Y}_{1,\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} |(X \pm iY)\rangle, \text{ para las funciones de onda de los estados } p \text{ del átomo de}$$

Hidrógeno. La razón de esta elección es porque se espera que la función de onda electrónica sea tipo p (*i.e.* $l=1$) cerca de la parte alta de la banda de valencia y tipo s ($l=0$) cerca del fondo de la banda de conducción, lo cual es verificado mediante cálculos de primeros principios o utilizando teoría de grupos. Al calcular los elementos de la matriz de interacción (ver Apéndice B, sección B.1.1), se obtiene una matriz de 8×8 diagonalizada en bloques:

$$H_{8 \times 8} = \begin{bmatrix} \mathbf{H} & 0 \\ 0 & \mathbf{H} \end{bmatrix}$$

con

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} E_s & 0 & kP & 0 \\ 0 & E_p - \frac{\Delta}{3} & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 \\ kP & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & E_p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_p + \frac{\Delta}{3} \end{bmatrix} \quad (2.22)$$

donde se ha asumido $\mathbf{k} = (0, 0, k)$ y donde el parámetro de Kane P y la energía de desdoblamiento de espín Δ están definidos como

$$P \equiv \frac{\hbar}{m_0} \langle iS | \hat{p}_z | Z \rangle, \quad (2.23)$$

$$\Delta \equiv \frac{3\hbar i}{4m_0^2 c^2} \langle X | \frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x | Y \rangle \quad (2.24)$$

2.3.2 Soluciones para los eigenvalores y las eigenfunciones de la matriz de interacción.

Definiendo la energía de referencia tal que $E_p = -\Delta/3$, y $E_s = E_g$, donde E_g es la brecha energética, el Hamiltoniano (2.22) se convierte en:

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} E_g & 0 & kP & 0 \\ 0 & -\frac{2\Delta}{3} & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & 0 \\ kP & \frac{\sqrt{2}\Delta}{3} & -\frac{\Delta}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.25)$$

Al resolver la ecuación $\det[\mathbf{H} - E'\mathbf{I}] = 0$ se obtienen 4 eigenvalores para E' , junto con 4 eigenvectores con doble degeneración (figura 2.5), los cuales, comenzando del nivel de energía más alto y utilizando la notación¹ $|J, J_z\rangle$ con $J = l + s$ y $J_z = m_l + m_s$, son respectivamente:

- **Banda de Conducción**

Dispersión

$$E_c(k) = E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{k^2 P^2 (E_g + \frac{2}{3}\Delta)}{E_g (E_g + \Delta)} \quad \left(\equiv E_g + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^{ef}} \right)$$

Eigenvectores (2.26)

$$\begin{aligned} \phi_{c,\alpha} &= |iS \downarrow\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \\ \phi_{c,\beta} &= |iS \uparrow\rangle \equiv \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \end{aligned}$$

- **Banda de Valencia**

Huecos pesados

Dispersión

$$E_{hp}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

¹ Con $l = 0, 1$ y $s = 1/2$; $-1 \leq m_l \leq 1$ y $m_s = \pm 1/2$

Eigenvectores

$$\begin{aligned}\phi_{hp,\alpha} &= -\frac{1}{\sqrt{2}}|(X+iY)\uparrow\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle \\ \phi_{hp,\beta} &= \frac{1}{\sqrt{2}}|(X-iY)\downarrow\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\right\rangle\end{aligned}\tag{2.27}$$

Huecos ligeros

Dispersión

$$E_{lh}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{2k^2 P^2}{3E_g} \quad \left(\equiv -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hl}^{ef}} \right)$$

Eigenvectores

$$\begin{aligned}\phi_{hl,\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{6}}|(X-iY)\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|Z\downarrow\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ \phi_{hl,\beta} &= -\frac{1}{\sqrt{6}}|(X+iY)\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|Z\uparrow\rangle \equiv \left|\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}\tag{2.28}$$

split off

Dispersión

$$E_{so}(k) = -\Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} - \frac{k^2 P^2}{3(E_g + \Delta)} \quad \left(\equiv -\Delta - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{so}^{ef}} \right)$$

Eigenvectores

$$\begin{aligned}\phi_{so,\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{3}}|(X-iY)\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}|Z\downarrow\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \\ \phi_{so,\beta} &= \frac{1}{\sqrt{3}}|(X+iY)\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}|Z\uparrow\rangle \equiv \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\end{aligned}\tag{2.29}$$

Estos resultados no están completos, ya que los efectos de bandas con mayor energía no han sido incluidos.

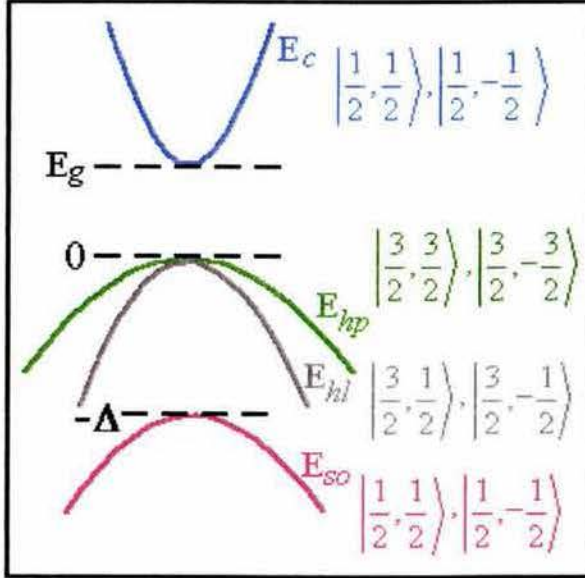


Figura 2.5 Energías en los bordes de las bandas E_g , 0 , 0 y $-\Delta$ para las bandas de conducción (E_c), hueco pesado (E_{hp}), hueco ligero (E_{hl}) y split-off (E_{so}) con sus correspondientes funciones de borde $u_{nk}(\mathbf{r})$. La notación utilizada para la base del Hamiltoniano que describe tales dispersiones es $|J, J_z\rangle$ con $J = l + s$ y $J_z = m_l + m_s$.

2.4 El método $k.p$ para bandas degeneradas: Modelo de Luttinger-Kohn

Supóngase que se está interesado sólo en las seis bandas de valencia (hueco pesado, hueco ligero y split-off, cada una de ellas con doble degeneración debido al espín). Resulta entonces conveniente utilizar teoría de perturbaciones de Löwdin, incorporando las seis bandas de valencia dentro de la clase A , e incorporando el resto en la clase B (ver Apéndice B, sección B.1.2) como perturbación (refiérase a la Figura 2.4 a). A este modelo se le conoce como modelo de Luttinger-Kohn, y al igual que el modelo de Kane, también incorpora el término genérico de acoplamiento espín-órbita en el Hamiltoniano, pero a diferencia de éste, el modelo de Luttinger-Kohn considera la degeneración existente el punto Γ ($\mathbf{k} = 0$) entre las bandas de hueco ligero y hueco pesado

y las trata utilizando teoría de perturbaciones, a segundo orden, para estados degenerados (teoría de Löwdin).

2.4.1 El Hamiltoniano y las funciones base en el modelo de Luttinger-Kohn

Considérese una vez más la ecuación de Schrödinger (2.15) que, al reescribirla en términos de las funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ y hacer ciertas aproximaciones se reduce en la ecuación (2.20). Expandimos las funciones $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en dos subconjuntos de la forma

$$u_{n\mathbf{k}} = \sum_{j'}^A a_{j'}(\mathbf{k}) u_{j'0}(\mathbf{r}) + \sum_{\gamma}^B a_{\gamma}(\mathbf{k}) u_{\gamma 0}(\mathbf{r}) \quad (2.30)$$

donde j' está en la clase A y γ en la clase B . Utilizando los resultados obtenidos en la sección anterior, el conjunto de funciones en la clase A son:

$$\begin{aligned} u_{1,0} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\ u_{2,0} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\ u_{3,0} &= \left| \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} |(X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow\rangle \\ u_{4,0} &= \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \uparrow\rangle \\ u_{5,0} &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X - iY) \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \downarrow\rangle \\ u_{6,0} &= \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} |(X + iY) \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}} |Z \uparrow\rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

En $\mathbf{k} = 0$, las funciones de borde de banda (2.31) satisfacen

$$H(\mathbf{k} = 0)u_{j0}(\mathbf{r}) = E_j(0)u_{j0}(\mathbf{r})$$

donde

$$E_j(0) = 0 \quad \text{para } j = 1, 2, 3, 4$$

$$E_j(0) = -\Delta \quad \text{para } j = 5, 6$$

2.4.2 Soluciones del Hamiltoniano utilizando teoría de perturbaciones de

Löwdin

Con el método de Löwdin, la eigenecuación a resolver es

$$\sum_{j'}^A (U_{jj'}^A - E \delta_{jj'}) a_{j'}(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.32)$$

donde

$$U_{jj'}^A = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H_{j\gamma} H_{\gamma j'}}{E_0 - E_\gamma} = H_{jj'} + \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \frac{H'_{j\gamma} H'_{\gamma j'}}{E_d - E_\gamma} \quad (2.33)$$

$$H_{jj'} = \langle u_{j0} | H | u_{j'0} \rangle = \left[E_{j'}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} \quad (j, j' \in A) \quad (2.34)$$

$$H'_{j\gamma} = \langle u_{j0} | \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} | u_{\gamma 0} \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\hbar k_{\alpha}}{m_0} p_{j\gamma}^{\alpha} \quad (j \in A, \gamma \notin A) \quad (2.35)$$

y E_d es la energía del estado degenerado. Puede notarse que $p_{jj'} = 0$ para $j, j' \in A$ (ver Apéndice B, sección B.1.2). Además, debido a que las funciones u_j son soluciones del Hamiltoniano (2.15) y $j' \neq \gamma$ entonces $H_{j\gamma} = H'_{j\gamma}$. Por tanto obtenemos

$$U_{jj'}^A = \left[E_j + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_{\alpha} k_{\beta} p_{j\gamma}^{\alpha} p_{\gamma j'}^{\beta}}{E_d - E_{\gamma}} \quad (2.36)$$

Sea $U_{jj'}^A \equiv D_{jj'}$. De este modo se obtiene la matriz de la forma $D_{jj'}$

$$D_{jj'} = E_j(0) \delta_{jj'} + \sum_{\alpha, \beta} D_{jj'}^{\alpha, \beta} k_{\alpha} k_{\beta} \quad (2.37)$$

donde $D_{jj'}^{\alpha, \beta}$ queda definida como

$$D_{jj'}^{\alpha, \beta} = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\delta_{jj'} \delta_{\alpha\beta} + \sum_{\gamma} \frac{p_{j\gamma}^{\alpha} p_{\gamma j'}^{\beta} + p_{j\gamma}^{\beta} p_{\gamma j'}^{\alpha}}{m_0 (E_d - E_{\gamma})} \right] \quad (2.38)$$

la cual es similar a (2.11), con la diferencia de que (2.38) se ha generalizado con el fin de incluir bandas degeneradas.

2.4.3 Expresiones explícitas para la matriz de Luttinger-Kohn

Con el objetivo de escribir explícitamente los elementos de la matriz $U_{jj'}^A$, definimos

$$\begin{aligned} A_0 &= \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{P_{X\gamma}^x P_{\gamma X}^x}{E_d - E_{\gamma}} \\ B_0 &= \frac{\hbar^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{P_{X\gamma}^y P_{\gamma X}^y}{E_d - E_{\gamma}} \\ C_0 &= \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma}^B \frac{P_{X\gamma}^x P_{\gamma Y}^y + P_{X\gamma}^y P_{\gamma Y}^x}{E_d - E_{\gamma}} \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde

$$p_{\Omega\gamma}^{\alpha} = \langle \Omega | p_{\alpha} | \gamma \rangle \quad \text{con } \alpha = x, y, z ; \quad |\Omega\rangle = |X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$$

además de los parámetros conocidos en la literatura como parámetros de Luttinger γ_1^L ,

γ_2^L y γ_3^L , y están dados por

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1^L &= \frac{1}{3} (A_0 + 2B_0) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2^L &= \frac{1}{6} (A_0 - 2B_0) \\ -\frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3^L &= \frac{1}{3} C_0 \end{aligned} \quad (2.40)$$

Así pues, utilizando la base (2.31) obtenemos el Hamiltoniano de Luttinger-Kohn

$$\overline{\mathbf{H}}^{LK} = \overline{\mathbf{D}} \quad (\text{ver Apéndice B, sección B.1.2})$$

$$\bar{\mathbf{H}}^{LK} = \begin{bmatrix} Q+R & -T & S & 0 & -T/\sqrt{2} & \sqrt{2}S \\ -T^+ & Q-R & 0 & S & -\sqrt{2} & R \\ S^+ & 0 & Q-R & T & \sqrt{3/2} & T^+ \\ 0 & S^+ & T^+ & Q+R & -\sqrt{2}S^+ & -T^+/\sqrt{2} \\ -T^+/\sqrt{2} & -\sqrt{2} & R^+ & \sqrt{3/2} & T & -\sqrt{2}S \\ \sqrt{2}S^+ & \sqrt{3/2} & T^+ & \sqrt{2} & R^+ & -T/\sqrt{2} \\ & & & & & Q+\Delta \\ & & & & & 0 \end{bmatrix} \quad (2.41)$$

con las definiciones

$$\begin{aligned} Q &= \frac{\hbar^2 \gamma_1^L}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2), & R &= \frac{\hbar^2 \gamma_2^L}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2 - 2k_z^2), \\ S &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\sqrt{3} \gamma_2^L (k_x^2 - k_y^2) + i2\sqrt{3} \gamma_3^L k_x k_y \right], & T &= \frac{\hbar^2 \gamma_3^L}{m_0} \sqrt{3} (k_x - ik_y) k_z. \end{aligned} \quad (2.42)$$

donde el superíndice (+) denota adjunto.

Para obtener las relaciones de dispersión de las 3 bandas (hueco pesado, hueco ligero y split-off), se obtienen los eigenvalores de la matriz $\bar{\mathbf{H}}^{LK}$, similarmente como se hizo en la sección 2.3.2

Capítulo 3

Acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras

Uno de los puntos de partida que nos llevaron al desarrollo de la teoría $k.p$ en el capítulo anterior, es el hecho de que para una partícula cargada e inmersa en un potencial periódico, la función de onda es una función de Bloch. Sin embargo, en una heteroestructura se rompe la simetría cristalina y por tanto la función de onda debe ser diferente de una función de Bloch. Para resolver el problema, se utiliza la *aproximación de la función envolvente*. Dentro de esta aproximación, la función de onda Ψ se expande en una combinación lineal de funciones $u(\mathbf{r})$ (parte periódica de la función de Bloch) ortogonales, multiplicadas por la función envolvente $\chi_j(\mathbf{r})$ respectiva a cada banda. Esto da lugar a un sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, con tantas ecuaciones como el número de bandas que se deseen incluir para el estudio de la heteroestructura. Para estudiar alguna banda en particular, el sistema de ecuaciones se desacopla en favor de dicha banda, es decir, el sistema se proyecta hacia la banda de interés particular.

En el presente capítulo, se dará una introducción a la física de heteroestructuras semiconductoras (sección 3.1), para luego dar paso a la descripción de la aproximación de la función envolvente (sección 3.2) la cual, junto con el formalismo $k.p$, será utilizada para el estudio del acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras dentro de los modelos de Kane y Luttinger-Kohn extendido, partiendo del modelo físico presentado en la sección 3.3.

3.1 Física básica de Heteroestructuras semiconductoras.

Como ya se ha comentado, las técnicas de crecimiento de películas delgadas, tales como epitaxia de haces moleculares (MBE) y deposición química de vapores metal orgánicos (MOCVD), han hecho posible la construcción de heteroestructuras, compuestas por capas de dos diferentes semiconductores tan delgadas como una monocapa atómica. Al modelar dichas heteroestructuras, resulta común representar tal interfaz ideal en términos de bordes de banda dependientes de la posición. En el esquema mostrado en la figura 3.1 se muestra una heteroestructura donde la dirección de crecimiento se ha ubicado paralela al eje z . En esto se indica que para $z < 0$ un electrón experimenta un potencial idéntico al potencial cristalino de un bulto perfecto de un material I, mientras que para $z > 0$, un electrón experimenta un potencial idéntico al potencial de un bulto perfecto de un material II. Por supuesto, este es un esquema idealizado, y su precisión depende de diversos factores. Por un lado, las constantes de red varían entre un material y otro, produciendo que las posiciones atómicas de los materiales queden desfasadas entre sí (lattice mismatch). Por otro lado, en la figura 3.1 se asume un crecimiento bidimensional perfecto (monocapa sobre monocapa), el cual en la práctica es difícil de lograr y por tal razón la ubicación de la interfaz a lo largo del eje z puede cambiar conforme varían las coordenadas x y y . En la práctica se asume una interfaz con un grosor finito (se abandona la idea de una interfase con un grosor infinitesimalmente pequeño) con el fin de tomar en cuenta el efecto antes mencionado. Afortunadamente, una gran cantidad de estados electrónicos difícilmente experimentan las interfases, ya que poseen pequeñas amplitudes de probabilidad de encontrarse en

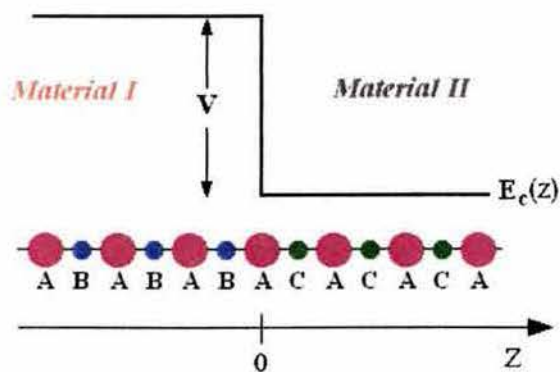


Figura 3.1 Esquema unidimensional de una heteroestructura formada entre dos semiconductores perfectamente crecidos con fórmula química AB (material I) y AC (material II). En la parte superior se presentan los bordes de la banda de conducción y en la parte inferior se esquematiza los enlaces entre los átomos de los dos materiales. Nótese la formación de enlaces híbridos B-A-C en la interfase. Ref [71]

esa región, por lo que en una primera aproximación, se puede mantener la noción matemática de interfases abruptas [71].

Cabe mencionar que es posible aumentar la cantidad de portadores de carga (electrones o huecos) en la heteroestructura, mediante el dopaje de los semiconductores que la conforman. Con el fin de que los portadores no sean dispersados por los donadores o aceptores que los liberaron, se emplea el *dopaje modulado*, el cual consiste en dopar sólo uno de los materiales que conforman la heteroestructura, aquél que posea la brecha más grande. Subsecuentemente los portadores migrarán al segundo material, creándose un campo eléctrico en la interfaz por el desequilibrio de cargas, y con ello un pozo de potencial asimétrico que confina a los portadores de carga en la dirección de crecimiento de la heteroestructura. De esta manera, los portadores de carga se mantienen libres en el plano de la interfaz, creándose así un gas de electrones bidimensionales, tal y como fue descrito en la introducción del presente trabajo de tesis (sección 1.6).

3.2 Aproximación de la función envolvente

La aproximación de la función envolvente resulta muy útil en el estudio de los estados electrónicos en heteroestructuras semiconductoras, ya que dentro del espíritu de la teoría $k.p$, es posible obtener resultados analíticos que proveen una descripción de la física relevante involucrada en el problema, convirtiéndolo en un método muy poderoso, tal y como se demostrará más adelante.

Considérese una heteroestructura formada por los materiales I y II. Supóngase que las posiciones atómicas entre uno y otro material no se encuentran desfasadas, es decir, que ambos materiales poseen las mismas constantes de red y la misma estructura. En el modelo de la función envolvente se toman en cuenta las siguientes consideraciones:

- Dentro de cada capa, la función de onda es expandida en términos de la función envolvente $\chi_j(\mathbf{r})$ multiplicada por la parte periódica de la función de Bloch del material en consideración, esto es

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \chi_j^I(\mathbf{r}) u_{j,\mathbf{k}_0}^I(\mathbf{r}) , \quad (3.1)$$

si $\mathbf{r}$ corresponde a la capa I y

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \chi_j^{II}(\mathbf{r}) u_{j,\mathbf{k}_0}^{II}(\mathbf{r}) , \quad (3.2)$$

si $\mathbf{r}$ corresponde a la capa II. En las ecuaciones (3.1, 3.2), $\mathbf{k}_0$ es el punto en la zona de Brillouin alrededor del cual los estados de la heteroestructura son construidos. La sumatoria sobre j corre sobre todas las bandas incluídas en el análisis.

- Se asume que las partes periódicas de las función de Bloch son iguales en cada tipo de capa que constituye la heteroestructura:

$$u_{j,\mathbf{k}_0}^{\text{I}}(\mathbf{r}) \equiv u_{j,\mathbf{k}_0}^{\text{II}}(\mathbf{r}) , \quad (3.3)$$

Por tanto, la función de onda de la heteroestructura puede escribirse de la siguiente forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \chi_j^{\text{I,II}}(\mathbf{r}) u_{j,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) , \quad (3.4)$$

y el objetivo será entonces determinar la forma explícita de las funciones envolventes $\chi_j^{\text{I,II}}(\mathbf{r})$.

El suponer que la parte periódica de las funciones de Bloch son idénticas en ambos materiales, implica entonces que los elementos de matriz intersubbanda $\langle S | p_x | X \rangle$ son iguales en las capas I y II, lo cual es una excelente aproximación para heteroestructuras III-V y II-VI [71].

Ahora, sea el plano $z = z_0$ la interfaz que separa las capas I y II (asumiendo que el eje de crecimiento de la heteroestructura es paralelo al eje z). Ya que las funciones u_{j,k_0} son linealmente independientes y debido a que $\psi(\mathbf{r})$ debe ser continua en $z = z_0$, esto nos conduce a que

$$\chi_j^I(\mathbf{r}_\perp, z_0) = \chi_j^{II}(\mathbf{r}_\perp, z_0) , \quad (3.5)$$

donde $\mathbf{r}_\perp$ es un vector de posición bidimensional ubicado en el plano x - y . Debido a que se supuso que las constantes de red de los materiales I y II son muy similares (o iguales), la heteroestructura se vuelve traslacionalmente invariante en el plano de las capas (x - y). Por tanto, las funciones χ_j 's pueden factorizarse en:

$$\begin{aligned} \chi_j^I(\mathbf{r}_\perp, z) &= e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_j^I(z) , \\ \chi_j^{II}(\mathbf{r}_\perp, z) &= e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_j^{II}(z) , \end{aligned}$$

o en forma compacta

$$\chi_j^{I,II}(\mathbf{r}_\perp, z) = e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_j^{I,II}(z) \quad (3.6)$$

donde $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$ es un vector de onda bidimensional, el cual es el mismo en ambos materiales (I y II) con el fin de obedecer la invarianza traslacional en el plano (x - y).

3.3 Estudio de acoplamiento Rashba en heteroestructuras

Como hemos venido mencionando, el acoplamiento espín-órbita de Rashba es uno de los mecanismos más activamente estudiados en espintrónica en la actualidad, ya que, además de ser el fenómeno propuesto para la creación de un transistor de efecto de campo de espín (Datta-Das, 1990), da origen al efecto Hall de espín intrínseco, recientemente descubierto experimentalmente por dos grupos independientemente (Kato et al., 2004; Wunderlich et al., 2005). El objetivo del presente trabajo de tesis, es el obtener expresiones analíticas para los Hamiltonianos de acoplamiento Rashba para huecos. En esta sección se describirá el modelo físico a estudiar, y en las secciones siguientes, utilizando teoría $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ dentro de la aproximación de la función envolvente, se obtendrán los tensores de masa efectiva dentro de los modelos de Kane y Luttinger-Kohn (extendido), de los cuales en los capítulos 4 y 5, se extraerán las expresiones para los Hamiltonianos de Rashba para huecos. El procedimiento a seguir es una generalización (para el caso de huecos) del método utilizado por de Andrada et al. [39], donde obtiene una expresión analítica para la constante de acoplamiento de Rashba de electrones, α_R .

Considérese una heteroestructura formada por semiconductores III-V tipo zinc-blenda, con dopaje modulado. En la interfaz se forma un sistema quasi-bidimensional de portadores de carga, confinados en la dirección de crecimiento, pero libres en el plano perpendicular a la dirección de confinamiento (figura 3.2). Supóngase que la concentración de portadores de carga es tal, que sólo la subbanda energética más baja

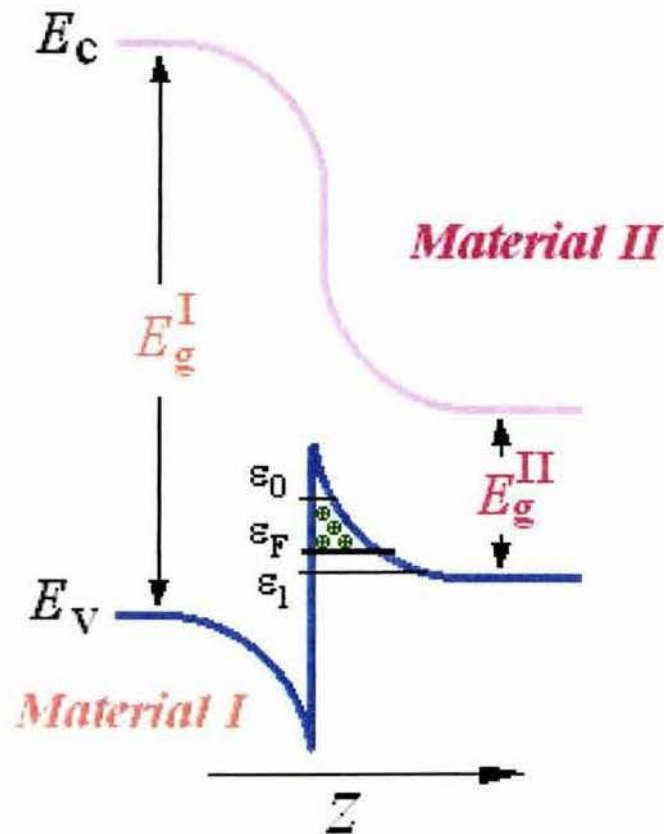


Figura 3.2 Esquema de bandas para una heteroestructura con confinamiento en la banda de valencia. La energía de Fermi es tal que sólo hay ocupación en el estado base. La dirección de crecimiento se ha orientado paralela al eje z .

está ocupada. Este sistema físico se puede aproximar a un pozo de potencial triangular, originado por el campo eléctrico en la interfaz debido a la acumulación de cargas.

Considérese que sólo existe confinamiento en la banda de valencia, mas no así en la banda de conducción. Entonces, el potencial en la interfaz se puede aproximar a $U(z) = -eEz$, donde e es la magnitud de la carga del electrón, E es el campo eléctrico en la interfase, y se ha colocado la dirección de crecimiento a lo largo del eje z . De acuerdo a la ley de Gauss, el campo eléctrico en la interfaz de la heteroestructura es generado por

la densidad superficial de carga (σ) y ésta a su vez está dada por $\sigma = en_s$, donde n_s es la densidad superficial de huecos. El total de la carga está en el sistema de huecos de dos dimensiones (SH2D). Por tanto, el campo eléctrico se puede escribir como

$$E = \frac{en_s}{\epsilon_0 \epsilon_{SC}} \quad (3.7)$$

siendo ϵ_0 la permitividad en el vacío y ϵ_{SC} la constante dieléctrica del semiconductor.²

Dentro de la aproximación de electrón independiente, el Hamiltoniano de la heteroestructura que describe a las partículas se obtiene agregando el potencial en la interfaz $U(z)$ al Hamiltoniano para el bulto (ecuación 2.15), es decir:

$$H = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} + U(z) \quad (3.8)$$

Utilizando la aproximación de función envolvente, la función de onda es de la forma

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \chi_j^{I,II}(\mathbf{r}) u_{j,\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (3.9)$$

² Recuérdese que la densidad de carga se calcula multiplicando el módulo cuadrado de la función de onda por e , por lo que la función de onda depende de la cantidad de huecos confinados. De la misma manera, el potencial en la interfaz $U(z)$ también depende de la concentración de huecos, así que en principio, para calcular numéricamente la función de onda y el potencial, se debe hacer un cálculo autoconsistente, resolviendo la ecuación de Schrödinger y de Poisson de manera simultánea.

en donde, como ya se ha descrito anteriormente, $\chi_j(\mathbf{r})$ y $u_j(\mathbf{r})$ son la función envolvente y la parte periódica de la función de Bloch (respectivamente) de la j -ésima banda: electrones, hueco ligero, hueco pesado, etc., cada una de ellas doblemente degeneradas por el espín. Dada la simetría traslacional de la heteroestructura, $\chi_j^{I,II}(\mathbf{r})$ se puede factorizar en

$$\chi_j^{I,II}(\mathbf{r}_\perp, z) = e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_j^{I,II}(z) \quad (3.10)$$

de modo tal que la función de onda (3.9) queda simplemente de la forma

$$\boxed{\psi(\mathbf{r}) = \sum_j e^{i\mathbf{k}_\perp \cdot \mathbf{r}_\perp} f_j(z) u_j(\mathbf{r})} \quad (3.11)$$

donde $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y)$, $\mathbf{r}_\perp = (x, y)$ y el superíndice (I, II) se ha omitido por conveniencia.

Además, la función de onda ha sido expandida en términos de las funciones $u_j(\mathbf{r})$ alrededor del punto $\mathbf{k}_0 = 0$.

3.3.1 Modelo de Kane para heteroestructuras

Como fue descrito en el capítulo anterior, el modelo de Kane utiliza teoría de perturbaciones a primer orden para estados no degenerados e incorpora el término genérico de acoplamiento espín-órbita al Hamiltoniano que describe una partícula en un potencial periódico cristalino. El equivalente para heteroestructuras de tal modelo es

aplicar el Hamiltoniano (3.8) a la función de onda (3.11) e igualar a la energía multiplicada por la función de onda, es decir, resolver:

$$H\psi = \varepsilon\psi \quad (3.12)$$

de donde se obtiene la ecuación matricial en términos de la función u_j

$$\sum_{j=1}^n \left\{ f_j \left[\frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) + U(z) - \varepsilon \right] + \frac{\hbar}{m_0} (\hat{\mathbf{k}} f_j) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar^2}{2m_0} (\hat{\mathbf{k}}^2 f_j) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \hat{\mathbf{k}} f_j) \right\} u_j = 0 \quad (3.13)$$

donde $\hat{\mathbf{k}} = \left(k_x, k_y, \frac{\hat{p}_z}{\hbar} \right)$ es un vector operador. Los últimos dos términos en (3.13)

pueden ser despreciados en cálculos subsecuentes debido a que:

- 1) El momentum $\hbar k$ del cristal es mucho menor que el momentum $\mathbf{p}$ en el interior del átomo (donde se lleva a cabo el acoplamiento espín-órbita atómico).
- 2) La función envolvente varía suavemente en una celda unitaria.
- 3) La contribución a la masa efectiva estará dada principalmente por los elementos fuera de la diagonal, por lo que términos cuadráticos en k e inversamente proporcionales a m_0 también pueden ser despreciados. En semiconductores típicos, la masa efectiva es mucho menor a la masa en reposo del electrón. Por ejemplo, para *GaAs* $m^* = 0.067m_0$, con m_0 la masa en reposo del electrón libre.

Si la base u_j utilizada es solución del Hamiltoniano

$$H' = \frac{\hat{p}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) \quad (3.14)$$

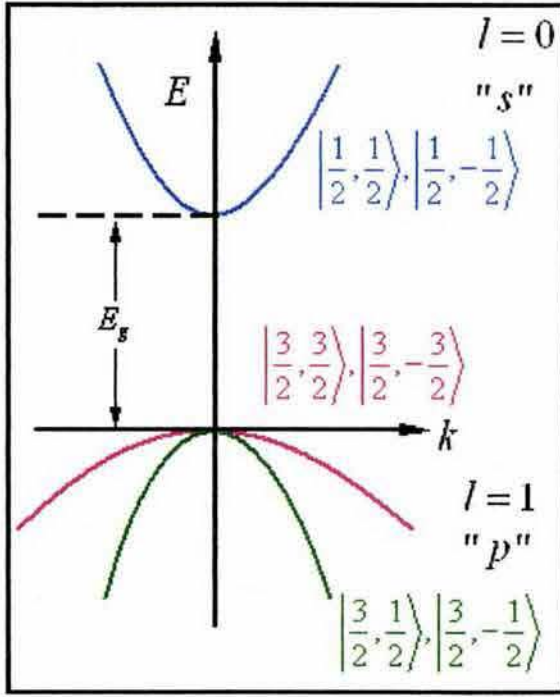
de la ecuación (3.13), multiplicando por izquierda por el conjugado de la parte periódica de la función de Bloch u_j^* , e integrado sobre una celda unitaria se obtiene la expresión matricial

$$\sum_{j=1}^n \left\{ [U(z) + \varepsilon_j - \varepsilon] \delta_{ji} + \frac{\hbar}{m_0} \left[k_x p_{ji}^x + k_y p_{ji}^y + p_{ji}^z \frac{\hat{p}_z}{\hbar} \right] \right\} f_j(z) = 0 \quad (3.15)$$

donde se ha usado $p_{ji}^\alpha = \langle u_j | p_\alpha | u_i \rangle$ ($\alpha = x, y, z$) y $H'u_j = \varepsilon_j u_j$. Sólo resta calcular explícitamente los elementos de matriz, lo cual se hará en la siguiente sección.

3.3.2 Cálculo de los elementos de matriz para el modelo de Kane

A continuación se calcularán explícitamente los elementos de matriz de la ecuación (3.15) para un modelo de 6×6 , considerando las bandas de conducción, de huecos ligeros y de huecos pesados, cada una doblemente degenerada por el espín, siguiendo un procedimiento similar al de la sección 2.3.1. Una base apropiada para el cálculo de los elementos de matriz es la utilizada por Efros et al. [69]:



(electrones)

$$|u_1^{1/2,1/2}\rangle = |S \uparrow\rangle; \quad |u_2^{1/2,-1/2}\rangle = |S \downarrow\rangle$$

(Huecos pesados)

$$|u_3^{3/2,3/2}\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right\rangle$$

$$|u_6^{3/2,-3/2}\rangle = \left| \frac{i}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \right\rangle$$

(3.16)

(Huecos ligeros)

$$|u_4^{3/2,1/2}\rangle = \left| \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right\rangle$$

$$|u_5^{3/2,-1/2}\rangle = \left| \frac{1}{\sqrt{6}} [(X + iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \right\rangle$$

donde las funciones u_j satisfacen el Hamiltoniano (3.14). Al calcular los elementos de la matriz de interacción, se obtiene el tensor de masa efectiva (ver Apéndice B sección B.2.1), lo que conduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$\begin{bmatrix} U(z) + E_g - \varepsilon & 0 & i \frac{Pk_z}{\sqrt{2}} & -i \sqrt{\frac{2}{3}} P \frac{d}{dz} & i \frac{Pk_x}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & U(z) + E_g - \varepsilon & 0 & -\frac{Pk_z}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} P \frac{d}{dz} & -\frac{Pk_x}{\sqrt{2}} \\ -i \frac{Pk_x}{\sqrt{2}} & 0 & U(z) - \varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ -i \sqrt{\frac{2}{3}} P \frac{d}{dz} & \frac{Pk_x}{\sqrt{6}} & 0 & U(z) - \varepsilon & 0 & 0 \\ -i \frac{Pk_z}{\sqrt{6}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} P \frac{d}{dz} & 0 & 0 & U(z) - \varepsilon & 0 \\ 0 & -\frac{Pk_z}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & U(z) - \varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{bmatrix} = 0$$

(3.17)

con

$$P = \frac{\hbar}{m_0} \langle iS | p_z | Z \rangle \quad y \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y \quad (3.18)$$

Este sistema es equivalente al obtenido por Darnhofer y Rossler [72] en el límite $\Delta \rightarrow \infty$. Las funciones envolvente (f_1, f_2) corresponden a electrones, (f_3, f_6) a huecos pesados y (f_4, f_5) a huecos ligeros. La referencia en la energía (ε) se ha colocado en el tope de la banda de valencia, es decir, se ha fijado

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 = \varepsilon_2 &= E_g \\ \varepsilon_3 = \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 &= 0 \end{aligned}$$

Para encontrar la dispersión de una banda, se proyectan los estados sobre la banda de interés (es decir, se desacopla el sistema de ecuaciones en favor de la función envolvente de la banda a analizar), tal y como se verá en detalle en los capítulos 4 y 5. Éste es el método estándar que ha venido usándose para el caso de electrones [38, 39, 41, 42].

3.3.3 Modelo de Luttinger-Kohn.

Como se mencionó en el capítulo anterior, el modelo de Luttinger-Kohn, al igual que el modelo de Kane, también incorpora el término de acoplamiento espín-órbita (de forma genérica) al Hamiltoniano de electrones inmersos en un potencial cristalino. La diferencia es que, el modelo de Luttinger-Kohn agrupa las bandas de interés en un subconjunto clase A y al resto de ellas (las que se incorporarán como perturbación) en

otro subconjunto clase B ; además toma en cuenta la degeneración en las bandas de huecos ligeros y pesados; por ende, utiliza teoría de perturbaciones para estados degenerados, donde las bandas en la clase B son incorporadas como perturbaciones. En otras palabras, en vez de resolver la eigenecuación (3.15), obtenida por teoría de perturbaciones no degeneradas a primer orden, se resuelve la eigenecuación

$$\sum_j^A (U_{j'j} - \varepsilon \delta_{j'j}) f_j(z) = 0 \quad (3.19)$$

donde

$$U_{j'j} = \left[\varepsilon_j + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k_x^2 + k_y^2 + \frac{p_z^2}{\hbar^2} \right) \right] \delta_{j'j} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{r \neq j, j'}^B \frac{\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{p}_{j'r} \hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{p}_{rj}}{E_d - E_r} \quad (3.20)$$

siendo E_d el valor de la energía del estado degenerado y $\hat{\mathbf{k}} = \left(k_x, k_y, \frac{\hat{p}_z}{\hbar} \right)$. En la siguiente sección se obtendrán los elementos de matriz de la ecuación (3.20)

3.3.4 Expresiones explícitas para la matriz de Luttinger-Kohn (extendido)

Para escribir explícitamente los elementos de la matriz $U_{j'j}$, utilizamos la definición de las constantes A_0 , B_0 y C_0 dadas en (2.39), así como los parámetro de Luttinger-Kohn γ_1^L , γ_2^L y γ_3^L definidos en (2.40). Mediante la expresión (3.19) y la base (3.16), considerando un modelo de 6×6 , en el que se toman en cuenta las bandas de

conducción, huecos ligeros y huecos pesados, y despreciando términos con derivadas de segundo orden en z se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas para las funciones envolventes (ver Apéndice B, sección B.2.2):

$$\begin{bmatrix} a + E_g + Ak^2 & 0 & i\frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & -i\sqrt{\frac{2}{3}}P\frac{d}{dz} & i\frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & 0 \\ 0 & a + E_g + Ak^2 & 0 & -\frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}}P\frac{d}{dz} & -\frac{Pk_-}{\sqrt{2}} \\ -i\frac{Pk_-}{\sqrt{2}} & 0 & a - S_+k^2 & Rk_-\frac{d}{dz} & -\frac{Rk_-^2}{2} & 0 \\ -i\sqrt{\frac{2}{3}}P\frac{d}{dz} & \frac{Pk_-}{\sqrt{6}} & -Rk_+\frac{d}{dz} & a - S_-k^2 & 0 & -\frac{Rk_-^2}{2} \\ -i\frac{Pk_+}{\sqrt{6}} & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\frac{d}{dz} & -\frac{Rk_+^2}{2} & 0 & a - S_-k^2 & -Rk_-\frac{d}{dz} \\ 0 & -\frac{Pk_+}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{Rk_+^2}{2} & Rk_+\frac{d}{dz} & a - S_+k^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \end{bmatrix} = 0 \quad (3.21)$$

donde se han definido:

$$\begin{aligned} R &= \sqrt{3} \frac{\gamma \hbar^2}{m_0} \\ a &= U(z) - \varepsilon \\ S_{\pm} &= \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 \pm \gamma) \\ A &= \mu \frac{\hbar^2}{2m_0} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Es preciso enfatizar que los parámetros de valencia γ_1 y γ no son los parámetros de Luttinger (γ_1^L y γ^L), ya que las contribuciones de la banda de conducción (la cual es

incorporada al modelo de forma exacta y no como banda remota) deben ser excluidas [68]. El parámetro γ^L es la constante de Luttinger dentro del modelo conocido como aproximación esférica [73], esto es

$$\gamma_2^L \approx \gamma_3^L \approx \gamma^L = \frac{2\gamma_2^L + 3\gamma_3^L}{5} .$$

Los parámetros de valencia γ_1 y γ están relacionados a los parámetros de Luttinger mediante las expresiones

$$\gamma = \gamma^L - \frac{m_0 P^2}{3\hbar^2 E_g} \qquad \gamma_1 = \gamma_1^L - \frac{2m_0 P^2}{3\hbar^2 E_g}$$

Por otro lado, el parámetro μ es una contribución de bandas remotas a la masa efectiva de los electrones y puede ser estimada mediante

$$\mu = m_0 \left(\frac{1}{m_e^*} - \frac{4P^2}{3\hbar^2 E_g^2} \right)$$

donde m_e^* es la masa efectiva de los electrones.

Cabe señalar que originalmente, el modelo de Luttinger-Kohn es un modelo de 6×6 donde se consideran las bandas de hueco ligero, hueco pesado y split off. Como se

mencionó anteriormente, en el presente trabajo, para la obtención del sistema de ecuaciones (3.21), las bandas consideradas fueron las de hueco ligero, hueco pesado y de electrones y por ello se hace referencia a este modelo como modelo de *Luttinger-Kohn extendido*. Esto es, corresponde al modelo de Pidgeon-Brown despreciando la interacción con la banda de huecos split off.

De igual forma que en el modelo de Kane, para obtener la dispersión de una banda, se proyectan los estados sobre la banda de interés, tal y como se verá en los capítulos 4 y 5.

Capítulo 4

Hamiltonianos de Rashba para huecos pesados

En el capítulo anterior se describió la teoría de la función envolvente y los modelos de Kane y Luttinger-Kohn extendido (LKe) para heteroestructuras semiconductoras. El siguiente paso es proyectar el sistema sobre alguna banda de interés particular con el fin de obtener el Hamiltoniano que describa apropiadamente la dinámica de los portadores de carga para dicha banda. Esto se hace desacoplando el sistema de ecuaciones resultante de los modelos de Kane y LKe para la función envolvente de la banda de interés. Una vez desacoplada, se busca escribir tal expresión como una ecuación diferencial de segundo orden tipo ecuación de Schrödinger y se procede a identificar términos, tales como el operador de energía cinética y el potencial en la interfaz. En el caso de los huecos confinados en una heteroestructura, se espera que en la ecuación desacoplada aparezca algún término que pueda ser asociado a acoplamiento Rashba, debido a la ausencia de simetría de inversión de la heteroestructura, tal como sucede para los electrones. En este proceso, se verá posteriormente que al escribir la ecuación desacoplada (para una función envolvente dada) como una ecuación tipo Schrödinger, se obtiene un “Hamiltoniano efectivo” que depende explícitamente de la energía, de modo tal que la ecuación resultante no es rigurosamente una ecuación de eigenvalores “tipo Schrödinger”, aunque por supuesto siempre puede ser resuelta numéricamente de forma exacta. Con la finalidad de obtener una interpretación simple y directa de la física relevante y con la intención de obtener parámetros independientes de

la energía, algunos términos del Hamiltoniano efectivo son sustituidos por sus valores de expectación, mientras que otros son expandidos en series; después se procede a identificar los términos que contribuyen más fuertemente a la dispersión de los huecos para heteroestructuras semiconductoras típicas.

En este capítulo se presenta la obtención de fórmulas explícitas para los Hamiltonianos de Rashba de huecos pesados, utilizando los modelos de Kane (sección 4.1) y Luttinger-Kohn extendido (sección 4.4), partiendo de los resultados obtenidos en las secciones 3.3.1 y 3.3.3.

4.1 Hamiltoniano para huecos pesados: Modelo de Kane

Del modelo de Kane (3.17), después de un álgebra laboriosa pero relativamente sencilla y tomando especial cuidado con el orden de los operadores, es posible desacoplar el sistema de ecuaciones diferenciales en favor de la función envolvente de la subbanda de huecos pesados (f_3, f_6) , obteniéndose la simple ecuación matricial:

$$\begin{bmatrix} H_0 & \alpha(\varepsilon, z) \frac{k_-^2}{k_+} \\ \alpha(\varepsilon, z) \frac{k_+^2}{k_-} & H_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |f_3\rangle \\ |f_6\rangle \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} |f_3\rangle \\ |f_6\rangle \end{bmatrix}, \quad (4.1)$$

donde

$$H_0 = \frac{2P^2}{3[U(z) + E_g - \varepsilon]} \frac{d}{dz} \left\{ \frac{1}{[U(z) - \varepsilon]} \frac{d}{dz} [U(z) - \varepsilon] \right\} - \frac{2P^2 k^2}{3[U(z) + E_g - \varepsilon]} + U(z) \quad (4.2)$$

y el coeficiente de los términos fuera de la diagonal está dado explícitamente por ¹

$$\boxed{\alpha(\varepsilon, z) = \frac{P^2}{3} \left[\frac{U(z) - \varepsilon}{U(z) + E_g - \varepsilon} \right] \left\{ \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{U(z) - \varepsilon} \right] \right\}} \quad (4.3)$$

Aquí, ε es la energía de los huecos pesados y $U(z)$ es el potencial triangular en la interfaz de la heteroestructura que da lugar al confinamiento de los huecos. Notamos que la ecuación (4.1) se puede expresar de manera compacta como

$$(H_0 + H_{so})|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle, \quad (4.4)$$

donde

$$|\psi\rangle = |f_3, \uparrow\rangle + |f_6, \downarrow\rangle, \quad \left(\text{con } \uparrow \equiv \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \downarrow \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} \right) \quad (4.5)$$

y el término que da el acoplamiento espín-órbita H_{so} se puede escribir como:

¹ Para electrones, utilizando un modelo de 6 bandas, el coeficiente de los términos fuera de la diagonal está

dado por (véase Ref. [39]) $\alpha_e(z, \varepsilon) = \frac{P^2}{3} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{U(z) + E_g - \varepsilon} \right]$

$$H_{SO} = \alpha(\epsilon, z) \left[\frac{k_-^2}{k_+} \sigma_+ + \frac{k_+^2}{k_-} \sigma_- \right] \quad (4.6)$$

en la que se ha utilizado la definición $\sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$, donde

$$\sigma_+ = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \sigma_- = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (4.7)$$

Nótese que la ecuación (4.1), con las definiciones (4.2), (4.3) y (4.6) es una ecuación exacta en la que no se ha realizado ningún tipo de aproximación. Nótese también que dicha ecuación no puede ser interpretada como una ecuación tipo Schrödinger, ya que el Hamiltoniano depende explícitamente de la energía. Algebraicamente no hay forma de escribir la ecuación (4.1) como una ecuación de eigenvalores, esto es sin recurrir a aproximaciones. Por supuesto, es posible resolverla numéricamente. Sin embargo, en el cálculo numérico sería mucho más difícil y menos intuitivo el extraer e interpretar los mecanismos físicos relevantes. Resulta pues de gran importancia extraer expresiones analíticas relativamente simples que reflejen, si no cuantitativamente, al menos cualitativamente la física relevante en estos sistemas y que puedan ser utilizadas posteriormente para cálculos de propiedades ópticas y de transporte en sistemas bidimensionales de huecos.

Cabe mencionar aquí que para el caso de los electrones, el procedimiento que en la literatura se sigue comúnmente, una vez que se ha obtenido la ecuación tipo

Schrödinger con Hamiltoniano efectivo dependiente de la energía, es hacer una expansión de dicho Hamiltoniano en serie de Taylor en función del parámetro $\delta \equiv \frac{U - \varepsilon}{E_g}$. Dado que $\delta \ll 1$ para la mayoría de los semiconductores típicos, el hacer una expansión en términos de δ en el Hamiltoniano efectivo y truncarlo a los primeros órdenes produce un Hamiltoniano independiente de la energía que resulta ser una muy buena y a veces excelente aproximación para el Hamiltoniano efectivo. Sin embargo, puede verse de las expresiones (4.2) y (4.3) que en el caso de los huecos pesados no es posible hacer tal expansión, ya que en el Hamiltoniano aparecen términos de la forma $[U(z) - \varepsilon]^{-1}$, por lo que resulta prescindible seguir un procedimiento alternativo para tales términos.

Así pues, con el fin de ilustrar la física detrás de la expresión (4.1), en el término de la forma $[U(z) - \varepsilon + E_g]^{-1}$ hacemos una expansión en serie de δ a cero orden² en H_0 y H_{so} ; por otro lado, hacemos una primera estimación del término de la forma $[U(z) - \varepsilon]$ sustituyéndolo por su valor de expectación $\langle U(z) - \varepsilon \rangle$ (el cual es una constante). En el espíritu de tales aproximaciones,

$$H_0 = U(z) - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \quad , \quad H_{so} = 0$$

y la ecuación (4.1) a cero orden en δ se reduce a

$$^2 \quad \frac{1}{U(z) - \varepsilon + E_g} = \frac{1}{E_g(1 + \delta)} = \frac{1}{E_g}(1 + \delta + \dots) \quad , \quad \delta \ll 1$$

$$\left\{ U - \varepsilon_0 - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \right\} |f_{3,6}\rangle = 0 \quad (4.8)$$

Enfatizamos que bajo las aproximaciones anteriores, el valor de $\alpha(\varepsilon, z)$ se vuelve nulo y por tanto H_{SO} no contribuye al Hamiltoniano total. Con el fin de recuperar y estimar la contribución diferente de cero de los términos lineales en k fuera de la diagonal, primero manipulamos algebraicamente la expresión en (4.3)

$$\begin{aligned} \alpha(\varepsilon, z) &= \frac{P^2}{3} \left[\frac{U(z) - \varepsilon}{U(z) + E_g - \varepsilon} \right] \left\{ \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{U(z) - \varepsilon} \right] \right\} \\ &= -\frac{P^2}{3} \frac{1}{[U(z) - \varepsilon][U(z) - \varepsilon + E_g]} \frac{d}{dz} [U(z) - \varepsilon] \\ &= eE \frac{P^2}{3E_g} \left[\frac{1}{U(z) - \varepsilon} - \frac{1}{U(z) - \varepsilon + E_g} \right] \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde se han utilizado las igualdades

$$\frac{d}{dz} \left[\frac{1}{U(z) - \varepsilon} \right] = -\frac{1}{[U(z) - \varepsilon]^2} \frac{d}{dz} [U(z) - \varepsilon]$$

y

$$\frac{d}{dz} [U(z) - \varepsilon] = \frac{d}{dz} [-eEz - \varepsilon] = -eE$$

Habiendo realizado tal manipulación en (4.3), de nueva cuenta sustituiremos $[U(z) - \varepsilon]$ por su valor de expectación, es decir

$$U(z) - \varepsilon \rightarrow \langle U(z) - \varepsilon \rangle = \langle f(z) | U(z) - \varepsilon | f(z) \rangle, \quad (4.10)$$

donde $f(z)$ es la solución exacta a la ecuación (4.8) con la condición a la frontera $f(z=0) = 0$. En la ecuación (4.8), definamos

$$\bar{\varepsilon}_{hp}(k) = -\varepsilon_0 - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 \quad (4.11)$$

Notamos que la solución a (4.8) para la función envolvente $f(z)$ está dada por la función de Airy (ver Apéndice A):

$$f_{hp}(z) = N_{hp}^f Ai \left\{ \left(\frac{3E_g}{2P^2} \right)^{1/3} \left[\frac{eEz - \bar{\varepsilon}_{hp}(k)}{(eE)^{2/3}} \right] \right\} \quad (4.12)$$

donde N_{hp}^f es una constante de normalización y hp denota hueco pesado. De la condición a la frontera $f(z=0) = 0$, se debe satisfacer:

$$\bar{\varepsilon}(k) = C_n \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3}; \quad n=1, 2, 3... \quad (4.13)$$

donde C_n son las raíces de la función de Airy (con $C_1 \cong 2.338$ para el estado base).

Utilizando la función envolvente (4.12) y la relación (4.13) obtenemos para $n=1$

$$\langle f(z) | U(z) - \varepsilon | f(z) \rangle = \frac{2.338}{3} \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3} + \frac{2P^2 k^2}{3E_g}$$

Definamos un vector de onda crítico k_c^{hp} tal que

$$\frac{2.338}{3} \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3} \equiv \frac{2P^2 (k_c^{hp})^2}{3E_g} \equiv \xi \quad \therefore \quad k_c^{hp} = \sqrt{\frac{3E_g \xi}{2P^2}} \quad (4.14)$$

Nótese que ξ tiene unidades de energía. Por tanto, podemos escribir el valor de expectación de $[U(z) - \varepsilon]$ como

$$\langle f(z) | U(z) - \varepsilon | f(z) \rangle = \xi \left[1 + \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right] \quad (4.15)$$

Sustituyendo $\langle U(z) - \varepsilon \rangle$ en (4.9), obtenemos un coeficiente para H_{so} independiente de la energía y la posición

$$\alpha_{s.e}(k) = eE \frac{P^2}{3E_g} \left\{ \frac{1}{\xi} \left[1 + \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right]^{-1} - \frac{1}{\xi + E_g} \left[1 + \frac{\xi}{\xi + E_g} \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right]^{-1} \right\} \quad (4.16)$$

al cual denominaremos coeficiente “semiexacto” (*s.e.*). El coeficiente semiexacto posee una complicada dependencia en el vector de onda k . Con el fin de simplificar dicha dependencia y reducir el coeficiente semiexacto a una forma polinomial en k , una alternativa es realizar la aproximación $\left[1 + \left(\frac{k}{k_c^{hp}}\right)^2\right]^{-1} \approx \left[1 - \left(\frac{k}{k_c^{hp}}\right)^2\right]$, la cual se cumple para valores de k tales que $(k/k_c^{hp})^2 \ll 1$. Sin embargo, es preciso enfatizar que a densidades de huecos típicas (de 10^{10} a 10^{12} cm^{-2}), el vector de onda de Fermi (k_F) resulta ser del orden de k_c^{hp} , por lo que la expansión antes mencionada perdería validez para valores de $k \sim k_F$. La otra alternativa es sustituir k por k_F en el primer término entre corchetes (el cual es el término dominante para $k \sim k_F$) en (4.16) y hacer una expansión en el segundo término, ya que siempre se cumple que $\xi \ll E_g$. Sin embargo, se debe enfatizar el hecho de que al proceder de la forma anteriormente descrita, se obtiene una expresión que aunque es válida para valores de k cerca de k_F , no lo es para valores de k tales que $k \ll k_F$. Así pues, se manejarán dos casos; caso 1: valores de k tales que $k \ll k_c^{hp}$ (*i.e.* $k \ll k_F$); y caso2: valores de $k \sim k_c^{hp}$.

- **Caso 1:** $k \ll k_c^{hp}$

Realizando la aproximación anteriormente $\left[1 + \left(\frac{k}{k_c^{hp}}\right)^2\right]^{-1} \approx \left[1 - \left(\frac{k}{k_c^{hp}}\right)^2\right]$ en (4.16) y reacomodando obtenemos

$$\alpha(k) = eE \frac{P^2}{3E_g} \left\{ \frac{E_g}{\xi(\xi + E_g)} - \left[\frac{E_g(2\xi + E_g)}{\xi(\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} \right] k^2 \right\} \quad (4.17)$$

Al sustituir (4.17) en (4.6) obtenemos

$$H_{SO} = \alpha_{hp} \left[\frac{k_-^2}{k_+} \sigma_+ + \frac{k_+^2}{k_-} \sigma_- \right] + \beta_{hp} [k_-^3 \sigma_+ + k_+^3 \sigma_-] \quad (4.18)$$

con coeficientes que dependen solamente de los parámetros del semiconductor (pozo cuántico), dados por

$$\alpha_{hp} = eE \frac{P^2}{3\xi(\xi + E_g)} \quad (4.19)$$

$$\beta_{hp} = -eE \frac{P^2(2\xi + E_g)}{3\xi(\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} \quad (4.20)$$

Nótese que aparece un término adicional en H_{SO} que es proporcional a $k_{\pm}^3$ debido a la dependencia en k^2 de $\alpha(k)$ en (4.17). Es interesante notar que $\alpha_{hp} > 0$ mientras que $\beta_{hp} < 0$, lo cual sugiere una competencia entre el término lineal y el término cúbico de la expresión (4.18).

- **Caso 2:** $k \sim k_c^{hp}$

Debido a que $k_c^{hp} \sim k_F$, sustituimos el valor de k por k_F en el primer término entre corchetes en (4.16) (ya que es éste el término dominante en $k = k_F$) y hacemos una expansión en serie de Taylor a segundo orden en k en el segundo término entre corchetes en (4.16), lo cual nos conduce al coeficiente α

$$\alpha(k) = eE \frac{P^2}{3E_g} \left\{ \frac{1}{\xi} \left[1 + \left(\frac{k_F}{k_c^{hp}} \right)^2 \right]^{-1} - \frac{1}{\xi + E_g} \left[1 - \frac{\xi}{\xi + E_g} \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right] \right\} \quad (4.21)$$

Reacomodando términos en (4.21) obtenemos

$$\alpha = eE \frac{P^2}{3E_g} \left\{ \frac{\left(k_c^{hp} \right)^2 E_g - \xi k_F^2}{\xi (\xi + E_g) \left[\left(k_c^{hp} \right)^2 + k_F^2 \right]} + \frac{\xi}{(\xi + E_g)^2 \left(k_c^{hp} \right)^2} k^2 \right\} \quad (4.22)$$

Al sustituir (4.22) en (4.6) se obtiene una expresión similar a (4.18), pero ahora con los coeficientes α_{hp} y β_{hp} dados por

$$\alpha_{hp} = eE \frac{P^2 \left[\left(k_c^{hp} \right)^2 E_g - \xi k_F^2 \right]}{3E_g \xi (\xi + E_g) \left[\left(k_c^{hp} \right)^2 + k_F^2 \right]} \quad (4.23)$$

$$\beta_{hp} = eE \frac{P^2 \xi}{3E_g (\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} \quad (4.24)$$

Observamos que en ambos casos ($k \ll k_c^{hp}$ y $k \sim k_c^{hp}$), la ecuación (4.1) se torna ahora en una ecuación de eigenvalores con el Hamiltoniano efectivo dado ahora por:

$$H = H_0 + H_{so} \quad (4.25)$$

donde

$$H_0 = U(z) - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \quad (4.26)$$

y H_{so} dado por (4.18) con parámetros de acoplamiento válidos en dos regímenes distintos: expresiones (4.19) y (4.20) (caso 1) y expresiones (4.23) y (4.24) (caso 2). Nótese que tanto H_0 como H_{so} ya no dependen explícitamente de la energía ε . Nótese también que aparece un término cúbico en k de la forma $k_{\pm}^3$ y uno lineal de la forma $k_{\pm}$ para el Hamiltoniano de Rashba de huecos pesados. Los términos de orden superior en la expansión en series de potencias de δ del Hamiltoniano (4.1) nos proveen sólo de correcciones a la no parabolicidad de las dispersiones y es por ello que sólo se han incluido los términos de mayor peso. El término H_{so} lo identificamos (*a posteriori*) como el Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados con constantes de acoplamiento

α_{hp} y β_{hp} . Éste resultado contrasta con los obtenidos por Gerchikov y Subashiev [36], y Winkler et al. [62], en los que en el Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados les resulta sólo el término cúbico³. Como hemos visto, el modelo de Kane conduce a un término lineal en k , no predicho por Gerchikov y Subashiev, y Winkler et al. Además, a diferencia de los trabajos [36] y [62], aquí se han obtenido estimaciones analíticas simples para las constantes de acoplamiento. Los términos lineales y cúbicos en k de la ecuación (4.17) conducirán a un desdoblamiento de los estados de espín, tal como se detallará en el capítulo 6. Finalmente, puede verse de la expresión para k_c^{hp} y de la definición del vector de onda de Fermi $k_F = \sqrt{2\pi n_s}$, que a medida que la densidad n_s disminuye, el vector de onda de Fermi se vuelve menor a k_c^{hp} , de modo que el caso 1 describe muy bien el acoplamiento Rashba a densidades bajas ($\leq 10^{11} \text{ cm}^{-2}$).

4.2 Dispersiones para huecos pesados

Las dispersiones de los huecos pesados se pueden obtener de diferentes maneras. Aquí, se obtendrán de dos formas distintas: a través de teoría de perturbaciones para estados degenerados (sección 4.2.1) y a través de método variacional (sección 4.2.2). En ambos métodos se modela la heteroestructura que crea el sistema de huecos de dos dimensiones (SH2D) como un pozo triangular infinito. Ciertamente, este no es un

³ Para la obtención del Hamiltoniano de Rashba de huecos pesados, Gerchikov y Subashiev [36] utilizaron teoría de invariantes, y para la estimación del parámetro de acoplamiento utilizaron el modelo de Luttinger-Kohn. Por su parte, Winkler et al. [62] utilizó el modelo de Luttinger-Kohn de 2×2 (en el que sólo considera las bandas de huecos ligeros y huecos pesados) para obtener una estimación del parámetro de acoplamiento.

modelo realista; sin embargo, nos permite extraer información cualitativa y muy útil del comportamiento de la relación de dispersión, además de que para ciertos semiconductores, el suponer un pozo triangular infinito constituye una muy buena aproximación, tal como se ha demostrado para el caso de los electrones [39].

4.2.1 Dispersiones de huecos pesados: Teoría de perturbaciones

Supóngase una heteroestructura semiconductor en la que la contribución de H_{so} (dada por la expresión 4.18) a la energía de los huecos pesados es tan pequeña que se puede incorporar como perturbación a H_0 (ecn. 4.26). Para el caso no perturbado, se tiene la eigenecuación:

$$\left(-eEz - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \right) |f_{hp}, \sigma\rangle = \varepsilon_0 |f_{hp}, \sigma\rangle \quad (4.27)$$

donde ε_0 es la energía para el sistema no perturbado, con las definiciones $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$; $|f_{hp}, \uparrow\rangle = |f_3\rangle$, $|f_{hp}, \downarrow\rangle = |f_6\rangle$. En la sección anterior vimos que la solución a (4.27) está dada por la función envolvente (4.12); utilizando (4.11) y (4.13) que son la solución a (4.27) para la energía, el valor de ε_0 en el estado base se puede escribir como:

$$\varepsilon_0 = -3\xi - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 \quad (4.28)$$

De teoría de perturbaciones para estados degenerados a cero orden [74], se tiene el siguiente sistema de ecuaciones [53]:

$$[\epsilon_0 + (H_{SO})_{\sigma\sigma} - \epsilon]q_\sigma^0 + \sum_{\sigma' \neq \sigma} (H_{SO})_{\sigma\sigma'} q_{\sigma'}^0 = 0 \quad (4.29)$$

donde q_σ^0 son los coeficientes a cero orden utilizados para expandir los estados perturbados en términos de los no perturbados $|f, \sigma\rangle$, ϵ_0 está dada por la expresión (4.28), H_{SO} se definió en (4.18) y $(H_{SO})_{\sigma\sigma'} = \langle f, \sigma | H_{SO} | f, \sigma' \rangle$. Debido a que los operadores de espín σ_+ y σ_- al actuar sobre los espinores (definidos en la expresión 4.5) producen

$$\sigma_+ |\uparrow\rangle = 0, \quad \sigma_+ |\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \quad \sigma_- |\downarrow\rangle = 0 \quad \text{y} \quad \sigma_- |\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle \quad (4.30)$$

respectivamente, estos conducen a que

$$(H_{SO})_{\uparrow\uparrow} = (H_{SO})_{\downarrow\downarrow} = 0,$$

mientras que

$$(H_{SO})_{\uparrow\downarrow} = \alpha_{hp} \frac{k_-^2}{k_+} + \beta_{hp} k_-^3 \quad \text{y} \quad (H_{SO})_{\downarrow\uparrow} = \alpha_{hp} \frac{k_+^2}{k_-} + \beta_{hp} k_+^3$$

Insertando estos resultados en (4.29) se obtiene el sistema

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & \alpha_{hp} \frac{k_-^2}{k_+} + \beta_{hp} k_-^3 \\ \alpha_{hp} \frac{k_+^2}{k_-} + \beta_{hp} k_+^3 & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{bmatrix} \begin{pmatrix} q_{\uparrow}^0 \\ q_{\downarrow}^0 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.31)$$

de donde al calcular los eigenvalores, se deduce una forma simple para la dispersión de los huecos pesados:

$$\boxed{\varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} k^2 \pm (\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3)} \quad (4.32)$$

con la definición de la masa efectiva del hueco pesado:

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} \equiv \frac{2P^2}{3E_g} \quad (4.33)$$

Puede verse de la dispersión (4.32) y la definición (4.33) que las parábolas “abren” hacia abajo de modo tal que la masa efectiva es negativa, tal y como se esperaría para los huecos pesados.

Los eigenvectores correspondientes a (4.31) son exactamente

$$|\varepsilon_{\pm}^{hp}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_{hp}}} \begin{bmatrix} \alpha_{hp} \frac{(k_x - ik_y)^2}{(k_x + ik_y)} + \beta_{hp} (k_x - ik_y)^3 \\ \pm (\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3) \end{bmatrix}, \quad (4.34)$$

con la constante de normalización

$$N_{hp} = \left[\alpha_{hp} \frac{(k_x - ik_y)^2}{(k_x + ik_y)} + \beta_{hp} (k_x - ik_y)^3 \right]^2 + [\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3]^2$$

y $k^2 = k_x^2 + k_y^2$. Por otro lado, nótese que el término H_{so} definido en (4.18) rompe la degeneración en k de los estados, obteniéndose una banda ε_+ y una ε_- .

El desdoblamiento de las bandas $\Delta\varepsilon$ es simplemente,

$$\Delta\varepsilon^{hp} = \varepsilon_+^{hp} - \varepsilon_-^{hp} = 2(\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3) \quad (4.35)$$

En analogía para el caso de electrones⁴, identificamos a H_{so} como el Hamiltoniano de acoplamiento “Rashba” de los huecos pesados, con α_{hp} y β_{hp} como los parámetros de desdoblamiento. En el capítulo 6 se hará una estimación numérica de los valores de α_{hp} y β_{hp} , y se compararán para diversos semiconductores, además de

⁴ Para electrones se sabe que el Hamiltoniano de Rashba $H_{so} = \alpha_e (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x)$ conduce a un desdoblamiento lineal con k dado por $\Delta\varepsilon^e = \varepsilon_+^e - \varepsilon_-^e = 2\alpha_e k$.

obtener gráficas para la dispersión (4.32) y el desdoblamiento (4.35). Debido que $\beta_{hp} < 0$ para el caso 1 (ver definición 4.20), en el capítulo 6 se estudiará el grado de competencia entre los términos lineal y cúbico en k del desdoblamiento (4.35).

4.2.2 Dispersión de huecos pesados: Método variacional

Para un pozo triangular con una barrera infinita, una función de prueba útil es la función de Fang-Howard [75]:

$$f_{\sigma}(z) = \sqrt{\frac{b^3}{2}} z e^{-\frac{bz}{2}} |\sigma\rangle \quad (4.36)$$

donde b es aquí el parámetro variacional. Nótese que el comportamiento de la función de Fang-Howard es tal que se vuelve nula en $z = 0$ y decae exponencialmente para $z > 0$, como se esperaría intuitivamente para un pozo triangular infinito.

Utilizando la función envolvente (4.36) para encontrar el estado base del Hamiltoniano (4.25), se obtiene el sistema de ecuaciones

$$\sum_{\sigma', \sigma} [(\varepsilon_0 - \varepsilon) \delta_{\sigma\sigma'} + (H_{SO})_{\sigma\sigma'}] = 0 \quad (4.37)$$

donde

$$\varepsilon_0 = \langle f_\sigma | H_0 | f_\sigma \rangle = -\frac{3eE}{b} - \frac{2P^2}{3E_g} k^2 - \frac{2P^2}{3E_g} \left(\frac{b}{2}\right)^2 \quad (4.38)$$

con $(H_{SO})_{\sigma\sigma'} = \langle f_\sigma | H_{SO} | f_{\sigma'} \rangle$, y H_0 y H_{SO} se definieron en (4.26) y (4.18) respectivamente. Por los mismos argumentos de la sección anterior:

$$(H_{SO})_{\uparrow\uparrow} = (H_{SO})_{\downarrow\downarrow} = 0$$

Por otro lado, no es difícil ver que

$$(H_{SO})_{\uparrow\downarrow} = \alpha_{hp} \frac{k_-^2}{k_+} + \beta_{hp} k_-^3 \quad (H_{SO})_{\downarrow\uparrow} = \alpha_{hp} \frac{k_+^2}{k_-} + \beta_{hp} k_+^3$$

Sustituyendo en la ecuación (4.37) se llega a la matriz

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & \alpha_{hp}(b) \frac{k_-^2}{k_+} + \beta_{hp} k_-^3 \\ \alpha_{hp}(b) \frac{k_+^2}{k_-} + \beta_{hp} k_+^3 & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{bmatrix} = 0 \quad (4.39)$$

Cuya solución para la energía ε está dada por

$$\varepsilon_{\pm}^{hp}(k, b) = \varepsilon^{hp}(k=0) - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} k^2 \pm [\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3] \quad (4.40)$$

con

$$\varepsilon^{hp}(k=0) = -\frac{3eE}{b} - \frac{2P^2}{3E_g} \left(\frac{b}{2}\right)^2, \quad (4.41)$$

$$\text{y} \quad \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^{ef}} \equiv \frac{2P^2}{3E_g} \quad (4.42)$$

Para obtener el valor del parámetro variacional b , minimizamos (4.40) respecto b , lo que nos conduce a

$$b = \sqrt[3]{\frac{9E_g eE}{2P^2}} \quad (4.43)$$

Al sustituir este valor de b en (4.41) obtenemos finalmente

$$\varepsilon^{hp}(k=0) \cong -2.6 \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3} \approx -\frac{10}{3} \xi \quad (4.44)$$

Nótese la similitud de las dispersiones (4.40) obtenidas con el método variacional y las dispersiones (4.32) obtenidas utilizando teoría de perturbaciones. El desdoblamiento de las bandas es idéntico a la expresión (4.35).

4.3 Resumen de Resultados

A continuación se resumen los resultados importantes obtenidos en este capítulo utilizando el modelo de Kane.

Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados (exacto)

$$H_{SO} = \alpha(\varepsilon, z) \left[\frac{k_-^2}{k_+} \sigma_+ + \frac{k_+^2}{k_-} \sigma_- \right] \quad (4.45)$$

Parámetro de acoplamiento espín-órbita (exacto)

$$\alpha(\varepsilon, z) = \frac{P^2}{3} \left[\frac{U(z) - \varepsilon}{U(z) + E_g - \varepsilon} \right] \left\{ \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{U(z) - \varepsilon} \right] \right\} \quad (4.46)$$

Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados (independiente de la energía y posición)

$$H_{SO} = \alpha_{hp} \left[\frac{k_-^2}{k_+} \sigma_+ + \frac{k_+^2}{k_-} \sigma_- \right] + \beta_{hp} \left[k_-^3 \sigma_+ + k_+^3 \sigma_- \right] \quad (4.47)$$

Constantes de acoplamiento espín-órbita

- **Caso 1:** $k \ll k_c^{hp}$

$$\alpha_{hp} = eE \frac{P^2}{3\xi(\xi + E_g)} \quad (4.48)$$

$$\beta_{hp} = -eE \frac{P^2(2\xi + E_g)}{3\xi(\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} \quad (4.49)$$

- **Caso 2:** $k \sim k_c^{hp}$

$$\alpha_{hp} = eE \frac{P^2 \left[(k_c^{hp})^2 E_g - \xi k_F^2 \right]}{3E_g \xi (\xi + E_g) \left[(k_c^{hp})^2 + k_F^2 \right]} \quad (4.50)$$

$$\beta_{hp} = eE \frac{P^2 \xi}{3E_g (\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} \quad (4.51)$$

Bandas de dispersión

$$\varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} k^2 \pm (\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3) \quad (4.52)$$

$$\xi = \frac{2.338}{3} \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3} \quad (4.53)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} \equiv \frac{2P^2}{3E_g} \quad (4.54)$$

Desdoblamiento de las bandas

$$\Delta \varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = \varepsilon_+^{hp} - \varepsilon_-^{hp} = 2(\alpha_{hp}k + \beta_{hp}k^3) \quad (4.55)$$

Caso semiexacto

Para el caso semiexacto (s.e.), el Hamiltoniano de Rashba independiente de la energía y la posición y el coeficiente de acoplamiento para huecos pesados están dados por

$$H_{SO} = \alpha_{s.e.}(k) \left[\frac{k_-^2}{k_+} \sigma_+ + \frac{k_+^2}{k_-} \sigma_- \right] \quad (4.56)$$

$$\alpha_{s.e.}(k) = eE \frac{P^2}{3E_g} \left\{ \frac{1}{\xi} \left[1 + \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right]^{-1} - \frac{1}{\xi + E_g} \left[1 + \frac{\xi}{\xi + E_g} \left(\frac{k}{k_c^{hp}} \right)^2 \right]^{-1} \right\} \quad (4.57)$$

mientras que la dispersión y el desdoblamiento están dados por

$$\varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} k^2 \pm \alpha_{s.e.}(k) \cdot k \quad (4.58)$$

$$\Delta \varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = \varepsilon_+^{hp} - \varepsilon_-^{hp} = 2\alpha_{s.e.}(k) \cdot k \quad (4.59)$$

4.4 Hamiltoniano para huecos pesados: Modelo de Luttinger-Kohn extendido.

El procedimiento para el cálculo de los Hamiltonianos de Rashba y las dispersiones de huecos utilizando el modelo de Luttinger-Kohn extendido, es el mismo que se aplicó en las secciones anteriores utilizando el modelo de Kane. A continuación se muestra el resumen de los resultados que se obtienen partiendo de la matriz Hamiltoniana de Luttinger-Kohn (3.21)

Hamiltoniano (exacto)

Al desacoplar el sistema de ecuaciones (3.21) a favor de la función envolvente de huecos pesados y reacomodar la ecuación desacoplada como una ecuación tipo Schrödinger, se obtiene una ecuación matricial análoga a (4.1), pero ahora con H_0 dado por

$$H_0 = \left[\frac{P^2}{\sqrt{3}(a + E_g + Ak^2)} + R \right] \frac{d}{dz} \left\{ \left(\frac{1}{a - S_- k^2} \right) \frac{d}{dz} \left(\frac{2P^2 V}{3G} + Rk^2 \right) \right\} - \frac{P^2 k^2}{2(a + E_g + Ak^2)} \\ - \left[\frac{P^2}{\sqrt{3}(a + E_g + Ak^2)} + R \right] \left[\frac{k^2}{4(a - S_- k^2)} \right] \left(\frac{2P^2 V}{3G} + Rk^2 \right) - S_+ k^2 + U(z) \quad (4.60)$$

y el coeficiente de los términos fuera de la diagonal está dado explícitamente por

$$\alpha(\varepsilon, z, k) = \frac{1}{2} \left[\frac{P^2}{\sqrt{3}(a + E_g + Ak^2)} + R \right] \left(\frac{2P^2V}{3G} + Rk^2 \right) \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{a - S_- k^2} \right) \quad (4.61)$$

donde se ha definido

$$G = (a + E_g)R + ARk^2 + \frac{P^2}{\sqrt{3}} \quad V(\varepsilon, z, k) = a - S_+ k^2 + \frac{\sqrt{3}Rk^2}{2} \quad (4.62)$$

Refiérase a la ecuación (3.22) para la definición de los parámetros $S_{\pm}$, R , A y a

Hamiltoniano de Rashba con constantes de acoplamiento

Al realizar una estimación del Hamiltoniano (4.6) para el modelo de Luttinger-Kohn extendido (es decir, con el parámetro de acoplamiento definido en 4.61), es posible obtener el Hamiltoniano de Rashba con constantes de acoplamiento independientes de la energía, similar a (4.47), con parámetros de acoplamiento para el caso 1 ($k \ll k_c^{hp}$) dados por

$$\alpha_{hp} = eE \frac{P^2}{3\xi(\xi + E_g)} \quad (4.63)$$

$$\beta_{hp} = eE \left\{ -\frac{P^2(2\xi + E_g)}{3\xi(\xi + E_g)^2 (k_c^{hp})^2} + \frac{P^2}{3\xi^2(\xi + E_g)} \left(S_+ + \frac{R}{\sqrt{3}} \right) + \frac{R^2}{\xi^2} - \frac{AP^2}{3\xi(\xi + E_g)^2} \right\} \quad (4.64)$$

con el vector de onda crítico k_c^{hp} definido ahora por

$$k_c^{hp} = \sqrt{\frac{3E_g \xi}{(2P^2 + 3E_g S_+)}} \quad (4.65)$$

y el valor de ξ dado por (4.53). Al comparar el coeficiente α_{hp} (4.63) obtenido utilizando el modelo de Luttinger-Kohn extendido con el coeficiente α_{hp} (4.48) obtenido utilizando el modelo de Kane, notamos que ambos son idénticos y por tanto, el valor de α_{hp} no depende de los parámetros de Luttinger. Los coeficientes α_{hp} y β_{hp} para el caso 2 ($k \sim k_c^{hp}$), así como el coeficiente semiexacto, resultan algebraicamente demasiado extensos, por lo que no serán presentados aquí.

Dispersión y bandas de desdoblamiento

La dispersión de huecos pesados para el modelo de Luttinger-Kohn extendido calculada utilizando teoría de perturbaciones para estados degenerados a cero orden es

$$\varepsilon_{\pm}^{hp}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} k^2 \pm (\alpha_{hp} k + \beta_{hp} k^3) \quad (4.66)$$

con

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} \equiv \frac{2P^2}{3E_g} + S_+ \quad (4.67)$$

además de α_{hp} y β_{hp} definidos en (4.63) y (4.64). De la dispersión (4.66), el desdoblamiento obtenido es similar a (4.55).

En el capítulo 6 se mostrará una estimación de los valores de las constantes de acoplamiento de huecos pesados y se compararán con los valores obtenidos utilizando el modelo de Kane. Nótese que al hacer $\gamma = \gamma_1 = A = 0$ ⁵, se recuperan los resultados obtenidos mediante el modelo de Kane.

⁵Es decir, al ignorar la degeneración entre las bandas de hueco ligero y hueco pesado, y la interacción de éstas y la banda de conducción con el resto de las demás bandas.

Capítulo 5

Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros

En este capítulo se desarrollará el Hamiltoniano para los huecos ligeros dentro del modelo de Kane y Luttinger-Kohn extendido, utilizando un procedimiento similar al empleado para resolver el caso de los huecos pesados; análogamente al caso de éstos últimos, se verá que el Hamiltoniano de Rashba exacto de huecos ligeros también depende de la energía, la posición y el vector de onda. Así, tal y como se hizo en el capítulo anterior, se hará una expansión en series del Hamiltoniano exacto para huecos ligeros con el fin de obtener parámetros independientes de la energía y expresiones analíticas simples que faciliten la interpretación de las dispersiones electrónicas y desdoblamientos de espín.

5.1 Hamiltoniano para Huecos Ligeros: Modelo de Kane

De manera análoga al caso de los huecos pesados, al proyectar el Hamiltoniano (3.17) hacia los estados de la subbanda de huecos ligeros, desacoplando las funciones envolvente (f_4, f_5) , se obtiene la ecuación matricial:

$$\begin{bmatrix} H_0 & -\alpha(\varepsilon, z, k)k_- \\ -\alpha(\varepsilon, z, k)k_+ & H_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} |f_4\rangle \\ |f_5\rangle \end{bmatrix} = \varepsilon \begin{bmatrix} |f_4\rangle \\ |f_5\rangle \end{bmatrix}, \quad (5.1)$$

con

$$H_0 = U(z) + \frac{2P^2}{3} \frac{d}{dz} \left\{ \left[\frac{1}{W(\varepsilon, z, k)} \right] \frac{d}{dz} \right\} - \frac{P^2 k^2}{6} \left[\frac{1}{W(\varepsilon, z, k)} \right], \quad (5.2)$$

$$\alpha(\varepsilon, z, k) = \left(\frac{P^2}{3} \right) \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{W(\varepsilon, z, k)} \right], \quad (5.3)$$

y

$$W(\varepsilon, z, k) = U(z) + E_g - \varepsilon - \frac{P^2 k^2}{2[U(z) - \varepsilon]} \quad (5.4)$$

La ecuación (5.1) se puede expresar de manera compacta como

$$(H_0 + H_{SO})|\psi\rangle = \varepsilon|\psi\rangle \quad (5.5)$$

donde

$$|\psi\rangle = |f_4, \uparrow\rangle + |f_5, \downarrow\rangle, \quad (5.6)$$

y

$$\boxed{H_{so} = -\alpha(\varepsilon, z, k)[k_- \sigma_+ + k_+ \sigma_-]} \quad (5.7)$$

con σ_+ y σ_- definidas como en (4.7). La ecuación (5.1) es una ecuación exacta en la que no se ha considerado ningún tipo de aproximación. Sin embargo, al igual que para el caso de los huecos pesados, la ecuación (5.1) no es una ecuación de Schrödinger, ya que el Hamiltoniano depende explícitamente de la energía; tal dependencia se observa claramente en el término $W(\varepsilon, z, k)$ definido en (5.4). Por otro lado, el coeficiente $\alpha(\varepsilon, z, k)$ no sólo depende de la energía y posición, sino también del vector de onda k . Con el fin de analizar la física relevante y obtener una visión cualitativa de los resultados que se tienen hasta el momento, definamos la función

$$g(\delta, \lambda) \equiv \frac{1}{W(\varepsilon, z, k)}$$

donde como ya se mencionó $\delta = \frac{U(z) - \varepsilon}{E_g}$, y $\lambda \equiv \frac{Pk}{\sqrt{2}E_g}$. Explícitamente

$$g(\delta, \lambda) = \frac{1}{E_g} \left(1 + \delta - \frac{\lambda^2}{\delta} \right)^{-1}$$

Haremos una expansión en serie de Taylor (de una función de dos variables) alrededor de $\delta = \delta_0$ y $\lambda = \lambda_0 = 0$ ¹, donde δ_0 es una constante, y luego tomaremos el límite cuando $\delta_0 \rightarrow 0$. En éste punto debemos remarcar que para semiconductores típicos

$k_F \ll \frac{\sqrt{2}E_g}{P}$, por lo que $\lambda \ll 1$ es una excelente aproximación.

Así pues, expandiendo la ecuación (5.1) a cero orden obtenemos

$$\left\{ U - \varepsilon_0 - \frac{P^2}{6E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \right\} |f_{4,5}\rangle = 0 \quad (5.8)$$

A orden cero en la expansión, el valor de $\alpha(\varepsilon, z, k)$ se vuelve nulo, de modo tal que el término fuera de la diagonal contribuye a partir del primer orden en δ . El término dominante en la serie es a primer orden en δ . Entonces, expandiendo $\alpha(\varepsilon, z, k)$ en serie a primer orden se obtiene para H_{SO}

$$H_{SO} = -\alpha_{hl} [k_- \sigma_+ + k_+ \sigma_-] \quad (5.9)$$

¹ Por ejemplo:

$$\begin{aligned} g(\delta, \lambda) &= g(\delta_0, \lambda_0) + (\delta - \delta_0) \frac{d}{d\delta} g(\delta, \lambda) \Big|_{(\delta, \lambda) = (\delta_0, \lambda_0)} + (\lambda - \lambda_0) \frac{d}{d\lambda} g(\delta, \lambda) \Big|_{(\delta, \lambda) = (\delta_0, \lambda_0)} + \dots \\ &= \frac{1}{E_g(1 + \delta_0)} - \frac{\delta - \delta_0}{E_g(1 + \delta_0)^2} + O[(\delta - \delta_0)^2, \lambda^2, (\delta - \delta_0)\lambda] \end{aligned}$$

donde α_{hl} es simplemente (el subíndice *hl* denota *hueco ligero*)

$$\boxed{\alpha_{hl} = \frac{P^2}{3E_g^2} eE} \quad , \quad (5.10)$$

y se ha utilizado una vez más $\frac{d}{dz}U(z) = \frac{d}{dz}(-eEz) = -eE$. Claramente la ecuación (5.1)

se reduce a una ecuación de eigenvalores con el Hamiltoniano dado por

$$H = H_0 + H_{SO} \quad , \quad (5.11)$$

donde

$$H_0 = U(z) - \frac{P^2}{6E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \quad , \quad (5.12)$$

mientras que H_{SO} (identificado *a posteriori* como el Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros) está descrito por (5.9); además H_{SO} es independiente de la energía (al igual que H_0) y está compuesto por un término lineal en k , tal y como fue propuesto por Gerchikov y Subashiev [36] y Winkler et al. [62], pero a diferencia de los trabajos [36] y [62], el modelo de Kane nos permite obtener una expresión analítica simple para la constante de acoplamiento, la cual depende sólo de los parámetros del semiconductor.

5.2 Dispersiones para huecos ligeros

Al igual que para huecos pesados, las dispersiones de huecos ligeros se obtendrán a través de teoría de perturbaciones para estados degenerados (sección 5.2.1) y a través de método variacional (sección 5.2.2). De igual forma, se modela la heteroestructura que produce el sistema de huecos de dos dimensiones (SH2D) como un pozo triangular infinito que, como ya se mencionó, no es un modelo realista pero permite extraer información cualitativa y útil del comportamiento de la relación de dispersión.

5.2.1 Dispersión para huecos ligeros: Teoría de perturbaciones

Siguiendo un procedimiento similar al caso de los huecos pesados, supóngase de nuevo que la contribución de H_{so} (dada por la expresión 5.9) a la energía de los huecos ligeros es suficientemente pequeña, de modo que pueda ser incorporada como una perturbación a H_0 . Para el caso no perturbado, de la ecuación (5.12) se tiene la eigenecuación

$$\left[U(z) - \frac{P^2}{6E_g} k^2 + \frac{2P^2}{3E_g} \frac{d^2}{dz^2} \right] |f_{hl}, \sigma\rangle = \varepsilon |f_{hl}, \sigma\rangle \quad (5.13)$$

donde ε_0 es la energía para el sistema no perturbado, con las definiciones $|f_{hl}, \uparrow\rangle = |f_4\rangle$ y

$$|f_{hl}, \downarrow\rangle = |f_5\rangle$$

Si definimos

$$\bar{\varepsilon}_{hl}(k) = -\varepsilon_0 - \frac{P^2}{6E_g} k^2 \quad (5.14)$$

notamos que la solución a (5.13) para la función envolvente está dada por la función de Airy (ver Apéndice A):

$$f_{hl}(z) = N_{hl}^f Ai \left\{ \left(\frac{3E_g}{2P^2} \right)^{1/3} \left[\frac{eEz - \bar{\varepsilon}_{hl}(k)}{(eE)^{2/3}} \right] \right\} \quad (5.15)$$

donde N_{hl}^f es una constante de normalización. De la condición a la frontera

$f_{hl}(z=0) = 0$, se debe satisfacer:

$$\bar{\varepsilon}_{hl}(k) = C_n \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_0} \right]^{1/3}; \quad n = 1, 2, 3.. \quad (5.16)$$

Por tanto, para el estado base ($C_1 = 2.338$)

$$\varepsilon_0^{hl} = -3\xi - \frac{P^2}{6E_g} k^2 \quad (5.17)$$

donde, como ya se mencionó en el capítulo anterior, $\xi = \frac{2.338}{3} \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3}$. Al

normalizar la función envolvente (5.15) se obtiene, para el estado base

$$N_{hl}^f = 1.42 \left(\frac{3E_g eE}{2P^2} \right)^{1/6}.$$

De teoría de perturbaciones para estados degenerados a orden cero, se tiene el sistema de ecuaciones (4.29), donde ε_0 está dada por (5.17) y H_{so} está dado por (5.9).

Debido a las relaciones (4.30), se puede notar que $(H_{so})_{\uparrow\uparrow} = (H_{so})_{\downarrow\downarrow} = 0$ y

$$(H_{so})_{\uparrow\downarrow} = -\alpha_{hl} k_- \quad (H_{so})_{\downarrow\uparrow} = -\alpha_{hl} k_+ \quad (5.18)$$

con α_{hl} definida en (5.10). Insertando estos resultados en el sistema matricial (4.31), se puede obtener una forma simple para las dispersiones, las cuales están dadas por

$$\boxed{\varepsilon_{\pm}^{hl}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hl}^*} k^2 \pm \alpha_{hl} k} \quad (5.19)$$

con

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hl}^{ef}} \equiv \frac{P^2}{6E_g} \quad (5.20)$$

y eigenvectores dados simplemente por

$$|\varepsilon_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(k_x - ik_y)^2 + k^2}} \begin{bmatrix} (k_x - ik_y) \\ \pm k \end{bmatrix} \quad (5.21)$$

Nótese una vez más que el término H_{so} definido en (5.9) rompe la degeneración de los estados, obteniéndose una banda ε_+ y una ε_- . El desdoblamiento de las bandas $\Delta\varepsilon$ es formalmente similar al de los electrones,

$$\boxed{\Delta\varepsilon = \varepsilon_+ - \varepsilon_- = 2\alpha_{hl}k} \quad (5.22)$$

Ahora es posible identificar a H_{so} como el Hamiltoniano de acoplamiento Rashba de los huecos ligeros y a α_{hl} como el parámetro de desdoblamiento. La forma analítica de la dispersión (5.19) y el desdoblamiento (5.22) es similar al caso de los electrones (refiérase a la nota de pie de página de la sección **4.2.1**, pág. 86). En el siguiente capítulo se hará una estimación numérica de valores de α_{hl} y se comparará para diversos materiales semiconductores. Además se presentarán gráficas de la dispersión (5.19) y el desdoblamiento (5.22)

5.2.2 Método variacional

De nueva cuenta, utilizando la función de prueba de Fang-Howard (4.36) se obtiene una ecuación matricial similar a (4.37) donde ahora

$$\varepsilon_0 = \langle f_\sigma | H_0 | f_\sigma \rangle = -\frac{3eE}{b} - \frac{P^2}{6E_g} k^2 - \frac{2P^2}{3E_g} \left(\frac{b}{2} \right)^2 \quad (5.23)$$

$$(H_{so})_{\uparrow\uparrow} = (H_{so})_{\downarrow\downarrow} = 0$$

$$(H_{so})_{\uparrow\downarrow} = -\alpha_{hl} k_- \quad (5.24)$$

$$(H_{so})_{\downarrow\uparrow} = -\alpha_{hl} k_+$$

con H_{so} dado por (5.9), α_{hl} por (5.10), y H_0 por (5.12). Al resolver para la energía ε obtenemos

$$\varepsilon_{\pm}^{hl}(k, b) = \varepsilon^{hl}(k=0) - \frac{\hbar^2}{2m_{hl}^*} k^2 \pm \alpha_{hl} k \quad (5.25)$$

con

$$\varepsilon^{hl}(k=0) = -\frac{3eE}{b} - \frac{2P^2}{3E_g} \left(\frac{b}{2} \right)^2, \quad (5.26)$$

y

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hl}^{ef}} \equiv \frac{P^2}{6E_g} \quad (5.27)$$

Para obtener el valor del parámetro variacional b , minimizamos (5.25) respecto b , obteniéndose $b = \sqrt[3]{\frac{9E_g eE}{2P^2}}$, el cual es el mismo valor que para el caso de huecos pesados.

Sustituyendo el valor del parámetro variacional b en (5.26) obtenemos

$$\varepsilon^{hl}(k=0) = -2.6 \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right] \approx -\frac{10}{3} \xi \quad (5.28)$$

Salvo por el valor $\varepsilon(k=0)$ (que corresponde al cero de la energía en la dispersión) la dispersión (5.19) obtenida utilizando teoría de perturbaciones y la dispersión (5.25) obtenida utilizando método variacional son idénticas. El desdoblamiento en este caso es idéntico a (5.22).

5.2 Resumen de Resultados

A continuación se resumen los resultados importantes obtenidos en este capítulo utilizando el modelo de Kane.

Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros (exacto)

$$H_{SO} = -\alpha(\varepsilon, z, k) [k_- \sigma_+ + k_+ \sigma_-] \quad (5.29)$$

Parámetro de acoplamiento espín-órbita (exacto)

$$\alpha(\varepsilon, z, k) = \left(\frac{P^2}{3} \right) \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{W(\varepsilon, z, k)} \right] \quad (5.30)$$

con

$$W(\varepsilon, z, k) = U(z) + E_g - \varepsilon - \frac{P^2 k^2}{2[U(z) - \varepsilon]} \quad (5.31)$$

***Hamiltoniano de Rashba para huecos ligeros
(independiente de la energía, posición y vector de onda)***

$$H_{SO} = -\alpha_{hl} [k_- \sigma_+ + k_+ \sigma_-] \quad (5.32)$$

Constante de acoplamiento espín-órbita

$$\alpha_{hl} = \frac{P^2}{3E_g^2} eE \quad (5.33)$$

Bandas de dispersión

$$\varepsilon_{\pm}^{hl}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hl}^*} k^2 \pm \alpha_{hl} k \quad (5.34)$$

$$\xi = \frac{2.338}{3} \left[\frac{2(PeE)^2}{3E_g} \right]^{1/3} \quad (5.35)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hl}^{ef}} \equiv \frac{P^2}{6E_g} \quad (5.36)$$

Desdoblamiento de las bandas

$$\Delta\varepsilon^{hl}(k) = \varepsilon_+^{hl} - \varepsilon_-^{hl} = 2\alpha_{hl} k \quad (5.37)$$

5.3 Hamiltonianos de Rashba para huecos ligeros: Modelo de Luttinger-Kohn extendido.

El procedimiento para el cálculo de los Hamiltonianos de Rashba y las dispersiones de huecos utilizando el modelo de Luttinger-Kohn extendido, es el mismo que se aplicó en las secciones anteriores utilizando el modelo de Kane. A continuación

se muestra el resumen de los resultados que se obtienen partiendo de la matriz Hamiltoniana de Luttinger-Kohn (3.21)

Hamiltoniano (exacto)

Al desacoplar el sistema de ecuaciones (3.21) a favor de la función envolvente de huecos ligeros y reacomodar la ecuación desacoplada como una ecuación matricial tipo Schrödinger, se obtiene una ecuación matricial análoga a (5.1), pero ahora con H_0 dado por

$$H_0 = U(z) - S_- k^2 + \frac{d}{dz} \left\{ \left(\frac{2P^2}{3M} + \frac{R^2 k^2}{N} \right) \frac{d}{dz} \right\} - \frac{k^2}{4} \left(\frac{2P^2}{3M} + \frac{R^2 k^2}{N} \right) \quad (5.38)$$

y el coeficiente de los términos fuera de la diagonal está dado explícitamente por

$$\alpha(\varepsilon, z, k) = \frac{1}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{2P^2}{3M} + \frac{R^2 k^2}{N} \right) \quad (5.39)$$

donde

$$M = a + E_g + Ak^2 - \frac{\sqrt{3}Gk^2}{2V} \quad N = a - S_+ k^2 - \frac{P^2 V}{\sqrt{3}G} \quad (5.40)$$

con G y V definidas en (4.62)

Hamiltoniano de Rashba con constantes de acoplamiento independientes de la energía

Al realizar una estimación del Hamiltoniano (5.7) para el modelo de Luttinger-Kohn extendido (es decir, con el parámetro de acoplamiento definido en 5.39), es posible obtener el Hamiltoniano de Rashba con constantes de acoplamiento independientes de la energía

$$H_{SO} = -\alpha_{hl} [k_- \sigma_+ + k_+ \sigma_-] \quad (5.41)$$

con constante de acoplamiento.

$$\alpha_{hl} = \frac{p^2}{3E_g^2} eE \quad (5.42)$$

Al comparar el coeficiente α_{hl} (5.42) obtenido utilizando el modelo de Luttinger-Kohn extendido con el coeficiente α_{hl} (5.33) obtenido utilizando el modelo de Kane, notamos que ambos son idénticos entre sí y por tanto, el valor de α_{hl} no dependen de los parámetros de Luttinger.

Dispersión

Utilizando teoría de perturbaciones para estados degenerados a cero orden, la dispersión de huecos ligeros es de la forma

$$\varepsilon_{\pm}^{hl}(k) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hl}^*} k^2 \pm \alpha_{hl} k \quad (5.43)$$

con

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hl}^{ef}} \equiv \frac{P^2}{6E_g} + S_- \quad (5.44)$$

y el desdoblamiento es idéntico a (5.37).

En el siguiente capítulo se realizará una estimación numérica de los valores de las constantes de acoplamiento tanto de huecos pesados como de huecos ligeros y se compararán con los valores obtenidos utilizando el modelo de Kane. Nótese que al hacer $\gamma = \gamma_1 = A = 0$, se recuperan los resultados obtenidos mediante el modelo de Kane.

Capítulo 6

Discusión de los resultados

En el presente capítulo se discutirán los resultados obtenidos en los dos capítulos anteriores (capítulos 4 y 5). Se presentarán y discutirán gráficas de las dispersiones obtenidas tanto en el modelo de Kane como en el modelo de Luttinger-Kohn extendido, y se hará un comparativo entre ellas para ambos huecos: pesados (sección 6.1) y ligeros (sección 6.2). También se presentarán gráficas de los desdoblamientos en función de k y en función de la densidad de huecos n_s , así como estimaciones de las constantes de acoplamiento Rashba de huecos ligeros y huecos pesados para semiconductores típicos. En el apéndice C se listan los parámetros de bulto de los semiconductores utilizados para generar dichas gráficas.

6.1 Huecos pesados.

Utilizando teoría $\mathbf{k}, \mathbf{p}$ de masa efectiva dentro del formalismo de la función envolvente, se dedujo un Hamiltoniano para los huecos pesados y ligeros, así como sus dispersiones (capítulo 4). En particular se demostró que para los huecos pesados, las dispersiones deben seguir la fórmula (ecn. 4.52):

$$\varepsilon_{\pm}^{hp}(k_x, k_y) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hp}^*} (k_x^2 + k_y^2) \pm \left[\alpha_{hp} (k_x^2 + k_y^2)^{1/2} + \beta_{hp} (k_x^2 + k_y^2)^{3/2} \right]$$

que es la ecuación (4.52). Con la finalidad de resaltar los rasgos esenciales de las dispersiones para una heteroestructura, primeramente en la figura 6.1 se muestra una representación esquemática tridimensional de la dispersión $\varepsilon_{\pm}^{hp}(k_x, k_y)$ de los huecos pesados, vista desde diferentes perspectivas (figuras 6.1 a – 6.1 c) y una representación bidimensional de la dispersión $\varepsilon_{\pm}^{hp}(k)$ (figura 6.1 d), para valores arbitrarios (con fines didácticos) de los parámetros de acoplamiento espín-órbita y del material.

En la figura 6.2 se muestra la dispersión real de los huecos pesados para una heteroestructura basada en *InSb*, considerando una densidad uniforme de huecos de $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. A ésta densidad el correspondiente vector de onda de Fermi tiene un valor de $k_F = \sqrt{2\pi n_s} = 0.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Las gráficas mostradas corresponden a la dispersión (4.52) obtenida con el modelo de Kane, tanto para el caso 1 (donde α_{hp} y β_{hp} están dadas por 4.48 y 4.49), como para el caso 2 (donde α_{hp} y β_{hp} están dadas por 4.50 y 4.51), así como la dispersión (4.58) que corresponde al caso semiexacto. Puede verse que la curva correspondiente al caso 1 (color rojo) se asemeja al caso semiexacto (color verde) para valores pequeños del vector de onda k . Para valores de k del orden de k_F , la curva correspondiente al caso 2 (color azul) es la que posee mayor semejanza a la curva del caso semiexacto. También es posible observar que las bandas ε_+ y ε_- del caso semiexacto tienden a cruzarse, lo que nos indica una reducción del desdoblamiento a medida que el vector de onda crece. En la misma figura se muestra el valor del desdoblamiento en $k = k_F$ calculado utilizando el caso semiexacto, así como el valor de

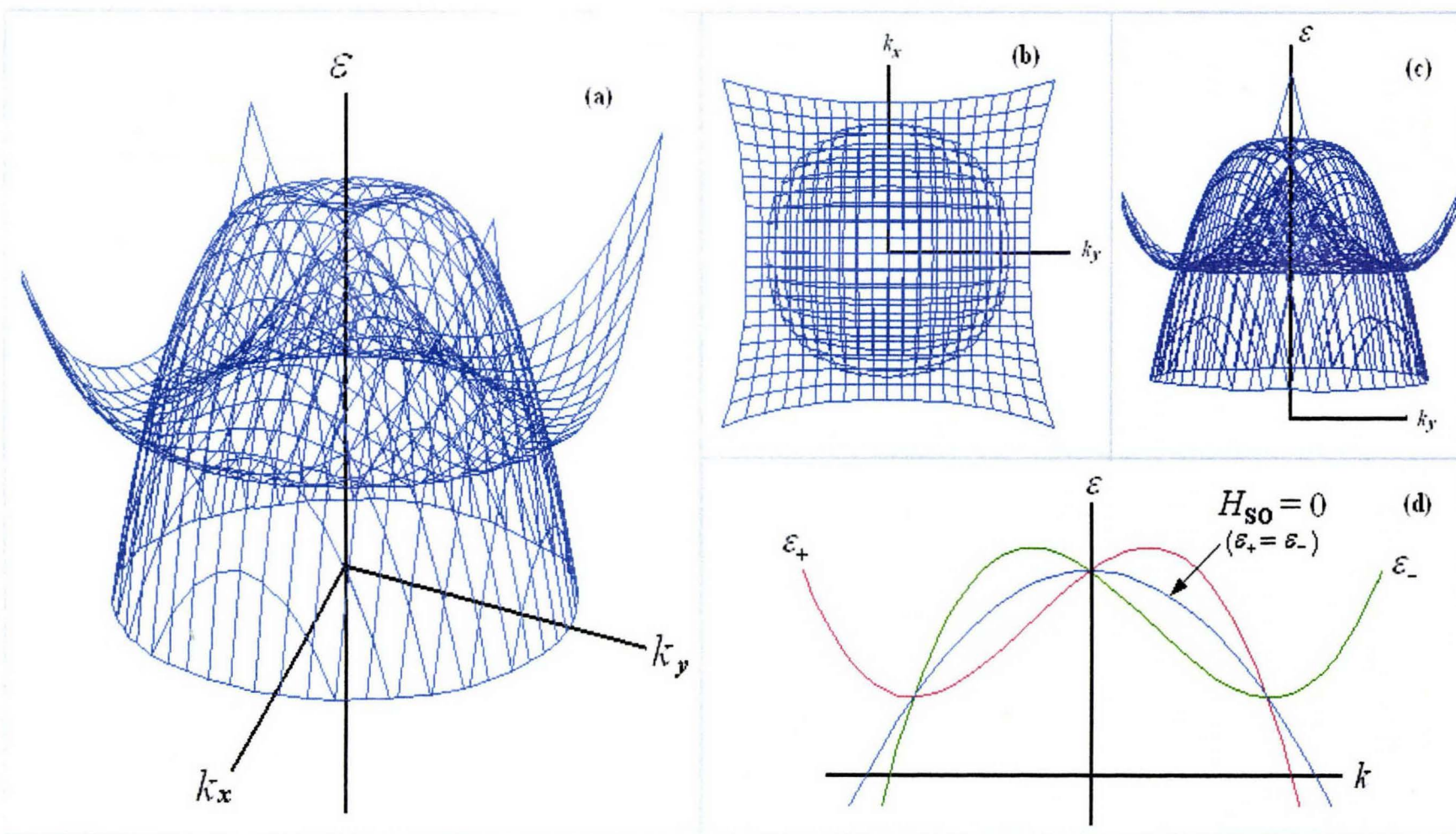


Figura 6.1 Representación esquemática tridimensional de la dispersión de los huecos pesados $\varepsilon(k_x, k_y)$ (ecuación 4.52) vista desde diferentes perspectivas (figuras 6.1 a – 6.1 c). Representación esquemática bidimensional, $\varepsilon(k)$ (figura 6.1 d)

k_c^{hp} definida en (4.14) dentro del modelo de Kane, esto para $n_s = 1 \times 10^{11}$ y puede verse que $k_c^{hp} < k_F$ (para *InSb*).

Las figuras 6.3, 6.4 y 6.5 muestran la dispersión de huecos pesados para una heteroestructura basada en *InAs*, *InP* y *GaAs* respectivamente, obtenidas mediante el modelo de Kane. La densidad de huecos utilizada es de $n_s = 1 \times 10^{11}$. Sólo en los casos correspondientes a *InP* y *GaAs* el valor de k_c^{hp} (calculado utilizando la densidad de huecos antes mencionada) resulta menor que k_F . Las gráficas de las dispersiones obtenidas mediante el modelo de Luttinger-Kohn extendido para los tres casos ya mencionados (semiexacto, caso 1 y caso 2) resultan muy similares a las gráficas de las dispersiones obtenidas mediante el modelo de Kane.

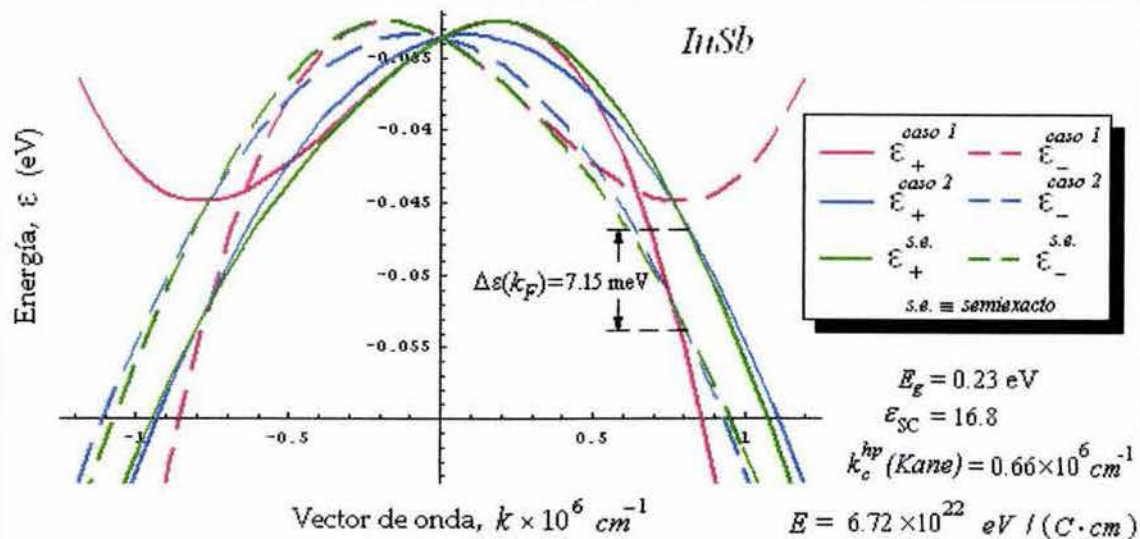


Figura 6.2 Dispersión de huecos pesados, para una heteroestructura basada en *InSb*, obtenida mediante el modelo de Kane para el caso 1 ($k \ll k_c^{hp}$), caso 2 ($k \sim k_c^{hp}$) y semiexacto. Las líneas continuas corresponden a la banda ε_+ y las líneas discontinuas a la banda ε_- . La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. A esta densidad, $k_F = 0.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

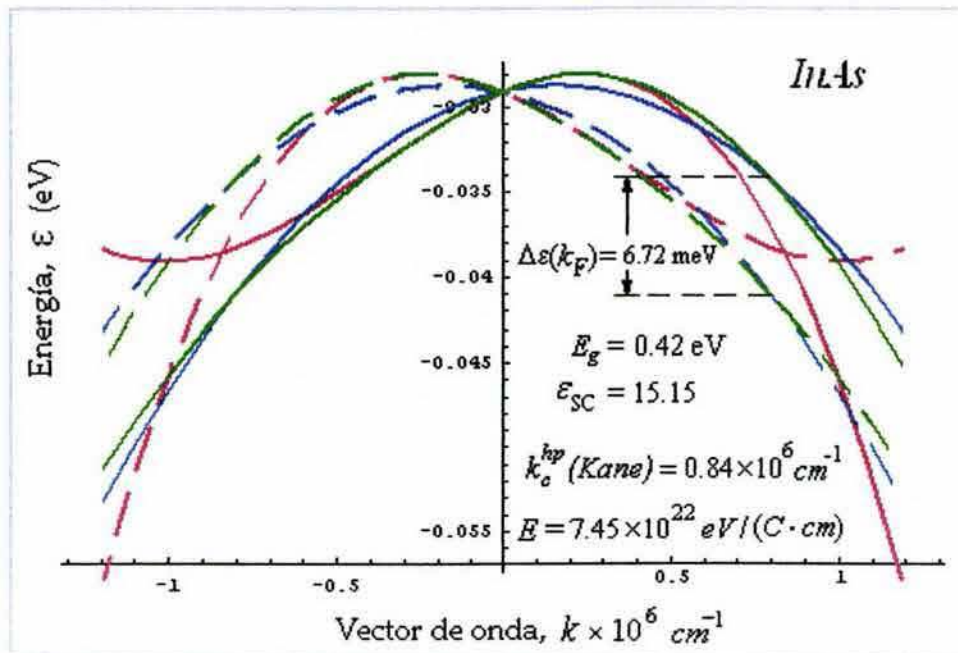


Figura 6.3 Dispersión de huecos pesados, para una heteroestructura basada en *InAs*, obtenida mediante el modelo de Kane para el caso 1 (rojo), caso 2 (azul) y semiexacto (verde). Las líneas continuas corresponden a la banda ε_+ y las líneas discontinuas a la banda ε_- . La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

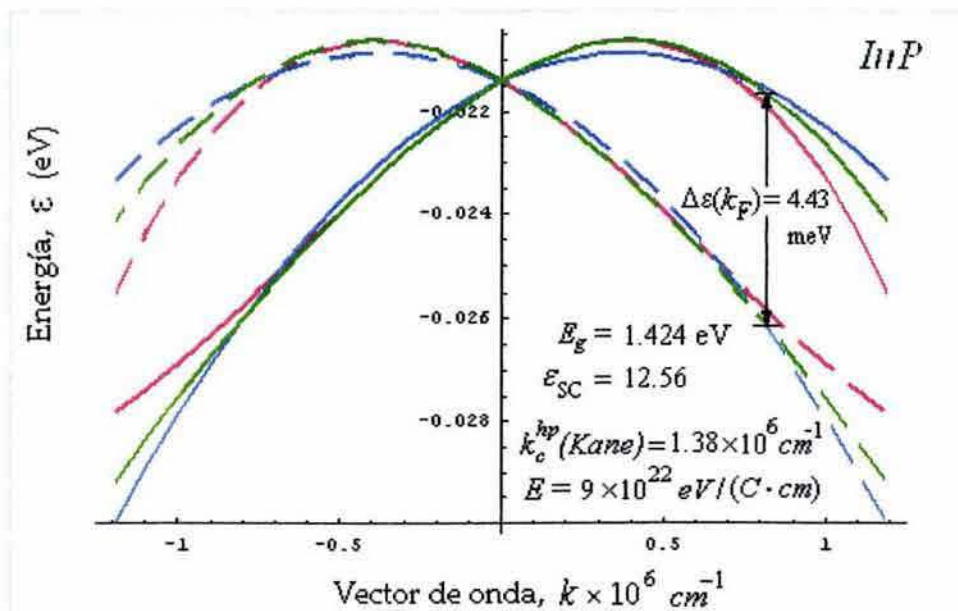


Figura 6.4 Dispersión de huecos pesados, para una heteroestructura basada en *InP*, obtenida mediante el modelo de Kane para el caso 1 (rojo), caso 2 (azul) y semiexacto (verde). Las líneas continuas corresponden a la banda ε_+ y las líneas discontinuas a la banda ε_- . La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

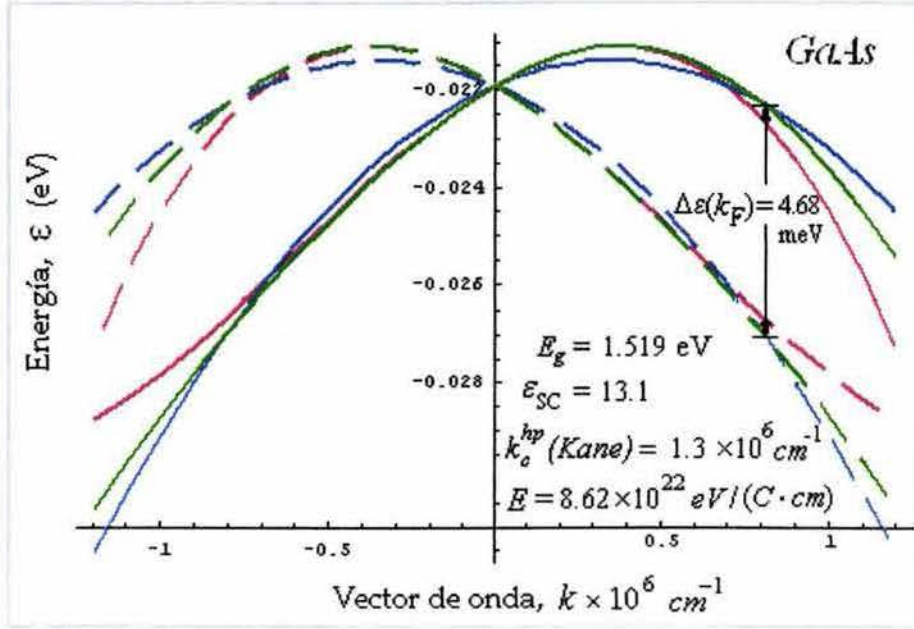


Figura 6.5 Dispersión de huecos pesados, para una heteroestructura basada en *GaAs*, obtenida mediante el modelo de Kane para los casos 1 (rojo), 2 (azul) y semiexacto (verde). Las líneas continuas corresponden a la banda ε_+ y las líneas discontinuas a la banda ε_- . La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

La diferencia en el eje vertical (energía) entre las gráficas anteriores (figuras 6.2 a 6.5) es debida a que el valor de $\varepsilon^{hp}(k=0) = -3\xi$ (ecuación 4.53) depende de los parámetros del material. Por último, contrario a lo que sucede con los electrones, puede verse en las 4 figuras anteriores que las bandas “abren” hacia abajo debido a que la masa efectiva es negativa. En la tabla 6.1 se muestran los valores de las masas efectivas transversales para *InSb*, *InAs*, *InP* y *GaAs*, calculadas mediante las expresiones (4.54) (modelo de Kane) y (4.67) (modelo de Luttinger-Kohn extendido) y se comparan con las conocidas expresiones que se obtienen utilizando el modelo de Luttinger-Kohn de 4×4 [76]. Se aprecia una muy ligera diferencia entre los valores de las masas efectivas transversales calculados utilizando el modelo de Kane y el modelo de Luttinger-Kohn extendido y a su vez éstos concuerdan muy bien con los valores calculados utilizando el modelo de Luttinger-Kohn de 4×4 .

	Modelo de Kane ^a	Modelo de Luttinger-Kohn extendido ^a	Modelo de Luttinger-Kohn de 4×4 ^b
$\frac{m_{hp}^*}{m_0} =$	$\frac{3\hbar^2 E_g}{4m_0 P^2}$	$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2P^2}{3E_g} + S_+ \right)^{-1}$	$\frac{1}{\gamma_1^L + \gamma_2^L}$
<i>InSb</i>	0.014	0.014	0.019
<i>InAs</i>	0.028	0.026	0.035
<i>InP</i>	0.1	0.1	0.151
<i>GaAs</i>	0.088	0.083	0.115

Tabla 6.1 Comparativo de las masas efectivas transversales de huecos pesados, calculadas mediante los modelos de Kane, Luttinger-Kohn extendido y Luttinger-Kohn de 4×4 .

^a Expresión obtenida en el presente trabajo de tesis.

^b Expresión obtenida en la referencia [76].

En la figura 6.6 se muestra el desdoblamiento para el caso semiexacto, en función del vector de onda (ecuación 4.59) para *InSb*, *InAs*, *InP* y *GaAs* a una densidad de huecos de $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En ésta gráfica es posible distinguir tres regiones; dentro de la región I, la cual abarca desde $k = 0$ hasta k cerca de k_F , puede verse que el *InSb* alcanza valores de desdoblamiento mayores en comparación con el resto de los semiconductores mencionados, lo que lo convierte en un candidato ideal para la construcción de dispositivos espintrónicos basados en huecos pesados. Tal energía de desdoblamiento para *InSb* está por encima de 7 meV, el cual es un valor mayor al calculado para electrones (aproximadamente 1 meV) utilizando la expresión para la constante de acoplamiento Rashba de electrones obtenida por de Andrada et al.[39]¹ a la misma

¹ Utilizando el modelo de 6 bandas para electrones, el desdoblamiento está dado como $\Delta \varepsilon^e = \varepsilon_+^e - \varepsilon_-^e = 2\alpha_e k$ con $\alpha_e = \frac{P^2}{3E_g^2} eE$

densidad, mientras que el *InP* es el que presenta energías de desdoblamiento menores, comparadas con los otros tres semiconductores. Nótese que excepto en el caso de *InAs*, el desdoblamiento máximo no ocurre en $k = k_F$. En la región II, las curvas de desdoblamiento comienzan a cruzarse, y en la región III las curvas de desdoblamiento están completamente invertidas respecto a la región I, de modo tal que es ahora el *InP* el que presenta mayor desdoblamiento y el *InSb* muestra la menor energía de desdoblamiento.

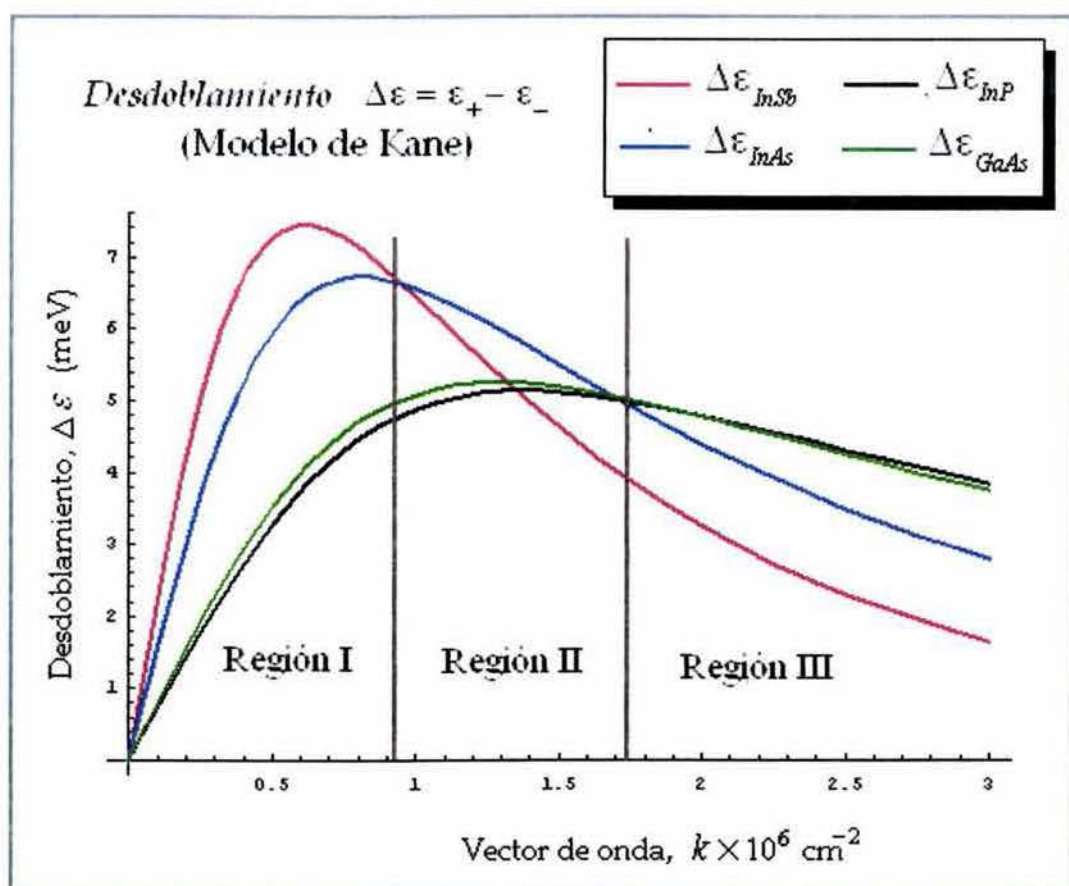


Figura 6.6 Desdoblamiento para huecos pesados como función de k , para: *InSb*, *InAs*, *InP* y *GaAs*. La densidad de huecos utilizada es $n_h = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

En las figura 6.7 y 6.8 se muestra el desdoblamiento como función del vector de onda y de la densidad $\Delta\epsilon(k, n_s) = 2[\alpha_{hp}(n_s) \cdot k + \beta_{hp}(n_s) \cdot k^3]$, para los cuatro semiconductores ya mencionados, dentro del modelo de Kane para el caso 1.

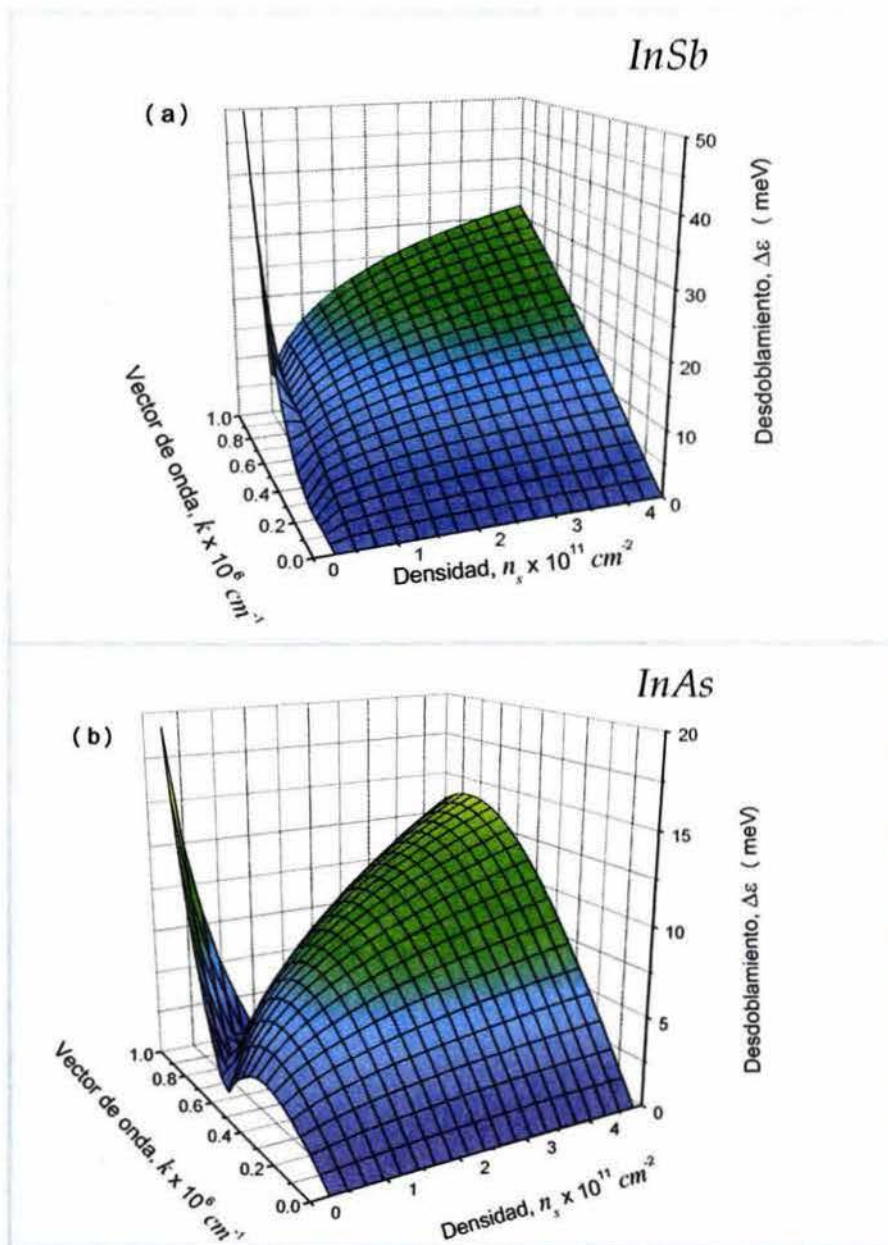


Figura 6.7 Desdoblamiento para huecos pesados en función del vector de onda y de la densidad de huecos $\Delta\epsilon^{hp}(k, n_s)$, obtenida mediante el modelo de Kane para : (a) *InSb*, (b) *InAs*.

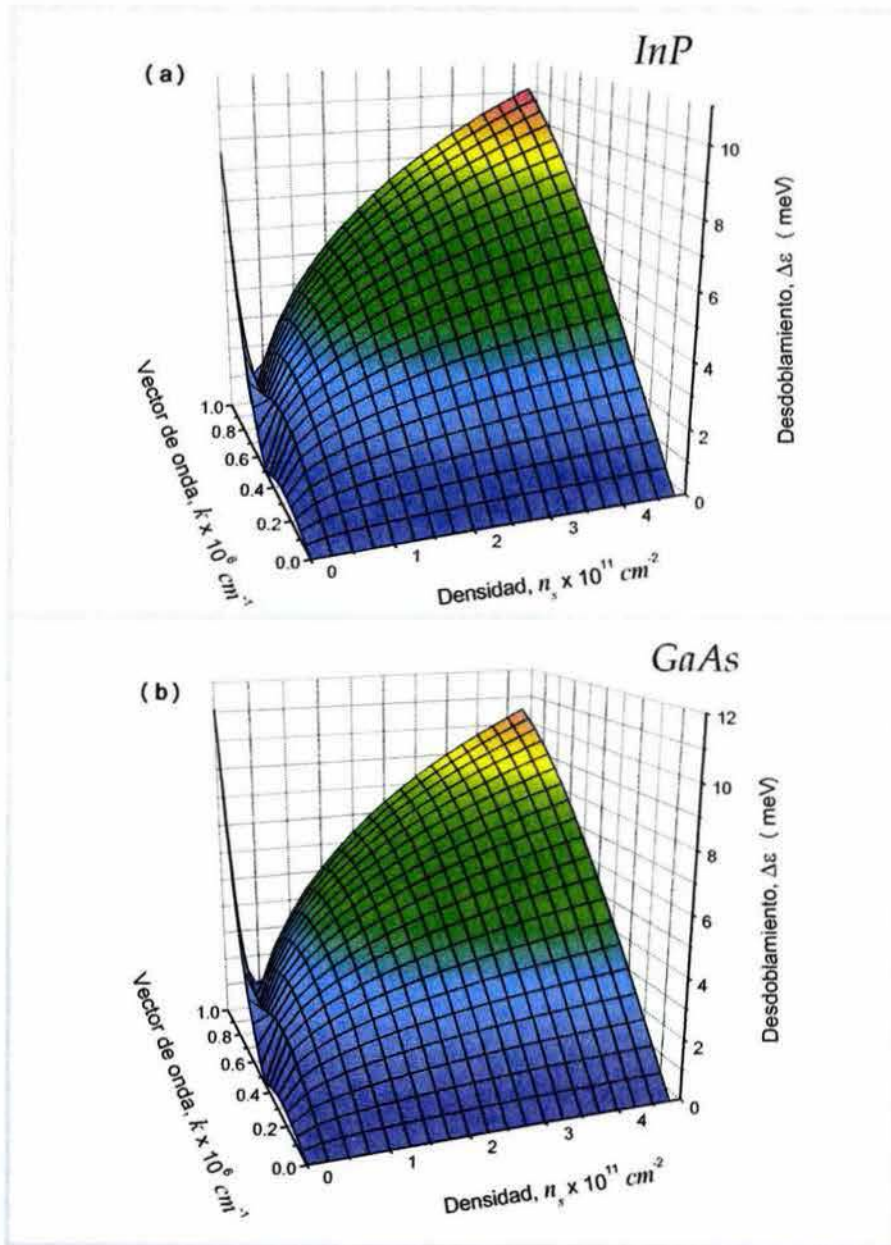


Figura 6.8 Desdoblamiento para huecos pesados en función del vector de onda y de la densidad de huecos $\Delta\epsilon^{hp}(k, n_s)$, obtenida mediante el modelo de Kane para : **(a)** *InP*, **(b)** *GaAs*.

En éstas gráficas (6.7 y 6.8) puede apreciarse que dependiendo de la densidad de huecos, el desdoblamiento puede ser de hasta un orden de magnitud mayor al de los electrones.

También puede apreciarse en la figuras 6.7 y 6.8, que conforme la densidad decrece, el desdoblamiento llega a un mínimo y luego comienza a crecer, esto para un valor finito de k . Puede verse de las expresiones para las constantes de acoplamiento Rashba de huecos pesados para el caso 1 (ecuaciones 4.48 y 4.49), que la constante $\alpha_{hp} \propto n_s^{1/3}$ (ya que $E \propto n_s$ y $\xi \propto n_s^{2/3}$), mientras que $\beta_{hp} \propto n_s^{-1/3}$, por lo que para valores pequeños de n_s , β_{hp} crece asintóticamente, mientras que $\alpha_{hp} \rightarrow 0$, y viceversa. Por esta razón se espera que a densidades pequeñas, el término dominante sea el término cúbico, mientras que a densidades grandes, el término lineal sea el que domine. Éste resultado contrasta con el obtenido (utilizando teoría de invariantes) por Gerchikov y Subashiev [36] y Winkler et al. [62], en el que la contribución al desdoblamiento Rashba para huecos pesados está principalmente dada por un término cúbico en k . Por otro lado, las expresiones del parámetro de acoplamiento obtenidas en ambos trabajos, [36] y [62], son proporcionales a $n_s^{-1/3}$, situación que concuerda con el resultado presentado en el presente trabajo.

En la figura 6.9 se muestra un comparativo de las contribuciones al desdoblamiento del término lineal y el término cúbico como función del vector de onda para diferentes densidades, esto es, considerando sólo el término lineal y sólo el término cúbico. Nótese que a medida que disminuye la densidad, la contribución al desdoblamiento provista por el término cúbico se vuelve cada vez mayor respecto a la contribución del término lineal, corroborando la discusión anterior.

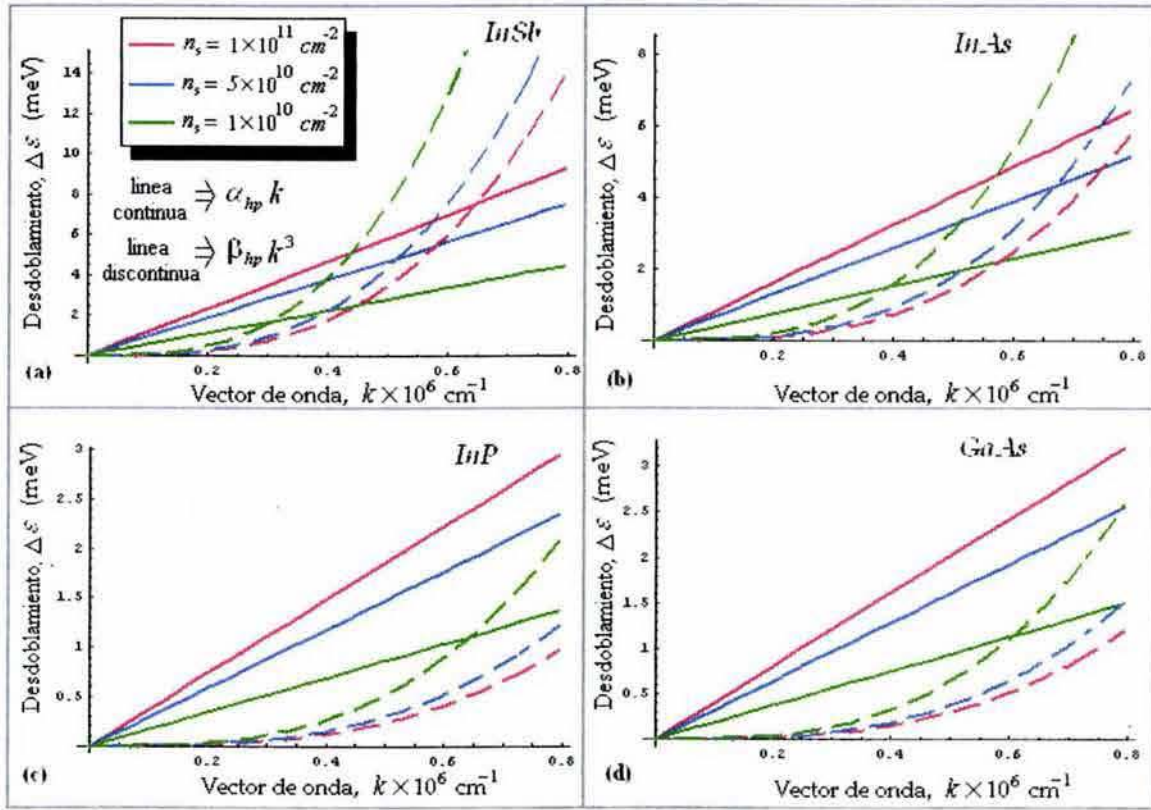


Figura 6.9 Comparativo de las contribuciones al desdoblamiento del término lineal y el término cúbico para huecos pesados a diferentes densidades, obtenidos mediante el modelo de Kane para: *InSb*, *InAs*, *GaAs* e *InP*. Las líneas continuas corresponden al término lineal y las líneas discontinuas corresponden al término cúbico.

$n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	$\alpha_{hp} \times 10^{-10} \text{ eV} \cdot \text{m}$	$\beta_{hp}^{Kane} \times 10^{-26} \text{ eV} \cdot \text{m}^3$	$\beta_{hp}^{l,Ke} \times 10^{-26} \text{ eV} \cdot \text{m}^3$
<i>InSb</i>	1.17	2.8	2.84
<i>InAs</i>	0.8	1.15	1.16
<i>GaAs</i>	0.4	0.24	0.25
<i>InP</i>	0.37	0.19	0.20

Tabla 6.2 Comparativo de los coeficientes de desdoblamiento de huecos pesados calculados utilizando las expresiones (4.48) y (4.49), para una densidad de $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En el caso de electrones, por ejemplo para *InSb* $\alpha_e = 6 \times 10^{-11} \text{ eV} \cdot \text{m}$, mientras que para *GaAs* $\alpha_e = 2 \times 10^{-11} \text{ eV} \cdot \text{m}$ (véase nota al pie de la página 118)

En la Tabla 6.2 se muestran un comparativo de los valores de los coeficientes de desdoblamiento de huecos pesados, calculados utilizando las expresiones correspondientes al caso 1.

6.2 Huecos ligeros.

En la figura 6.10 se muestra una representación esquemática tridimensional de la dispersión (5.34) de los huecos ligeros para una heteroestructura, dada explícitamente por

$$\varepsilon(k_x, k_y) = -3\xi - \frac{\hbar^2}{2m_{hl}^*} (k_x^2 + k_y^2) \pm \alpha_{hl} (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$$

con valores arbitrarios de los parámetros de acoplamiento y del material, vista desde diferentes perspectivas.

En la figura 6.11 se muestra la dispersión, para una heteroestructura basada en *InSb*, obtenida utilizando el modelo de Kane (ecuación 5.34) y el modelo de Luttinger-Kohn (ecuación 5.43) con el mismo valor de densidad que se usó para huecos pesados ($n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), así como los valores de los parámetros de bulto del semiconductor y el valor de λ evaluado en k_F (véase sección 5.1, pág. 99). De igual forma al caso de los huecos pesados, las bandas “abren” hacia abajo, debido a que la masa efectiva es negativa. También para el caso de los huecos ligeros, los valores de la masas efectivas

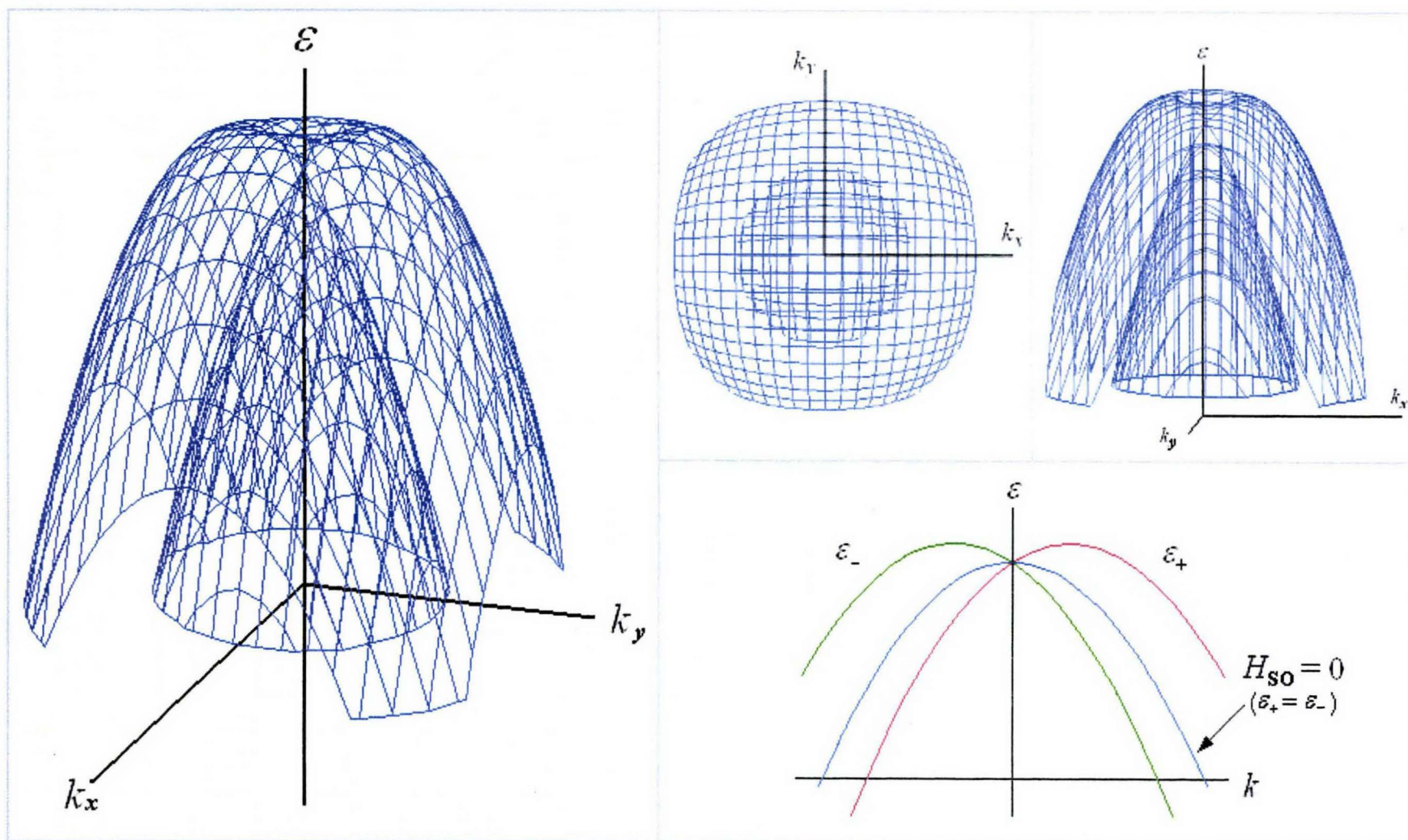


Figura 6.10 Representación esquemática tridimensional de la dispersión de huecos ligeros ϵ, k_x, k_y , (ecuación 5.34) vista desde diferentes perspectivas (figuras 6.10 a - 6.10 c). En la figura (6.10 d) se muestra una representación esquemática bidimensional ϵ, k .

transversales obtenidos utilizando el modelo de Kane y los obtenidos utilizando el modelo de Luttinger-Kohn extendido concuerdan con los valores calculados utilizando el modelo de Luttinger-Kohn de 4×4 . En la tabla 6.3 se muestra un comparativo de dichos valores .

Las figuras 6.12, 6.13 y 6.14 muestran la dispersión de huecos ligeros para una heteroestructura basada en *InAs*, *InP* y *GaAs* respectivamente. La densidad de huecos utilizada es de $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

	Modelo de Kane ^a	Modelo de Luttinger-Kohn extendido ^a	Modelo de Luttinger-Kohn de 4×4 ^b
$\frac{m_{hp}^*}{m_0} =$	$\frac{3\hbar^2 E_g}{m_0 P^2}$	$\frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{P^2}{6E_g} + S_- \right)^{-1}$	$\frac{1}{\gamma_1^L - \gamma_2^L}$
<i>InSb</i>	0.059	0.053	0.051
<i>InAs</i>	0.11	0.08	0.082
<i>InP</i>	0.41	0.34	0.303
<i>GaAs</i>	0.35	0.22	0.204

Tabla 6.3 Comparativo de las masas efectivas transversales de huecos ligeros, calculadas mediante los modelos de Kane, Luttinger-Kohn extendido y Luttinger-Kohn de 4×4

^a Expresión obtenida en el presente trabajo de tesis.

^b Expresión obtenida en la referencia [76].

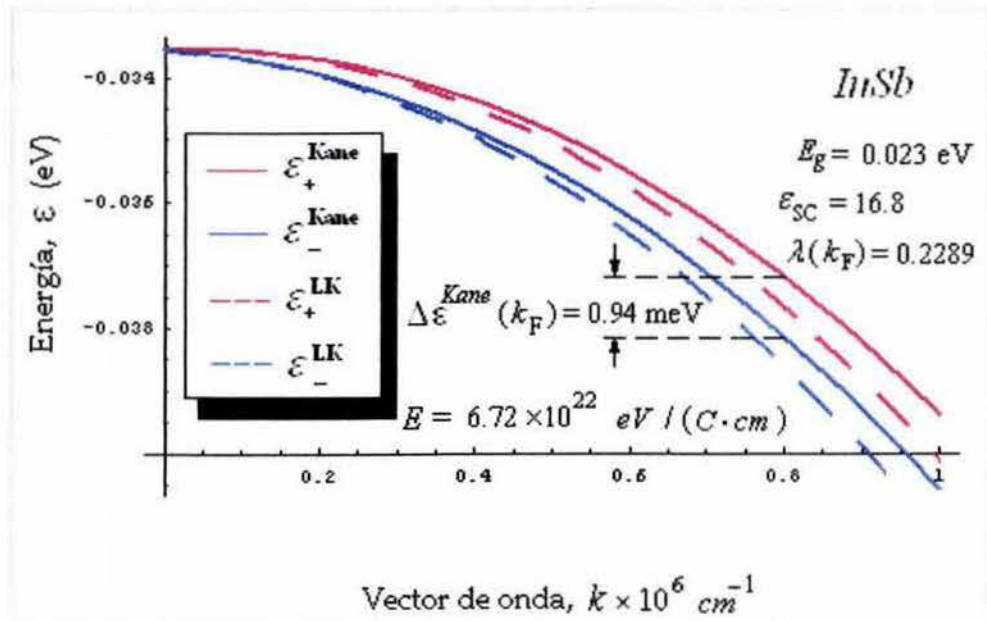


Figura 6.11 Dispersión de huecos ligeros, para una heteroestructura basada en *InSb*, obtenida mediante los modelos de Kane (líneas continuas) y Luttinger-Kohn extendido (líneas discontinuas). La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. A esta densidad, $k_F = 0.8 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

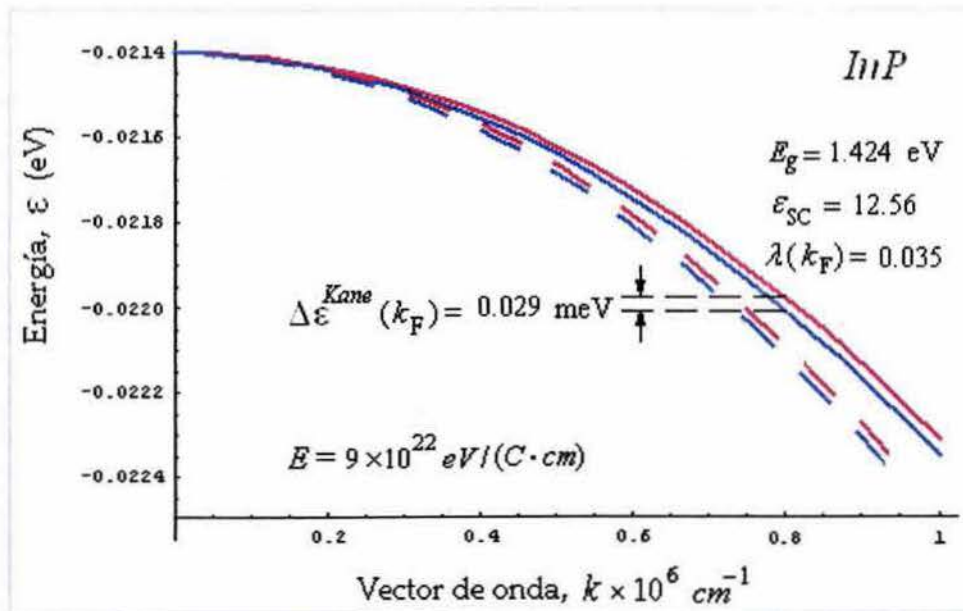


Figura 6.12 Dispersión de huecos ligeros, para una heteroestructura basada en *InP*, obtenida mediante los modelos de Kane (líneas continuas) y Luttinger-Kohn extendido (líneas discontinuas). La densidad de huecos utilizada es $n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

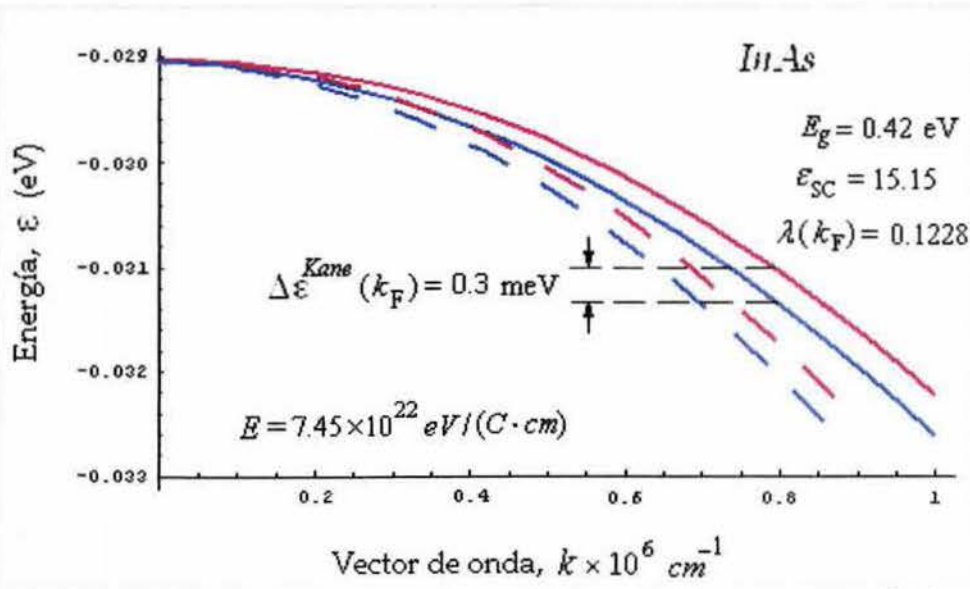


Figura 6.13 Dispersión de huecos ligeros, para una heteroestructura basada en *InAs*, obtenida mediante los modelos de Kane (líneas continuas) y Luttinger-Kohn extendido (líneas discontinuas). La densidad de huecos utilizada es $n_h = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

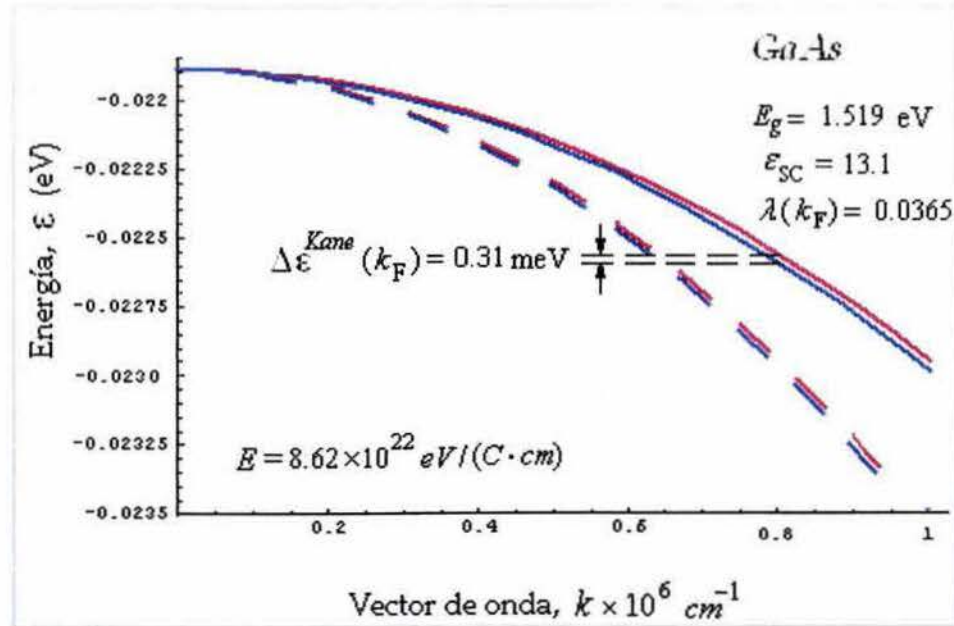


Figura 6.14 Dispersión de huecos ligeros, para una heteroestructura basada en *GaAs*, obtenida mediante los modelos de Kane (líneas continuas) y Luttinger-Kohn extendido (líneas discontinuas). La densidad de huecos utilizada es $n_h = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$.

Como ya se mencionó anteriormente, el desdoblamiento para los huecos ligeros predicho por el modelo de Kane es idéntico al predicho por el modelo de Luttinger-Kohn extendido (ecuación 5.37), ya que las constantes de acoplamiento Rashba para huecos ligeros, son idénticas en ambos modelos (ecuaciones 5.33 y 5.42). En la figura 6.14 se muestra el desdoblamiento para *InSb*, *InAs* y *GaAs* (la correspondiente curva a *InP* queda prácticamente traslapada con la curva de *GaAs*). La magnitud del desdoblamiento de huecos ligeros es similar al de los electrones (de 0.1 a 1 meV).

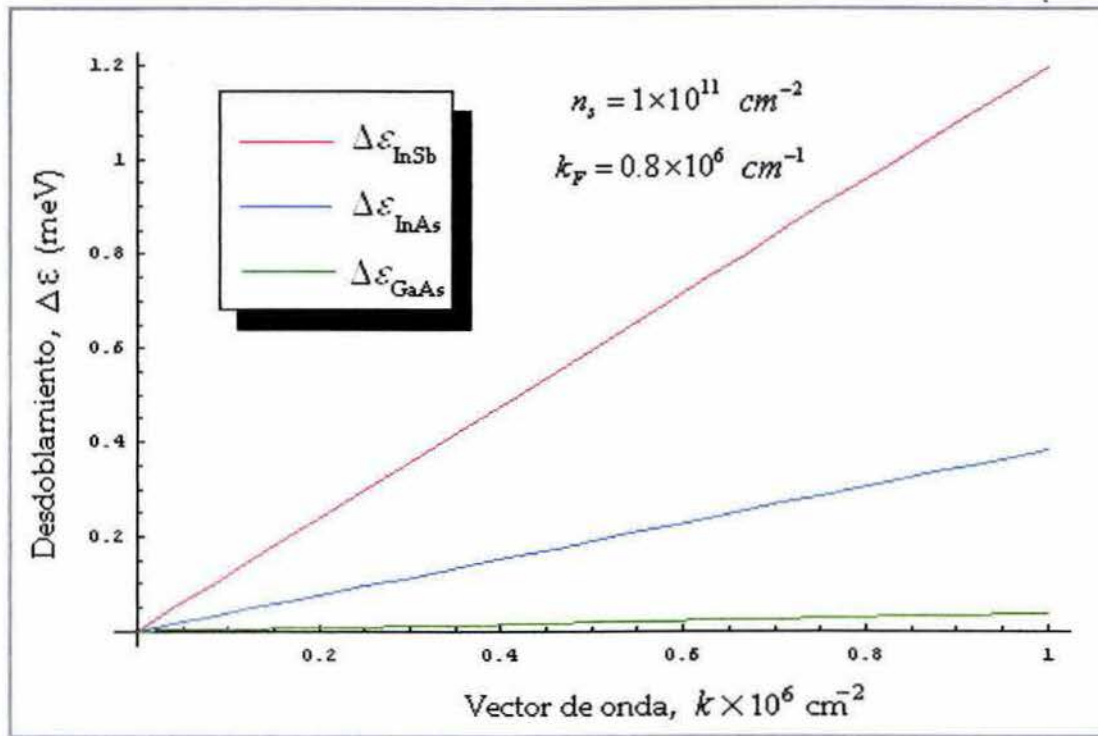


Figura 6.15 Desdoblamiento de huecos ligeros $\Delta\epsilon^{hl} = \epsilon_+^{hl} - \epsilon_-^{hl}$, para: *InSb*, *InAs* y *GaAs*. La curva correspondiente a *InP* queda traslapada sobre la curva de *GaAs*.

En la figuras 6.16 y 6.17 se muestra el desdoblamiento en función del vector de onda y de la densidad, para los 4 semiconductores ya mencionados; puede apreciarse que dependiendo de la densidad, el desdoblamiento es comparable a la de los electrones.

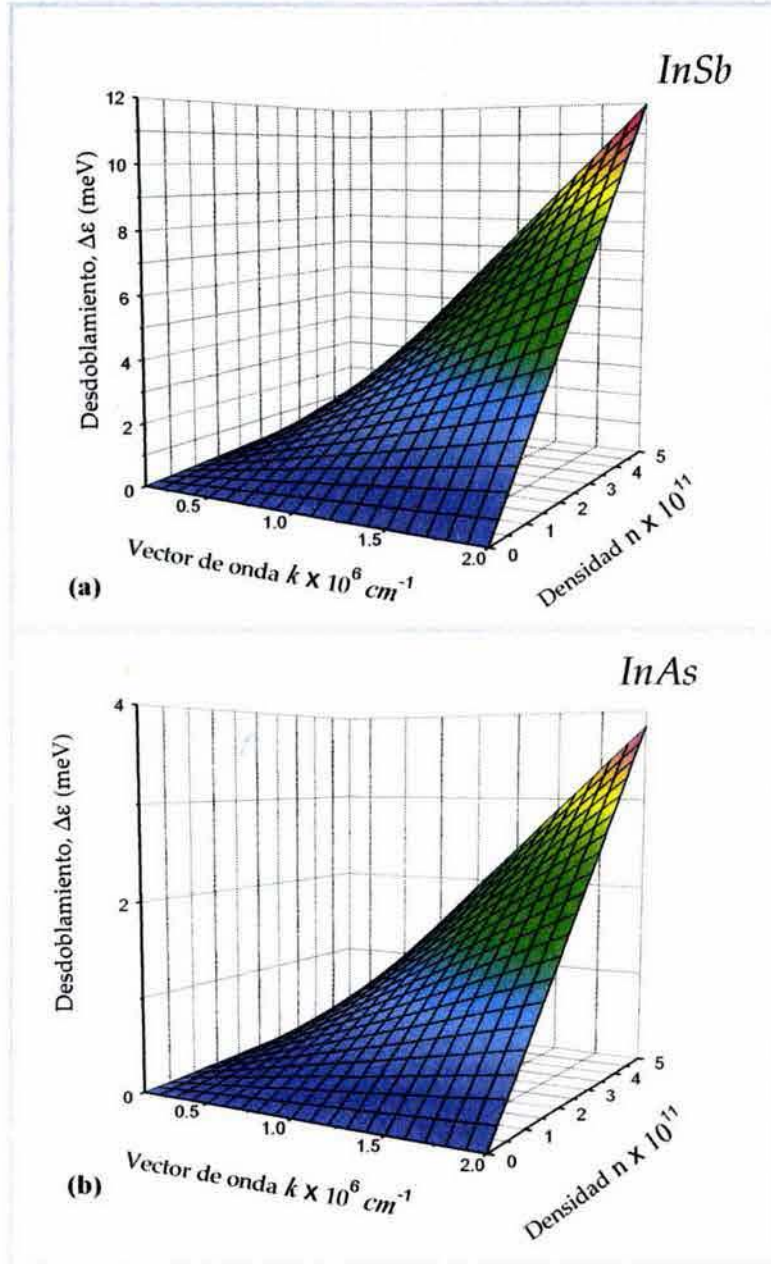


Figura 6.16 Desdoblamiento para huecos ligeros en función del vector de onda y de la densidad de huecos $\Delta\epsilon^{hl}(n_s, k) = 2\alpha_{hl}(n_s) \cdot k$, obtenida mediante el modelo de Kane para: **(a)** *InSb*, **(b)** *InAs*.

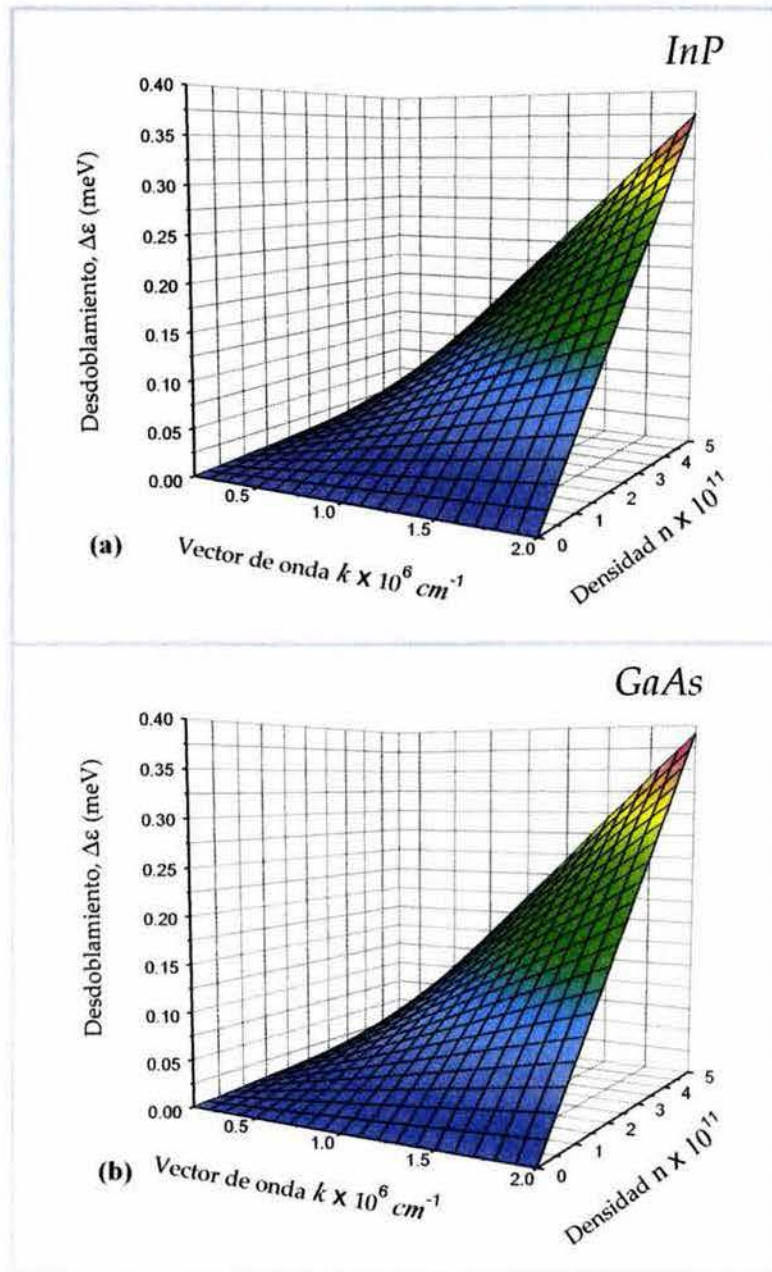


Figura 6.17 Desdoblamiento para huecos ligeros en función del vector de onda y de la densidad de huecos $\Delta\epsilon^{hl}(n_s, k) = 2\alpha_{hl}(n_s) \cdot k$, obtenida mediante el modelo de Kane para: **(a)** *InP* **(b)** *GaAs*

En la tabla 6.4 se muestra el valor de α_{hl} para *InSb*, *InAs*, *GaAs*, *InP*. Tales valores son comparables a los obtenidos para electrones en los mismos materiales.

$n_s = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	$\alpha \times 10^{-12} \text{ eV} \cdot \text{m}$
<i>InSb</i>	5.9
<i>InAs</i>	1.9
<i>GaAs</i>	0.19
<i>InP</i>	0.18

Tabla 6.4 Valores de α_{hl} para diferentes materiales, obtenidos utilizando la expresión (5.33)

Conclusiones

Se realizó un estudio teórico y numérico del acoplamiento espín-órbita en gases de huecos bidimensionales producidos por confinamiento en heteroestructuras semiconductoras con estructura cristalina tipo zinc-blenda. Utilizando el formalismo de la teoría $k.p$ de masa efectiva dentro de la aproximación de la función envolvente, se hizo una deducción sistemática de los Hamiltonianos que describen apropiadamente los estados de valencia para tales sistemas.

Particularmente utilizamos los modelos de Kane y Luttinger-Kohn extendido, que incorporan la interacción de los estados de conducción y los estados de valencia (huecos ligeros y huecos pesados). Siguiendo un procedimiento similar al utilizado por diversos autores para el caso de electrones de conducción, obtuvimos expresiones exactas de los Hamiltonianos de Rashba, tanto de huecos ligeros como de huecos pesados. Encontramos que en general, estos Hamiltonianos son dependientes de la energía, de la posición, y del vector de onda. Con el fin de explorar la física relevante detrás de las expresiones obtenidas, el Hamiltoniano de Rashba en ambos casos (huecos ligeros y huecos pesados) fue expandido en serie, conservándose los términos de mayor peso, y en el caso de los huecos pesados, sustituyendo algunos términos por su valor esperado calculado dentro de la aproximación de pozo triangular infinito. Esto permitió obtener expresiones analíticas simples tanto para los Hamiltonianos de Rashba como para

las constantes de acoplamiento, así como para las dispersiones y los desdoblamientos de espín.

En el caso de huecos pesados, encontramos que el Hamiltoniano de Rashba está compuesto por un término lineal y un término cúbico cerca del vector de onda de Fermi y de igual modo a densidades pequeñas ($\ll 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$). Las constantes de acoplamiento de ambos términos dependen de la densidad; para valores grandes de la densidad (del orden de $1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$), el término lineal es el dominante, mientras que para valores pequeños de la densidad el término cúbico es el dominante; éste último caso concuerda con los resultados que se obtienen mediante teoría de invariantes y modelos simplificados, en el que el Hamiltoniano de Rashba está compuesto solamente de un término cúbico en el vector de onda.

Por otro lado, de acuerdo a los resultados obtenidos en el presente trabajo de tesis, el desdoblamiento de los estados de espín (en el vector de onda) de los huecos pesados debido a acoplamiento Rashba, puede ser hasta un orden de magnitud mayor al caso de los electrones, dependiendo del nivel de dopaje. Particularmente, el modelo de Kane, utilizado en el presente trabajo, predice valores de energía de desdoblamiento de espín de los huecos pesados del orden de 7 meV para *InSb*, por lo que éste compuesto parece ser una muy buena elección para el diseño de dispositivos espintrónicos que incorporen el efecto Rashba.

En el caso de huecos ligeros, el Hamiltoniano de Rashba es lineal con el vector de onda para valores pequeños de k , similarmente al caso de los electrones, lo cual concuerda con los resultados que se obtienen mediante teoría de invariantes. La constante de acoplamiento no depende de los parámetros de Luttinger, por lo que el Hamiltoniano de Rashba de huecos ligeros obtenido mediante el modelo de Kane, es idéntico al obtenido mediante el modelo de Luttinger-Kohn extendido. Además, el desdoblamiento de los estados de espín de los huecos ligeros debido a acoplamiento Rashba, resulta ser del mismo orden de magnitud que el de los electrones (0.1~1 meV). Al igual que para los huecos pesados, el desdoblamiento de los estados de espín resulta de mayor magnitud en el caso de *InSb*, comparado con *InAs*, *InP* y *GaAs*

Trabajo a futuro

Ya con las expresiones analíticas de los Hamiltonianos de Rashba de huecos, es posible realizar cálculos de transporte en una heteroestructura realista. También es posible incorporar campos magnéticos al modelo y hacer un estudio detallado de la magnetoconductancia en heteroestructuras semiconductoras. Otra posible dirección es estudiar la competencia del efecto Zeeman y el acoplamiento espín-órbita en huecos para heteroestructuras basadas en semiconductores magnéticos (diluidos). Por otro lado, uno de los temas de mayor relevancia actualmente en espintrónica es el efecto Hall de espín. Con las expresiones de los Hamiltonianos de Rashba obtenidos en este trabajo, sería posible (en principio) hacer cálculos de las conductividades transversales (por ejemplo,

dentro del formalismo de Kubo) de portadores de carga con espines polarizados. Finalmente, cabe mencionar que a la fecha de edición del presente trabajo de tesis, ya se tiene el borrador del artículo para la publicación del mismo en una revista con arbitraje internacional

Apéndice A

Solución de la ecuación de Schrödinger para una partícula en un pozo de potencial triangular

Para una partícula de masa m , dentro de un pozo potencial triangular $U(z) = eEz$, donde e es la magnitud de la carga del electrón, y E es la magnitud del campo eléctrico que origina el potencial $U(z)$ (refiérase a la figura A.A.1), la ecuación de Schrödinger unidimensional independiente del tiempo es

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\Psi}{dz^2} + eEz\Psi = \varepsilon\Psi , \quad (\text{A.1})$$

que se puede escribir de la forma

$$\frac{d^2\Psi}{dz^2} - \frac{2m}{\hbar^2} (eFz - \varepsilon)\Psi = 0 , \quad (\text{A.2})$$

Si ahora hacemos el cambio de variable

$$x = \left[\frac{2m}{(\hbar eE)^2} \right]^{1/3} (eEz - \varepsilon) , \quad (\text{A.3})$$

y aplicamos la regla de la cadena para $\frac{d^2\Psi}{dz^2}$

$$\frac{d^2\Psi}{dz^2} = \left(\frac{2meE}{\hbar^2} \right)^{2/3} \frac{d^2\Psi}{dx^2}, \quad (\text{A.4})$$

la ecuación (A.2) se transforma en

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} = x\Psi \quad (\text{A.5})$$

La cual es la ecuación diferencial de Airy en forma genérica, cuya solución es una combinación lineal de las funciones (integrales) de Airy (ver figura A.A.2)

$$\Psi(x) = Ai(x) + Bi(x) \quad (\text{A.6})$$

Puesto que la función $Bi(x)$ diverge en $z \rightarrow \infty$, la única solución físicamente aceptable para (A.5) es $\Psi(x) = N Ai(x)$, donde N es la constante de normalización.

Debido a que se tiene una barrera infinita en $z = 0$, de la condición a la frontera, $\Psi(z = 0) = 0$, se sigue que

$$-\left[\frac{2m}{(\hbar e E)^2} \right]^{1/3} \varepsilon = -C_n, \quad (\text{A.7})$$

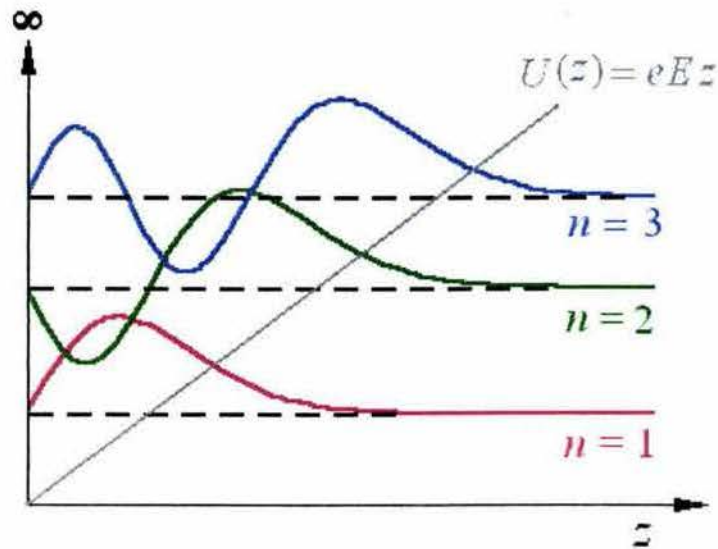


Figura A.A.1 Pozo de potencial triangular $U(z) = eEz$ (se asume que el producto eE es positivo), mostrando los primeros tres niveles de energía y sus respectivas funciones de onda

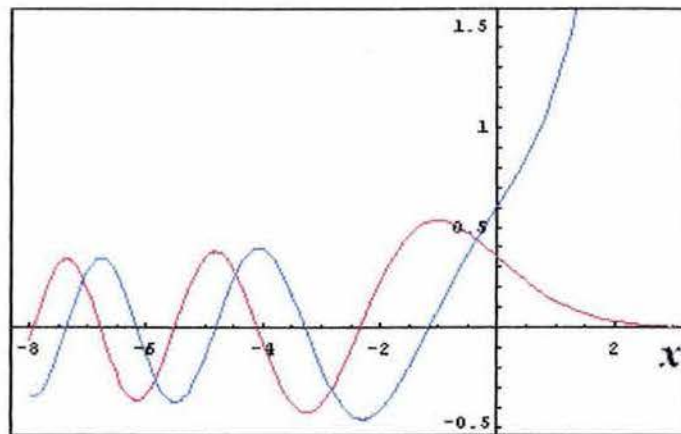


Figura A.A.2 Las dos funciones (integrales) de Airy: $Ai(x)$ y $Bi(x)$

donde C_n es la solución de $Ai(-C_n) = 0$, con $n = 1, 2, 3, \dots$. Algunos valores de C_n son: $C_1 = 2.338$, $C_2 = 4.088$, $C_3 = 5.521$. Así pues, el espectro de energía para el pozo de potencial triangular está dado por:

$$\varepsilon = C_n \left[\frac{(\hbar e E)^2}{2m} \right]^{1/3} ; n = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.8})$$

Ahora, para obtener la constante de normalización N de $\Psi(x) = N Ai(x)$, es necesario utilizar integración por partes:

$$N^2 \int Ai^2(x) dx = N^2 \left[x Ai^2(x) - 2 \int x Ai(x) Ai'(x) dx \right] = 1 , \quad (\text{A.9})$$

y con ayuda de la identidad $x Ai(x) = Ai''(x)$ en la integral entre corchetes, se obtiene que

$$N^2 \int Ai^2(x) dx = N^2 \left\{ x Ai^2(x) - [Ai'(x)]^2 \right\} = 1 , \quad (\text{A.10})$$

Finalmente, el resto consiste en evaluar los límites de la integral, y resolver la ecuación para N .

Apéndice B

Cálculo de los elementos de matriz para los Hamiltonianos de Kane y Luttinger-Kohn

Teniendo en cuenta que $|S\rangle = S(r)$, $|X\rangle = xf(r)$, $|Y\rangle = yf(r)$, $|Z\rangle = zf(r)$, donde $S(r)$ y $f(r)$ son funciones de la coordenada esférica radial. (i.e. $r^2 = x^2 + y^2 + z^2$), se procederá a calcular los elementos de las matrices de masa efectiva para el bulto y para heteroestructuras, utilizando los modelos de Kane y Luttinger-Kohn.

B.1 Bulto

B.1.1 Modelo de Kane

Ubicando la orientación del vector de onda paralela a la dirección z (i.e. $\mathbf{k} = (0,0,k)$), se calcularán algunos elementos de la matriz (2.22), partiendo del Hamiltoniano (2.20) y utilizando las funciones base (2.21)

Para el elemento H_{11} se tiene

$$\begin{aligned} H_{11} &= \langle iS \downarrow | H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} | iS \downarrow \rangle \\ H_{11} &= \langle S \downarrow | H_0 | S \downarrow \rangle + \frac{\hbar}{m_0} \langle S \downarrow | \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} | S \downarrow \rangle + \langle S \downarrow | \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \sigma_z \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | S \downarrow \rangle \quad (\text{B.1}) \end{aligned}$$

$$H_{11} = E_s + 0 + 0$$

donde sólo el primer término (E_s) contribuye a H_{11} dado que los otros dos términos son idénticamente cero:

$$\langle S \downarrow | \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} | S \downarrow \rangle = k \langle S | \hat{p}_z | S \rangle = k \int S(r) \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} S(r) d^3r = 0$$

ya que $\frac{\partial}{\partial z} S(r)$ es una función impar, $S(r)$ es par, y la integración es sobre una celda unitaria. Para el tercer término en (B.1)

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) = \sigma_x (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_x + \sigma_y (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_y + \sigma_z (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z ,$$

y dado que σ_x y σ_y cambian de estado de espín al actuar sobre $|\sigma\rangle$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) no es difícil ver que

$$\langle \downarrow | \sigma_x | \downarrow \rangle = \langle \downarrow | \sigma_y | \downarrow \rangle = 0 ,$$

de modo que para la componente z del acoplamiento espín-órbita:

$$\begin{aligned} \langle S \downarrow | \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \sigma_z \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | S \downarrow \rangle &= -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle S | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | S \rangle \\ &= -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left\{ \int \left[S \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial S}{\partial r} \frac{y}{r} \right] d^3r - \int \left[S \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial S}{\partial r} \frac{x}{r} \right] d^3r \right\} = 0 \end{aligned}$$

Siguiendo un procedimiento similar, para el elemento H_{13} :

$$H_{13} = \langle iS \downarrow | H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}) | Z \downarrow \rangle = 0 - i \frac{\hbar}{m_0} k \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle + 0 = kP \quad (\text{B.2})$$

donde P se definió en (2.23). El primer término en (B.2) es cero porque

$$\langle iS \downarrow | H_0 | Z \downarrow \rangle = \langle iS | E_p | Z \rangle = E_p \langle iS | Z \rangle = 0 ,$$

debido a la ortogonalidad de las funciones tipo s y tipo p , mientras que el tercer término en (B.2) es cero porque:

$$\begin{aligned} \langle iS \downarrow | \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \sigma_z \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | Z \downarrow \rangle &= -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle iS | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | Z \rangle \\ &= -\frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left\{ \int \left[S \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{zy}{r} \right] d^3r - \int \left[S \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{zx}{r} \right] d^3r \right\} = 0 \end{aligned}$$

Para el elemento H_{22} se tiene:

$$\begin{aligned} H_{22} &= \left\langle \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \left| H_0 + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} \right| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle \quad (\text{B.3}) \\ &= E_p + \frac{\hbar}{2m_0} \langle X-iY | \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} | X-iY \rangle + \frac{\hbar}{8m_0^2 c^2} \langle X-iY | \sigma_z (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | X-iY \rangle \\ &= E_p - \frac{\Delta}{3} \end{aligned}$$

Analicemos el primer término en (B.3),

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \left| H_0 \right| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle &= \frac{1}{2} [\langle X|H_0|X\rangle + \langle Y|H_0|Y\rangle - i\langle X|H_0|Y\rangle + i\langle Y|H_0|X\rangle] \\ &= \frac{1}{2} [\langle X|E_p|X\rangle + \langle Y|E_p|Y\rangle + 0 + 0] = E_p \end{aligned}$$

Al desarrollar el segundo término en (B.3) se tiene

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \left| \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle &= \frac{\hbar}{2m_0} k \langle X-iY | \hat{p}_z | X-iY \rangle \\ &= \frac{\hbar}{2m_0} k [\langle X | \hat{p}_z | X \rangle + \langle Y | \hat{p}_z | Y \rangle + i\langle Y | \hat{p}_z | X \rangle - i\langle X | \hat{p}_z | Y \rangle] \\ &= \frac{\hbar}{2m_0} k \left\{ \int \left[xf \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xz}{r} \right] d^3r + \int \left[yf \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial r} \frac{yz}{r} \right] d^3r + i \int \left[yf \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xz}{r} \right] d^3r - i \int \left[xf \frac{\hbar}{i} \frac{\partial f}{\partial r} \frac{yz}{r} \right] d^3r \right\} = 0 \end{aligned}$$

Dado que los integrandos son impares en z , las integrales son idénticamente igual

a cero.

Veamos ahora el desarrollo del tercer término:

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \left| \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V \times \hat{\mathbf{p}} \right| \frac{X-iY}{\sqrt{2}} \uparrow \right\rangle &= \frac{\hbar}{8m_0^2c^2} \langle X-iY | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | X-iY \rangle \\ &= \frac{\hbar}{8m_0^2c^2} \left[\langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | X \rangle + \langle Y | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | Y \rangle + i \langle Y | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | X \rangle \right. \\ &\quad \left. - i \langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | Y \rangle \right], \end{aligned}$$

como

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right) |X\rangle &= \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xy}{r} - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \left(f + \frac{x^2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right) \\ &= \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xy}{r} - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{yf}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{x^2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} = \frac{i\hbar}{r} \frac{\partial V}{\partial r} |Y\rangle \end{aligned}$$

por lo tanto $\langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right) |X\rangle = \langle X | \frac{i\hbar}{r} \frac{\partial V}{\partial r} |Y\rangle = 0$. También

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) |Y\rangle &= \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \left(f + \frac{y^2}{r} \frac{\partial f}{\partial r} \right) - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xy}{r} \\ &= \frac{\partial V}{\partial r} \frac{xf}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) + \frac{\partial V}{\partial r} \frac{x}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{y^2}{r} - \frac{\partial V}{\partial r} \frac{y}{r} \left(\frac{\hbar}{i} \right) \frac{\partial f}{\partial r} \frac{xy}{r} = -\frac{i\hbar}{r} \frac{\partial V}{\partial r} |X\rangle \end{aligned}$$

luego entonces

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{8m_0^2 c^2} \langle X - iY | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | X - iY \rangle &= \frac{\hbar}{8m_0^2 c^2} [i \langle Y | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | X \rangle - i \langle X | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | Y \rangle] \\ &= \frac{\hbar}{8m_0^2 c^2} [-i \langle X | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | Y \rangle - i \langle X | (\nabla V \times \hat{\mathbf{p}})_z | Y \rangle] = \frac{-i\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | \left(\frac{\partial V}{\partial x} \hat{p}_y - \frac{\partial V}{\partial y} \hat{p}_x \right) | Y \rangle = \frac{\Delta}{3} \end{aligned}$$

Dado que $\mathbf{H}$ (definida en 2.22) es Hermitiano, entonces $H_{21} = H_{12}^\dagger$, $H_{31} = H_{13}^\dagger$,

etc. El resto de los elementos se calcula de forma similar.

B.1.2 Modelo de Luttinger-Kohn

De la ecuación (2.37), el elemento $U_{jj'}^A$ es

$$U_{jj'}^A = \left[E_j + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{jj'} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_\alpha k_\beta P_{j\gamma}^\alpha P_{\gamma j'}^\beta}{E_0 - E_\gamma}$$

Considérense las bandas de valencia de huecos ligeros, huecos pesados y de split-off (dentro del grupo o clase A). La interacción de éstas bandas con las tres primeras bandas de conducción (clase B) será incluida como perturbación. La interacción con el resto de las bandas puede ser despreciada ya que dichas bandas están muy separadas en energía del conjunto A . En la siguiente tabla se muestran las funciones base para cada banda de conducción [77]

Representación	Funciones base	
Γ_1	$l = 0$	s
Γ_{12}	$l = 3$	$d_{x^2-y^2}, d_{3z^2-r^2}$
Γ_{15}	$l = 3$	d_{xy}, d_{xz}, d_{yz}

Se utilizará la base $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$, para huecos ligeros, pesados y split-off respectivamente, con doble degeneración debido al espín. Al calcular los elementos de

matriz $U_{jj'}^A$ de manera análoga al procedimiento seguido en la sección **B.1.1**, se obtiene una matriz de la forma

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} U^A & 0 \\ 0 & U^A \end{bmatrix}$$

$$U^A = \begin{bmatrix} U_{XX}^A & U_{XY}^A & U_{XZ}^A \\ U_{YX}^A & U_{YY}^A & U_{YZ}^A \\ U_{ZX}^A & U_{ZY}^A & U_{ZZ}^A \end{bmatrix}$$

Para el elemento U_{XX}

$$U_{XX}^A = E_X + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_\alpha k_\beta p_{X\gamma}^\alpha p_{\gamma X}^\beta}{E_0 - E_\gamma}$$

donde

$$\sum_\alpha k_\alpha p_{X\gamma}^\alpha = k_x p_{X\gamma}^x + k_y p_{X\gamma}^y + k_z p_{X\gamma}^z$$

y

$$p_{\Omega\gamma}^\alpha = \langle \Omega | p_\alpha | \gamma \rangle \quad \text{con } \alpha = x, y, z ; \quad | \Omega \rangle = | X \rangle, | Y \rangle, | Z \rangle.$$

Para este caso, puede verse que los elementos de la forma $p_{X\gamma}^x$ cuando γ es igual a cualquier función base de la representación Γ_{15} son cero. También son cero los elementos de la forma $p_{X\gamma}^{y,z}$ cuando γ es igual a cualquier función base de la representación Γ_1 o Γ_{12} .

El resto de los elementos sobreviven. Utilizando la definición de las constantes A_0 , B_0 , y C_0 dada en (2.39) se tiene que

$$U_{xx}^A = A_0 k_x^2 + B_0 (k_y^2 + k_z^2)$$

donde se ha fijado $E_x = 0$. Siguiendo un procedimiento similar para el elemento U_{xy}

$$U_{xy}^A = U_{yx}^A = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\gamma \neq j, j'}^B \sum_{\alpha, \beta} \frac{k_\alpha k_\beta p_{x\gamma}^\alpha p_{y\gamma}^\beta}{E_0 - E_\gamma} = C_0 k_x k_y$$

De igual forma obtenemos

$$U_{yy}^A = A_0 k_y^2 + B_0 (k_x^2 + k_z^2)$$

$$U_{zz}^A = A_0 k_z^2 + B_0 (k_x^2 + k_y^2)$$

$$U_{xz}^A = U_{zx}^A = C_0 k_x k_z$$

$$U_{yz}^A = U_{zy}^A = C_0 k_y k_z$$

Para transformar a la base (2.31), utilizamos la matriz unitaria

$$Q = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{i}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{i}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \end{bmatrix}$$

de modo tal que $\bar{\mathbf{H}}^{LK} = Q U Q^\dagger$. Una vez hecha esta transformación, se procede a utilizar las definiciones de γ_1^L, γ_2^L y γ_3^L dadas en (2.40), y las definiciones de Q, R, S, T dadas en (2.42) y así obtener la expresión (2.41) para el Hamiltoniano estándar de Luttinger-Kohn.

B.2 Heteroestructuras

B.2.1 Modelo de Kane

Se procederá a calcular algunos elementos de la matriz (3.17), utilizando las funciones base (3.16)

Para el elemento $j' = 1, j = 1, i.e.$

$$u_{j'=1}^\dagger = \langle S \uparrow |; \quad u_{j=1} = |S \uparrow \rangle$$

solo sobrevive el término $U(z) + E_0 - \varepsilon$. Los términos de la forma $\hat{p}_{l,l}^{x,y,z} = \langle S | \hat{p}_{x,y,z} | S \rangle$ son cero debido a que corresponden a la integral sobre una celda unitaria de una función impar, tal como ya se ha mencionado.

Para el elemento $j' = 4, j = 4$, *i.e.*

$$u_{j'=4}^\dagger = \left\langle \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right|; \quad u_{j=4} = \left| \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right\rangle$$

solo sobrevive el término $U(z) - E_0 - \varepsilon$. Los términos de la forma $\hat{p}_{l,l}^{x,y,z} = \langle u_4 | \hat{p}_{x,y,z} | u_4 \rangle$ son iguales a cero, ya que también aparecen integrales de funciones impares, además de la ortogonalidad de los espinores.

Para el elemento $j' = 2, j = 4$, *i.e.*

$$u_{j'=2}^\dagger = \langle S \downarrow |; \quad u_{j=4} = \left| \frac{i}{\sqrt{6}} [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \right\rangle$$

utilizando argumentos similares a los empleados en los casos anteriores, solo sobreviven los siguiente elementos:

$$\frac{\hbar}{m_0} k_x p_{2,4}^x = \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\hbar}{m_0} k_x \langle S \downarrow | p_x | [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \rangle = -\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\hbar}{m_0} k_x \langle iS | p_x | X \rangle = -\frac{Pk_x}{\sqrt{6}}$$

$$\frac{\hbar}{m_0} k_y p_{2,4}^y = \frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\hbar}{m_0} k_y \langle S \downarrow | p_y | [(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow] \rangle = -\frac{i}{\sqrt{6}} \frac{\hbar}{m_0} k_y \langle iS | p_y | Y \rangle = -\frac{iPk_y}{\sqrt{6}}$$

Sumando los resultados obtenidos, el elemento $j' = 2, j = 4$ es

$$-\frac{P}{\sqrt{6}} k_x - i \frac{P}{\sqrt{6}} k_y = -\frac{P}{\sqrt{6}} k_+$$

donde se han utilizado las definiciones dadas en (3.18)

Para el elemento $j' = 5, j = 2$, *i.e.*

$$u_{j'=5}^\dagger = \left\langle \frac{1}{\sqrt{6}} [(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow] \right|; \quad u_{j=2} = |S \downarrow \rangle,$$

solo sobrevive el término:

$$\begin{aligned} \frac{(\hat{p}_z f_j)}{m_0} p_{5,2}^z &= \frac{1}{\sqrt{6}} \frac{(\hat{p}_z f_j)}{m_0} \langle (X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow | p_z | S \downarrow \rangle \\ &= -i \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{(\hat{p}_z f_j)}{m_0} \langle Z | p_x | iS \rangle \\ &= -\sqrt{\frac{2}{3}} P \frac{df_j}{dz} \end{aligned}$$

B.2.2 Modelo de Luttinger-Kohn

El procedimiento para el cálculo de los elementos de la matriz (3.21) es similar al que se empleó en la sección **B.1.2**. Recuérdese que para el caso de heteroestructuras se utilizó el modelo de Luttinger-Kohn extendido, en el que se desprecian las bandas de split off, y se incluye la banda de conducción. Una vez que se ha obtenido la matriz $\mathbf{U}$, se hace el cambio $k_z \rightarrow -i \frac{d}{dz}$, donde el operador de derivada aplica sobre la función envolvente. Para convertir la matriz resultante a la base (3.16) se utiliza la matriz unitaria

$$Q = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{i}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{i}{\sqrt{6}} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{i}{\sqrt{3}} & 0 \\ -\frac{i}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & 0 & 0 & 0 & \frac{i}{\sqrt{3}} \end{bmatrix}$$

de modo tal que se obtiene una matriz $\mathbf{L} = \mathbf{Q}\mathbf{U}\mathbf{Q}^\dagger$. Una vez hecha esta transformación, se procede a utilizar las definiciones de γ_1^L, γ_2^L y γ_3^L dadas en (2.40) y sustituir γ_2^L y γ_3^L por γ^L mediante la aproximación esférica (ver sección 3.3.4), y a su vez sustituir γ_1^L y

γ^L por γ_1 y γ . Después de ello, se desprecian los elementos correspondientes a la interacción con la banda de splitt-off (filas 5 y 6, así como las columnas 5 y 6). La matriz resultante se suma a la matriz de Kane (3.17) (considerando términos cuadráticos en k) y se obtiene la matriz (3.21).

Apéndice C

Parámetros de bulto de semiconductores tipo zinc blendaⁱ

Propiedad	<i>InSb</i>	<i>InAs</i>	<i>GaAs</i>	<i>InP</i>
E_g (eV)	0.23	0.42	1.519	1.424
E_p (eV) ⁱⁱ	23.1	22.2	25.7	20.7
γ_1^L	35.08	20.4	6.8	4.95
γ_2^L	15.64	8.3	1.9	1.65
γ_3^L	16.91	9.1	2.73	2.35
γ^L	16.4	8.78	2.4	20.7
ε_{SC}	16.8	15.15	13.1	12.56

ⁱ Obtenidos de la referencia [70]

ⁱⁱ El valor de E_p está relacionado con la constante P definida en la ecuación (3.18) mediante

$$P^2 = \frac{\hbar^2 E_p}{2m_0} = \frac{\hbar^2}{m_0^2} \left| \langle iS | P_z | Z \rangle \right|^2$$

Referencias

- [1] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, y D. M. Treger, *Science* **294**, 1448 (2001)
- [2] D. D. Awschalom, M. E. Flatté y N. Smarth, *Scientific American Latinoamericana* Agosto 2002 (pág. 57)
- [3] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth y D. D. Awschalom, *Science*, **277**, 1284 (1997); J. M. Kikkawa y D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998)
- [4] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag y L. W. Molenkamp, *Nature* **402**, 787 (1999); Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukara, H. Ohno y D. D. Awschalom, *Nature* **402**, 790 (1999)
- [5] V. Cerletti, W. A. Coish, G. Oliver y D. Loss, cond-mat/0412028 v1 (1 Dic. 2004)
- [6] Y. A. Bychkov y E. I. Rashba, *J. Phys.* **17**, 6039 (1984)
- [7] S. Datta y B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990)
- [8] C. Day, *Two groups observe the spin Hall effect in semiconductors, Physics Today*, febrero 2005, págs. 17-19.
- [9] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, D. D. Awschalom, *Science* **306**, 1910 (2004)
- [10] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047204 (2005)
- [11] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, y F. Petroff, *Phys Rev. Lett.* **61**, 2472 (1998)
- [12] Gary A. Prinz, *Science* **282** 1660 (1998)

- [13] R. von Helmolt, J. Wecker, B. Holzapfel, L. Schultz, y K. Samwer, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 2331 (1993)
- [14] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto y Y. Iye, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 363 (1996)
- [15] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, y D. Ferrand, *Science* **287**, 1019 (2000).
- [16] V.A. Dinh, K. Sato, H. Katayama-Yoshida, *J. Phys. Cond. Mat.* **16**, S5705 (2004)
- [17] Y. Matsumoto, M. Murakami, T. Shono, T. Hasegawa, T. Fukumura, M. Kawasaki, P. Ahmet, T. Chikyow, S. Koshihara, y H. Koinuma, *Science* **291**, 854 (2001)
- [18] H. X. Liu, S.Y. Wu, R.K. Singh, L. Gu, D. J. Smith, N. Newman, N. R. Dilley, L. Montes, M. B. Simmonds, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 4076 (2004)
- [19] D. R. Scifres, B. A. Huberman, R. M. White y R. S. Bauer, *Solid State Commun.* **13**, 1615 (1973)
- [20] A. G. Aronov y G. E. Pikus, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **10**, 1177 (1976)
- [21] M. Johnson and R. H. Silsbee, *Phys. Rev. B* **37**, 5326 (1988)
- [22] C. M. Hu, J. Nitta, A. Jensen, J. B. Hansen, y H. Takayanagi, *Phys. Rev. B* **63**, 125333 (2001)
- [23] G. Schmidt, D. Ferrand, y L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **62**, R4790 (2000)
- [24] S. F. Alvarado y P. Renaud, *Phys. Rev. Lett.* **9**, 1387 (1992)
- [25] S. K. Upadhyay, A. Palanisami, R. N. Louie, y R. A. Buhrman, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3247 (1998)
- [26] S. K. Upadhyay, R. N. Louie y R. A. Buhrman, *Appl. Phys. Lett.* **74**, 3881 (1999)
- [27] W. H. Rippard y R. A. Buhrman, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 971 (2000)
- [28] L. J. Sham y T. Ostreich, *J. Lumin.* **87**, 179 (2000). L. J. Sham., *J. Magn. Mat.* **200**, 219 (1999)

- [29] D. D. Awschalom y J. M. Kikkawa, *Physics Today* **52**, No. 6 págs. 33-38 (Junio 1999)
- [30] P. R. Hammar, M. Johnson, *Phys. Rev. B* **61**, 7207 (2000). M. Johnson, *Physica E* **10**, 472 (2001)
- [31] R. K. Kawakami, Y. Kato, M. Hanson, I. Malajovich, J. M. Stephens, E. Johnston-Halperin, G. Salis, A. C. Gossard, y D. D. Awschalom, *Science* **294**, 131 (2001)
- [32] S. Das Sarma, Spintronics, *American Scientist*, **89** 516
- [33] D.D. Awschalom, D. Loss y N Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*, Springer 2002.
- [34] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*, Cambridge University Press.
- [35] M. Ziese y M. J. Thornton, *Spin Electronics*, Springer 2001
- [36] L.G. Gerchikov y A. V. Subashiev, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 73 (1992)
- [37] G. Engels, J. Lange y H. Luth, *Phys. Rev. B* **55**, R1958 (1997)
- [38] P. Pfeffer y W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **52**, R14332 (1995)
- [39] E. A. de Andrada e Silva, G.C. LaRocca y F. Bassani, *Phys. Rev. B* **50** 8523 (1994)
- [40] J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **57**, 11911 (1998); G. Engels, J. Lange, Th. Schäpers, and H. Lüth, *Phys. Rev. B* **55**, 1958 (1997); Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth, *J. Appl. Phys.* **83**, 4324 (1998); C. M. Hu, J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, J. Osaka, P. Pfeffer y W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **60**, 7736 (1999).
- [41] V. I. Litvinov, *Phys. Rev. B* **68**, 155314 (2003)
- [42] R. Lassnig, *Phys. Rev. B* **31**, 8076 (1985).

- [43] W. Zawadzki y P. Pfeffer, *Spin splitting of subband energies due to inversion asymmetry in semiconductor heterostructures*, Topical Review, *Semicond. Sci. Technol.* **19** R1-R17 (2004)
- [44] D. Grundler, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 6074 (2000)
- [45] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955)
- [46] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang y P. J. Stiles, *Phys. Rev. B* **38**, 101 42 (1988)
- [47] B. Das, D. C. Miller, S. Datta, R. Reifenberger, W. P. Hong, P. K. Bhattacharya, J. Singh, y M. Jaffe, *Phys. Rev. B* **39**, 1411
- [48] B. Jusserand, D. Richards, G. Allan, C. Priester, B. Etienne *Phys. Rev. B* **51** 4707 (1995)
- [49] D. Richards, B Jusserand, G. Allan, C. Priester y B. Etienne. *Solid-State Electron B* **40** 127 (1996)
- [50] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi y T. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [51] Y. Sato, T. Kita, S. Gozu, S. Yamada , *J. Appl. Phys.* **89**, 8017 (2001)
- [52] A.V. Moroz y C. H. Barnes, *Phys. Rev. B* **60**, 14272 (1999)
- [53] F. Mireles y G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **64**, 24426 (2001)
- [54] John Schliemann, J. C. Egues y D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003)
- [55] H. L. Stormer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gossard y W. Wiegmann, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 126 (1983)
- [56] A. D. Wieck, E. Batke, D. Heitmann, J. P. Kotthaus y E. Bangert, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 493 (1984)
- [57] J. E. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 1834 (1999)
- [58] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, y A. H. MacDonald, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004)

- [59] F. J. Ohkawa y Y. Uemura, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **57**, 164 (1975)
- [60] E. Bangert y G. Landwehr, *Surf. Sci.* **58**, 138 (1976)
- [61] T. Ando, *J. Japan Phys. Soc.* **54**, 1528 (1985)
- [62] R. Winkler, H. Noh, E. Tutuc y M. Shayegan, *Phys Rev. B* **65**, 155303.(2002); R. Winkler, *Phys. Rev. B* **62**, 4245 (2000); B. Habib, E. Tutuc, S. Melinte, M. Shayegan, S. Wasserman, S.A. Lyon, R. Winkler, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 3151 (2004); R. Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*, Habilitation thesis, Springer (2004)
- [63] J. R. Chelikowsky y M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* **14**, 556 (1976)
- [64] J. Bardeen, *J. Chem. Phys.* **6**, 367-371 (1938).
- [65] F. Seitz, *The Modern Theory of Solids*, McGraw Hill, New York, 1940, pág. 352
- [66] E.O. Kane, *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 249-261 (1957)
- [67] J. M. Luttinger y W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869-883 (1955)
- [68] C. R. Pidgeon y R. N. Brown, *Phys. Rev.* **146**, 575 (1966)
- [69] Al. L. Efros and M. Rosen., *Phys. Rev. B* **58**, 7120 (1998)
- [70] S. L. Chuang, *Physics of optoelectronic devices*, New York: J. Wiley 1995
- [71] Gerald Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les éditions de physique, Francia 1988
- [72] T. Darnhofer and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **47**, 16020 (1993)
- [73] A. Baldereschi y N.O. Lipari, *Phys. Rev. B* **8**, 2697 (1973)
- [74] W. Greiner, *Quantum Mechanics: an Introduction*, 3era. Edición, Springer 1994
- [75] F. F. Fang y W. E. Howard, *Phys Rev. Lett.* **16**, 797 (1966)
- [76] J.C. Hensel y G. Feher, *Phys. Rev.* **129**, 1041 (1963).
- [77] P. N. Stavrinou, *Phys. Rev. B* **55**, 15456 (1997)