



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA
DE MEXICO

DINAMICA Y OSCILACIONES DE BLOCH EN SISTEMAS
CON INTERACCION ESPIN-ORBITA

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA)

PRESENTA:

RAMON CARRILLO BASTOS

DIRECTOR DE TESIS: DR FERNANDO ROJAS IÑIGUEZ

COMITÉ TUTORAL: DR. ERNESTO COTA ARAIZA
DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA

pcf

posgrado en ciencias físicas
u n a m

MÉXICO, D.F.

2009



Universidad Nacional
Autónoma de México



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.

RESUMEN de la tesis de Ramón Carrillo Bastos presentada como requisito parcial para la obtención del grado de MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA). Ensenada, Baja California, México, Abril 2009.

DINÁMICA Y OSCILACIONES DE BLOCH EN SISTEMAS CON INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA

Resumen aprobado por:



Dr. Fernando Rojas Iñiguez
Director de Tesis

Se estudia la dinámica electrónica en sistemas con interacción espín órbita con los términos k^3 de Dresselhaus. La interacción espín órbita acopla el grado de libertad de espín con la velocidad. Los sistemas de estudio son el doble pozo y el cristal unidimensional infinito (arreglo infinito de pozos). En ambos casos se escribió el hamiltoniano en aproximación de amarre fuerte a primeros vecinos, y se resolvió la ecuación de Schrodinger desacoplando en espín y utilizando métodos analíticos. En el cristal unidimensional infinito se consideró la presencia de un campo eléctrico $E(t)$ constante en el espacio pero con posible dependencia temporal y se estudiaron tres casos para este campo: cero, constante diferente de cero y dependiente del tiempo.

En el doble pozo la condición inicial es el electrón inicialmente localizado en el pozo de la izquierda con espín arriba. Se encontraron expresiones analíticas para la probabilidad de encontrar al electrón en cada pozo para cada componente de espín y para la magnetización (el valor esperado de σ_z). De éstas expresiones se obtuvo que el electrón oscila entre los pozos como en el caso sin interacción espín órbita, sin embargo a diferencia de este otro caso, hay dos frecuencias que gobiernan esta oscilación $2T/\hbar$ y $2T_s T/\hbar$, la primera asociada al tuneo por la energía cinética, y la segunda al tuneo por la interacción espín órbita; la magnetización de cada pozo también es controlada por estas dos frecuencias sin embargo la magnetización total en el sistema oscila de forma cosenoidal en el tiempo y depende sólo de la frecuencia asociada a la interacción espín órbita.

En el caso del cristal unidimensional infinito se tomó como condición inicial al electrón localizado en un sitio central con espín arriba. Se encontraron expresiones analíticas para la probabilidad de encontrar al electrón en cada pozo para cada componente de espín como función del tiempo para tres tipos de campo eléctrico $E(t)$. Para caracterizar la difusión del electrón en el sistema, se obtuvieron expresiones para la dispersión cuadrática media $\langle r^2(t) \rangle$: para campo eléctrico cero el sistema es súper difusivo, pero a diferencia del sistema sin interacción espín órbita, con un coeficiente mayor de difusión $\langle r^2(t) \rangle = 2T^2(1+T_s^2)t^2$ pues existe otro canal de difusión para el sistema; para campo eléctrico constante la dispersión oscila en el tiempo (oscilaciones de Bloch por espín); y para campo eléctrico dependiente del tiempo la difusión depende de $E(t)$, en el caso particular de $E(t) = \Omega \cos \omega t$ la difusión pasa de una localización total (localización dinámica) a súper difusión dependiendo del valor del cociente entre la frecuencia del campo ω y la magnitud del mismo campo.

De considerar la interacción espín órbita surge el interés de estudiar la polarización en el sistema o magnetización. Las expresiones para la magnetización por sitio (la magnetización para cada pozo) y total del sistema están determinadas, de manera similar que la dispersión cuadrática media, por el campo eléctrico externo. Para campo eléctrico nulo la magnetización del sistema decrece para tiempos largos como $1/t^2$, para campo eléctrico constante la magnetización oscila, es decir se manifiestan las oscilaciones de Bloch en esta cantidad, y para campo dependiente del tiempo la magnetización depende de la integral temporal de la función para el campo eléctrico.

Dedicatoria

Dedico este trabajo a mis padres, Alicia Bastos y Ramón Carrillo en agradecimiento y por su amor, apoyo y comprensión.

Agradecimientos

Al Dr. Fernando Rojas por la dirección de esta tesis, su paciencia, útiles consejos, y las horas de discusión.

Al Dr. Ernesto Cota por su apoyo durante toda la maestría y por que con su ejemplo me mostró que el interés por la Física Teórica es inagotable.

Al Dr. Francisco Míreles cuyas discusiones enriquecieron de manera significativa mi trabajo de tesis.

A todos los miembros del Journal Club 2005-2007: los doctores Fernando, Ernesto, Francisco, Catalina y Jesús (Maytorena), los recién doctores Deborah y Roberto (Piano) y los próximos doctores Sukey, Luis (*in god we trust*), Rubén y Arturo; en compañía de quienes aprendí muchísimas cosas relacionadas con mi trabajo.

A mi compañera Sukey Sosa cuya asesoría, ayuda y consejos facilitaron mi trabajo de tesis.

A mis amigos Luis Burgos y Fermín Franco por su amistad y apoyo constante.

A mí muy querido amigo y colega Jesús Castañeda por su amistad, consejos y ayuda desinteresada.

A la Sra. Enriqueta Medrano por su apoyo.

Al Centro de Nanociencias y Nanotecnología, por todas las facilidades brindadas durante mis estudios y en el desarrollo de este trabajo.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por su apoyo a través de su programa de becas de maestría.

Contenido

1. Introducción.....	5
1.1 Antecedentes.....	6
1.2 Objetivos.....	8
1.3 Contenido de la tesis.....	8
2. Dinámica electrónica en amarre fuerte.....	10
2.1 El doble pozo cuántico.....	10
2.2 Cristal unidimensional infinito.....	15
2.3 Campo eléctrico constante: Oscilaciones de Bloch.....	25
2.4 Campo eléctrico dependiente del tiempo: Localización dinámica.....	31
2.5 Solución mediante álgebras de Lie.....	34
3. Interacción espín-órbita tipo Dresselhaus.....	40
3.1 El espín del electrón.....	40
3.2 La interacción espín-órbita. El término κ^3 de Dresselhaus.....	46
4. Dinámica electrónica con interacción espín-órbita.....	62
4.1 El doble pozo cuántico con interacción espín-órbita: La magnetización.....	62
4.2 El hamiltoniano para el cristal unidimensional infinito con interacción espín-órbita.....	75
4.3 Campo eléctrico cero.....	80
4.4 Campo eléctrico constante: Oscilaciones de Bloch.....	93
4.5 Solución caso dependiente del tiempo.....	102
5. Conclusiones y trabajo futuro.....	115
6. Referencias.....	118

1. Introducción

Hoy en día gran parte de la tecnología de información está basada en dispositivos electrónicos. En éstos se manipula la información a través de diferencias de potencial, traduciendo la presencia o ausencia de carga eléctrica en “unos” y “ceros” lógicos. La mayoría de estos sistemas físicos (chips) están basados en dispositivos de estado sólido, entre cuales destacan los transistores. Cuanto mayor número de transistores haya en estos sistemas, mayor será su capacidad de procesar información. Para esto último se requiere incrementar la densidad de transistores en los dispositivos, dicho proceso se conoce como miniaturización. Además de las complicaciones tecnológicas y de ingeniería para construir dispositivos con mayor número de transistores de menor tamaño, existen límites de otra índole. Cuando se reducen los dispositivos a ciertas dimensiones (nanométricas), la física que describe estos sistemas no es la misma. Las corrientes que soportan los dispositivos sin dañarse se vuelven cada vez más pequeñas: lo ideal sería hacer electrónica de un solo electrón (Davies, 1998). Lo anterior es posible, ya que el electrón además de poseer una carga intrínseca posee un grado de libertad intrínseco, de naturaleza mecánico cuántico-relativista, el espín, que se asocia al momento angular magnético intrínseco de las partículas.

A pesar del intenso trabajo en la investigación en dispositivos semiconductores que se ha realizado en las últimas décadas y de la creación de tecnología capaz de fabricar nanoestructuras tales como alambres, cables y pozos cuánticos, hasta hace poco tiempo el espín del electrón había sido mayormente ignorado, con la excepción de la inclusión de su degeneración.

Sin embargo, en años recientes un nuevo paradigma de electrónica basado en el grado de libertad de espín del electrón ha comenzado a emerger. Este campo se conoce como *espintrónica* (Awschalom D. D., 2000). La palabra espintrónica se originó en 1994, cuando la Agencia de Defensa para Proyectos Avanzados de Investigación (DARPA, USA) comenzó un nuevo programa llamado “*Spintronics*” (Spin Transport Electronics), con la intención de crear una nueva generación de dispositivos electrónicos donde el espín de los portadores de carga jugaría un rol crucial además de la carga eléctrica (Wolf *et al.*, 2002).

La investigación en espintrónica es amplia, e incluye el magnetismo en semiconductores controlados electrónicamente y fotónicamente, estudios teóricos y experimentales de semiconductores magnéticos, propiedades ópticas de moléculas de

puntos cuánticos, inyección de espín electrónico, manipulación y detección de espín en heteroestructuras, la relajación y defasamiento de espín, la búsqueda de nuevos materiales y el diseño de nuevos dispositivos entre otros. Los avances tecnológicos en la fabricación y caracterización de nanoestructuras híbridas han desarrollado los estudios de espín en estructuras de baja dimensionalidad, tales como pozos, alambres y puntos cuánticos. El entendimiento del transporte de espín a través de heteroestructuras es importante para el modelado y construcción de dispositivos electrónicos (Zutić, *et al.*, 2004). Tal es el caso de la propuesta del transistor de efecto de campo de espín, spin-FET por sus siglas en Inglés (Datta y Das, 1990).

Además del diseño de dispositivos espintrónicos, los sistemas con grado de libertad de espín, al ser naturalmente sistemas de dos niveles, pueden utilizarse como base de las nuevas computadoras cuánticas de estado sólido. Sirviendo así como la unidad lógica fundamental de tales computadoras, a la que se conoce como *bit* cuántico o *qubit* (Wolf *et al.*, 2001).

Parte esencial en el entendimiento del comportamiento del espín electrónico es la descripción del espín en fenómenos anteriormente estudiados. Un ejemplo de esta trasposición de ideas es el efecto Hall de espín. Dentro de este paradigma se sitúa este trabajo de tesis: se estudia la dinámica electrónica con interacción espín órbita. A continuación se mencionan los antecedentes principales de este trabajo.

1.1 Antecedentes

En 1928 Bloch predijo que una cuasipartícula en un cristal tendría un movimiento oscilatorio en presencia de un campo eléctrico constante (Bloch, 1928), por esta razón se denomina a este fenómeno oscilación de Bloch. Las oscilaciones de Bloch generan localización de la partícula en una región del espacio y se sabe que un estado localizado requiere un espectro energético discreto. El espectro de energía de este cristal fue estudiado por Wannier en 1962 y se le conoce como escalera de Wannier-Stark por su naturaleza discreta.

Una década después de los trabajos de Wannier, en 1973, Fukuyama *et al.* (Fukuyama *et al.*, 1973) estudiaron la dinámica electrónica en un sistema periódico para un campo eléctrico constante y compararon con el caso de ausencia de campo, obtuvieron el propagador en ambas situaciones y recuperaron la escalera de Wannier-Stark y las oscilaciones de Bloch.

Tanto la escalera de Wannier-Stark como las oscilaciones de Bloch han sido corroboradas experimentalmente. Méndez *et al.* encontraron el espectro discreto en una superred por métodos ópticos en 1988, y las oscilaciones de Bloch se detectaron en 1993 a través de la medición de la radiación electromagnética producto del movimiento electrónico, también en una superred por el grupo de Washcke (Waschke *et al.*, 1993).

El estudio de estos sistemas para campos eléctricos con dependencia temporal lo realizaron Dunlap y Kenkre (Dunlap y Kenkre, 1986). Ellos encontraron expresiones para el propagador para un campo eléctrico con dependencia temporal cualesquiera y estudiaron la situación particular en la que el campo es una función cosenoidal del tiempo. Encontraron que para este último caso la localización (o no) de la partícula para tiempos relativamente largos depende del cociente de la magnitud y la frecuencia del campo aplicado; llamaron a este fenómeno localización dinámica.

Trabajos posteriores estudiaron este sistema desde otros enfoques y con algunas variantes. Entre ellos está el trabajo de Korsch y Mossmann (Korsch y Mossmann, 2003) que resuelve la ecuación de Schrödinger del sistema utilizando el teorema de Wei-Norman (Wei y Norman, 1963) útil para resolver ecuaciones diferenciales que pueden escribirse en términos de algún álgebra de Lie. Este replanteamiento del problema permite la generalización de la solución a dos dimensiones en el cristal (Mossmann *et al.*, 2005). Adicionalmente de generalizaciones y nuevos enfoques, se incluyeron otras consideraciones al sistema. En 2003 Ken-Ichi Noba estudió el efecto de la interacción coulombiana al suponer dos electrones en el sistema.

Una manera a través de la cual el espín del electrón interacciona con el medio en el que se mueve el electrón es la interacción espín-órbita. Dicha interacción relaciona el momento angular y el espín y tiene diferentes contribuciones en sólidos y heteroestructuras. Entre ellas cabe destacar la que involucra la asimetría espacial del bulto por ejemplo en materiales tipo Zinblend. Esta interacción particular fue estudiada por Dresselhaus en 1955 y lleva su nombre. La interacción espín-órbita tipo Dresselhaus ha sido centro de atención últimamente después de los trabajos del grupo de Perel', ya que en ellos se muestra que esta interacción hace que el tuneo del electrón a través de una barrera de potencial dependa del grado de libertad de espín, creando una polarización de espín (Perel' *et al.*, 2003).

1.2 Objetivos

Considerando la relevancia tecnológica del espín, mencionada en la parte inicial de esta introducción, y los interesantes fenómenos que se presentan en la dinámica electrónica en sistemas periódicos de la sección anterior, es que se plantea el objetivo principal de esta tesis: introducir la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus a la dinámica electrónica en sistemas discretos y estudiar el comportamiento del espín electrónico en la oscilación de Bloch.

Entre las principales preguntas que se pretenden responder en esta tesis están: ¿se presenta el fenómeno de oscilación de Bloch en sistemas con interacción espín-órbita?, ¿cómo se modifica este fenómeno?, ¿cuáles son las expresiones para la función de onda del electrón por espín?

Para contestar las preguntas anteriores y cumplir con el objetivo de esta tesis se estudió teóricamente la dinámica electrónica en dos sistemas: el doble pozo y la cadena infinita de sitios. Se consideró que el material de dichos sistemas tenía una asimetría tal que existía interacción espín-órbita tipo Dresselhaus entre el electrón y el material. Se utilizaron métodos conocidos para la solución de la ecuación de Schrödinger sin interacción espín-órbita. Estos métodos se adaptaron a través de la diagonalización en espín para resolver la ecuación con interacción espín-órbita. De esta manera se obtuvieron expresiones para la función de onda del electrón, y se estudió la dinámica electrónica. En la siguiente sección se detalla el contenido de la tesis y en los capítulos subsecuentes: la metodología utilizada y los resultados obtenidos.

1.3 Contenido de la tesis

Esta tesis ha sido escrita favoreciendo el desarrollo conceptual. A continuación se explica brevemente la estructura y los contenidos de este trabajo. La sección 1.1 es un resumen de los antecedentes para poner en contexto el objetivo de esta tesis, mismo que se expone en sección 1.2. Los antecedentes se exponen de manera formal a la par del desarrollo de los conceptos en los capítulos 2 y 3.

En el capítulo 2 se estudia la dinámica electrónica. En la sección 2.1 se resuelve el doble pozo cuántico para plantear el origen de los términos en los hamiltonianos próximos a ser estudiados en las páginas posteriores. En la sección 2.2 se escribe el hamiltoniano para un cristal unidimensional infinito, y se resuelve para el caso sin campo eléctrico, además se obtienen las propiedades que caracterizan la dinámica en estos sistemas, para así utilizar después los resultados como referencia a lo largo de la

tesis. En la sección 2.3 se explican las diferentes contribuciones en el estudio de las oscilaciones de Bloch en orden cronológico y en la sección 2.4 para la localización dinámica. Por último en la sección 2.5 se explica la metodología además de mencionar los trabajos en la solución de los problemas de dinámica electrónica con las álgebras de Lie (teorema de Wei-Norman).

En el capítulo 3 se estudia la interacción espín-órbita. En la sección 3.1 se tratan las generalidades del espín y en la sección 3.2 se explica la interacción espín-órbita y se exponen los trabajos en interacción espín-órbita relevantes a esta tesis.

En el cuarto capítulo se exponen los métodos y los resultados del trabajo de investigación en el que se basa esta tesis.

En la sección 4.1 se retoma el ejemplo del doble pozo cuántico agregándole interacción espín-órbita tipo Dresselhaus. En este ejemplo inédito se justifican las expresiones del hamiltoniano Dresselhaus en amarre fuerte, además de introducir la magnetización, que es la propiedad dinámica que utilizamos para describir la dinámica de espín.

En la sección 4.2 se detalla la deducción del hamiltoniano para el cristal unidimensional infinito con interacción espín órbita, se diagonaliza y se escribe la condición inicial en la base diagonal. En las secciones 4.3, 4.4, y 4.5 se soluciona dicho hamiltoniano y se estudia la dinámica electrónica con interacción espín-órbita en presencia de campo eléctrico: nulo, constante y dependiente del tiempo, respectivamente.

En el quinto y último capítulo se exponen las conclusiones y el trabajo que se podría realizar a futuro.

2. Dinámica electrónica en amarre fuerte

Las propiedades electrónicas y dinámicas de partículas cuánticas en potenciales periódicos unidimensionales y en presencia de campos eléctricos ha sido objeto de estudio en las últimas décadas (Kosevich, 2001), en especial por los fenómenos que se presentan, tales como las oscilaciones de Bloch y la localización dinámica. Para entender estos sistemas es necesario revisar algunos conceptos básicos que servirán como introducción a los sistemas periódicos y los fenómenos que en ellos ocurren. El sistema más simple en el que podemos analizar la dinámica de un electrón en la misma manera que en los sistemas periódicos es el doble pozo cuántico, mismo que se puede ver como un modelo simplificado de una molécula biatómica. Siguiendo la metodología utilizada por John Davies (Davies, 1998) obtendremos los elementos de matriz del hamiltoniano en el sistema de dos pozos, para después resolverlo y estudiar la dinámica electrónica en este sistema.

2.1 El doble pozo cuántico

Consideremos una partícula en dos pozos cuánticos unidimensionales idénticos, uno centrado en z_I y el otro en z_D , como se muestra en Fig. 2.1

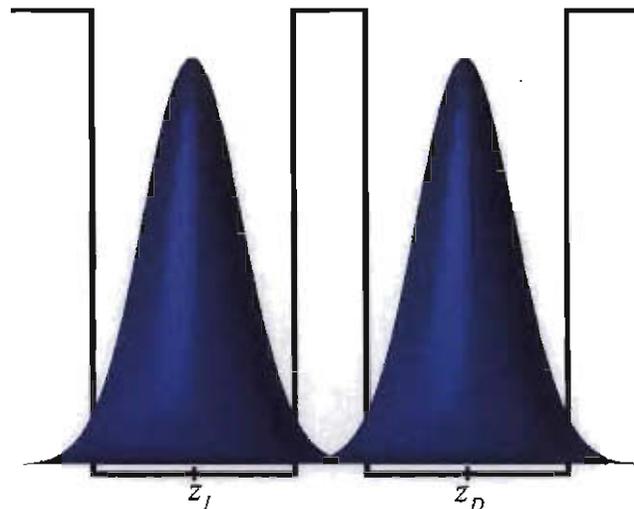


Figura 2.1. Funciones de onda de un doble pozo cuántico.

El hamiltoniano de este sistema puede escribirse como,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_I + \hat{V}_D, \quad (2.1)$$

donde \hat{T} es la energía cinética en el dirección espacial \hat{z} , y \hat{V}_I y \hat{V}_D los potenciales de los pozos de la izquierda y derecha respectivamente. La energía cinética de las otras direcciones espaciales se ha ignorado pues son irrelevantes para este análisis.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de este sistema puede resolverse analíticamente de manera exacta. Esto es, se pueden encontrar los eigenvalores y la función de onda del sistema haciendo corresponder las funciones de onda en las diferentes regiones o usando el formalismo de las matrices de transferencia.

Sin embargo, con fines de ilustrar la metodología utilizada en sistemas periódicos, seguiremos un camino diferente inspirado en la teoría de perturbaciones, que si bien sacrifica exactitud, conserva las propiedades físicas de interés.

Consideraremos sólo los estados base de cada uno de los pozos individuales, $|I\rangle$ y $|D\rangle$ y sus funciones de onda correspondientes $\phi_I(z) = \langle z|I\rangle$ y $\phi_D(z) = \langle z|D\rangle$, para estudiar los estados del sistema más bajos en energía. Notemos que este procedimiento no es exactamente el mismo que en teoría de perturbaciones, pues aquí ϕ_I y ϕ_D son soluciones de dos ecuaciones de Schrödinger diferentes, una para cada pozo:

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_I\right)\phi_I = \varepsilon\phi_I, \quad (2.2)$$

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_D\right)\phi_D = \varepsilon\phi_D, \quad (2.3)$$

por tanto ϕ_I y ϕ_D no son ortogonales, esto se muestra esquemáticamente en Fig. 2.1; las funciones de onda tienen un traslape. No obstante la idea es exactamente la misma que en teoría de perturbaciones. Escribimos la función de onda como una suma sobre los ϕ 's de cada pozo, $\psi = \sum_n a_n \phi_n$, $n \in \{I, D\}$ con a_n coeficientes a determinar. La ecuación de Schrödinger restringida (a sólo los estados base) es:

$$\hat{H} \sum_n a_n \phi_n = E \sum_n a_n \phi_n, \quad (2.4)$$

multiplicamos esta ecuación por la izquierda por ϕ_m^* e integramos para obtener:

$$\sum_n H_{mn} a_n = E \sum_n S_{mn} a_n, \quad (2.5)$$

donde

$$H_{mn} = \int \phi_m^* \mathbf{H} \phi_n dz, \quad S_{mn} = \int \phi_m^* \phi_n dz. \quad (2.6)$$

Lo nuevo en este caso es la aparición de la matriz S , que es diferente de la identidad pues ϕ_I y ϕ_D no son ortogonales. La ecuación matricial a resolver es

$$\mathbf{H}\psi = E\mathbf{S}\psi, \quad (2.7)$$

que es un problema de eigenvalor generalizado.

Para continuar son necesarios los elementos de matriz de la Ec. (2.7), comenzamos con H_{II}

$$H_{II} = \int \phi_i^* (\hat{T} + \hat{V}_I + \hat{V}_D) \phi_i dz = \varepsilon + \int \phi_i^* \hat{V}_D \phi_i dz = \varepsilon - c, \quad (2.8)$$

donde hemos utilizado la ecuación de Schrödinger en (2.2) para obtener ε . El término restante da el valor esperado del potencial \hat{V}_D para la función de onda $\phi_i(z)$ y es llamado campo cristalino (Davies, 1998). Lo denotamos por $-c$ para mostrar que es negativo, ya que los pozos son atractivos. El otro elemento de la diagonal H_{DD} es idéntico pues los pozos son idénticos, de tal forma que la energía de sitio, representada por los elementos de la diagonal del hamiltoniano, disminuye en $-c$. Esto se puede entender recordando que una función de onda disminuye su energía al ocupar un mayor espacio.

Los dos términos fuera de la diagonal son también iguales:

$$H_{DI} = \int \phi_D^* (\hat{T} + \hat{V}_I + \hat{V}_D) \phi_I dz = \varepsilon \int \phi_D^* \phi_I dz + \int \phi_D^* \hat{V}_D \phi_I dz = \varepsilon s - T. \quad (2.9)$$

El hecho de que las ϕ 's no son ortogonales da origen al término $s = S_{DI}$, el cual de otra manera sería nulo. El otro término $-T$ es el más importante y es llamado la transferencia, tuneleo o integral de traslape. Contiene el producto de dos funciones de onda y uno de los potenciales; y transfiere un electrón de un pozo a otro. También es negativo aunque depende de las funciones de onda. Es interesante notar que este término se parece al coeficiente a primer orden en teoría de perturbaciones.

Hemos ignorado los estados superiores de energía en esta descripción, esta aproximación será válida sólo si el traslape entre los pozos es débil; es decir, si las funciones de ondas están muy localizadas, lo que sucede si el potencial y la distancia entre los pozos son grandes. Tomando en cuenta lo anterior consideraremos $s = 0$, como si las funciones fuesen ortogonales, pues $s \ll 1$. Además ignoramos el término $-c$ en (2.8), que es lo mismo que renormalizar la energía ε . Con las consideraciones anteriores la ecuación de eigenvalores generalizada en (2.7) se convierte en una ecuación de eigenvalores ordinaria, con el hamiltoniano dado por

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon & -T \\ -T & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad (2.10)$$

entonces la ecuación de Schrödinger en forma matricial es

$$\begin{pmatrix} \varepsilon & -T \\ -T & \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_I \\ a_D \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} a_I \\ a_D \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

La ecuación matricial (2.11) tiene dos eigenvalores diferentes,

$$E_c = \varepsilon - T, \quad (2.12)$$

$$E_s = \varepsilon + T. \quad (2.13)$$

Estos eigenvalores difieren en una cantidad igual a dos veces el tuneo ($\Delta E = 2T$). Al describir los dos pozos aislados originalmente teníamos sólo una energía para cada estado base del pozo y una energía del sistema de 2ε . Al describir el sistema acoplado hay dos energías posibles. Los eigenvectores correspondientes son:

$$|e_c\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|I\rangle + |D\rangle) \quad (2.14)$$

$$|e_s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} (|I\rangle - |D\rangle) \quad (2.15)$$

Entonces si el electrón se encuentra en el estado inicial en el pozo de la izquierda, la función de onda a $t = 0$ es

$$|\psi(t=0)\rangle = |I\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|e_c\rangle + |e_s\rangle).$$

Para un tiempo posterior t la función de onda estará dada por:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-i(\varepsilon-T)t/\hbar} |e_c\rangle + e^{-i(\varepsilon+T)t/\hbar} |e_s\rangle \right], \\ |\psi(t)\rangle &= e^{-i\varepsilon t/\hbar} \left[\cos(Tt/\hbar) |I\rangle + i \operatorname{sen}(Tt/\hbar) |D\rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Una vez que tenemos la expresión para la función de onda en el tiempo, podemos calcular la probabilidad de que la onda se encuentre en el sitio de la izquierda, como función del tiempo

$$P_I = \langle \psi(t) | I \rangle \langle I | \psi(t) \rangle = \cos^2(Tt/\hbar) = \frac{1}{2} [1 + \cos(2Tt/\hbar)], \quad (2.17)$$

análogamente la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la derecha

$$P_D = \operatorname{sen}^2(Tt/\hbar) = \frac{1}{2} [1 - \cos(2Tt/\hbar)]. \quad (2.18)$$

Las ecuaciones (2.17) y (2.18) muestran que el electrón estará oscilando entre ambos pozos a una frecuencia $2|T|/\hbar = \Delta E/\hbar$, que es de hecho la diferencia entre

energías. La figura 2.2 muestra gráficamente como evoluciona la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo izquierdo (en negro) y en el pozo de la derecha (en rojo).

En resumen, hemos descrito la dinámica del sistema en términos de las funciones individuales de los pozos y los traslapes entre ellas, considerando los pozos relativamente separados y la magnitud del potencial atractivo suficientemente grande, tal que es posible considerar las funciones base de los pozos como ortogonales.

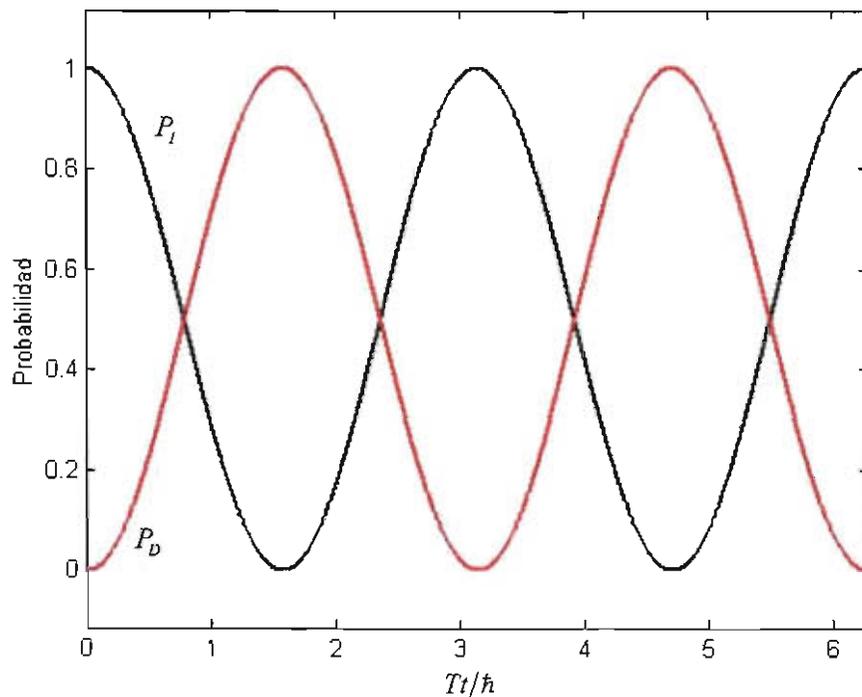


Figura 2.2. Probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda (negro) y en el pozo de la derecha (rojo) como función de Tt/\hbar .

Es de primordial importancia señalar que dentro de este desarrollo no hemos utilizado la forma explícita de las funciones base de los pozos, de donde surge la generalidad de este método y la posibilidad de utilizarlo incluso en casos en los que se desconoce la forma explícita de las funciones de onda.

Si quisiéramos encontrar expresiones explícitas para los diferentes elementos de matriz, sería conveniente utilizar las funciones de onda del pozo parabólico (oscilador armónico), ya que cualquier potencial atractivo bien comportado puede escribirse a primera aproximación como un potencial de este tipo.

2.2 Cristal unidimensional infinito

Una vez resuelto el problema de dos pozos, es relativamente fácil plantear y resolver el problema del cristal unidimensional infinito. Aprovechando la generalidad mostrada por el método anterior, en lo siguiente no hablaremos más de pozos sino de sitios, los que bien podrían ser átomos, puntos cuánticos, etcétera.

La figura 2.3 muestra de manera esquemática el sistema en cuestión. Se estudia la dinámica de un electrón en un potencial periódico unidimensional dado por una red de sitios separados a una distancia d , el parámetro de red, digamos a lo largo del eje z . Utilizaremos un método esencialmente igual al utilizado y publicado por Katsanos en 1995 para resolver la ecuación de Schrödinger en la aproximación de amarre fuerte para este sistema, a manera de introducción del procedimiento que utilizaremos en los capítulos subsecuentes. Consideremos a las funciones de onda muy localizadas en los sitios, de tal forma que es poco probable encontrar al electrón en alguna posición entre los sitios (Figura 2.3). Podemos describir al electrón de forma completa en términos de una base de funciones de onda localizadas en cada sitio $\{|i\rangle\}$ (funciones de Wannier), donde ia es la posición del i -ésimo sitio de la red, $i \in \mathbf{Z}$, N es el número de sitios de la red que de hecho consideraremos infinito, y el coeficiente en el desarrollo de la función de onda en estados de Wannier es $a_n = \langle n | \psi \rangle$.

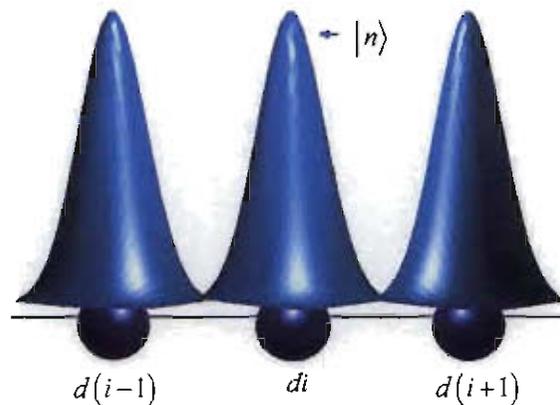


Figura 2.3. Esquema del cristal unidimensional con el traslape de las funciones de onda de los sitios. Donde $|n\rangle$ es la función de onda y di es la posición del i -ésimo sitio.

En la sección anterior mostramos cómo al juntar dos pozos el nivel de energía del estado base se separó en dos energías. Si juntamos N sitios, la energía del estado base se partirá en N valores y estos se mezclarán en una banda que tenderá a ser continua según N tiende a infinito.

El hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{T} + \sum_n \hat{V}_n, \quad (2.19)$$

donde \hat{T} es la energía cinética del electrón y \hat{V}_n es el potencial del n -ésimo sitio. La función de onda de cada sitio está dada en el espacio de posición por

$$\phi_n(z) = \int_{-\infty}^{\infty} dz \langle z | n \rangle, \quad (2.20)$$

y obedece la ecuación de Schrödinger

$$(\hat{T} + \hat{V}_n) \phi_n = \epsilon \phi_n. \quad (2.21)$$

Las funciones de onda de cada uno de los sitios son idénticas, excepto por su localización, entonces $\phi_n = \phi_0(z - nd)$, donde nd es la posición del n -ésimo sitio. Escribimos entonces la función de onda del electrón en el cristal como una suma sobre todos sitios

$$\psi = \sum_n a_n \phi_n, \quad (2.22)$$

despreciando contribuciones de los orbitales superiores. Utilizando ecuaciones (2.19) y (2.22) podemos escribir la ecuación de Schrödinger en forma matricial

$$\hat{H} \mathbf{a} = E \hat{S} \mathbf{a}, \quad (2.23)$$

con $\mathbf{a}' = (\dots a_{-1} \ a_0 \ a_1 \ \dots)$, E la energía, y \hat{S} la matriz de no ortogonalidad. Esta vez, a diferencia del caso de dos sitios, el rango de las matrices es infinito. Afortunadamente podemos utilizar el teorema de Bloch, que nos dice que los coeficientes a_n son simplemente factores de fase con forma específica, esto es:

$$\psi_k = \sum_n a_n^k \phi_n, \quad (2.24)$$

con $a_n^k = e^{ikn} = e^{iknd}$.

De tal forma que el renglón m -ésimo de la ecuación (2.23) se vuelve

$$\sum_n H_{mn} e^{iknd} = E_k \sum_n S_{mn} e^{iknd}, \quad (2.25)$$

con los elementos de matriz del hamiltoniano dados por

$$H_{mn} = \int \phi_m^* \left[\hat{T} + \hat{V}_n + \sum_{l \neq n} \hat{V}_l \right] \phi_n dz = \varepsilon S_{mn} + \sum_{l \neq n} V_{mn}^l, \quad (2.26)$$

donde hemos sacado el término \hat{V}_n de la suma para utilizar la ecuación de Schrödinger (2.21) y sustituir el operador hamiltoniano por su eigenvalor. Los elementos de la matriz de no ortogonalidad están dados por el producto interno de las funciones base de dos pozos

$$S_{mn} = \int \phi_m^* \phi_n dz, \quad (2.27)$$

obviamente $S_{nn} = 1, \forall n$.

En la sección anterior obtuvimos elementos de matriz para el hamiltoniano de dos sitios con estructura similar a la mostrada en Ec. (2.26), sin embargo en este caso los V_{mn}^l guardan mayor complejidad, pues pueden involucrar hasta tres sitios: las funciones de onda de los sitios m y n y el potencial del sitio l -ésimo. No obstante este tipo de contribuciones son pequeñas y pueden despreciarse (Davies, 1998). Adicionalmente utilizaremos la aproximación conocida como amarre fuerte o *tight-binding* en la que se consideran sólo las interacciones entre vecinos inmediatos, explícitamente

$$S_{mn} = V_{mn}^l = H_{mn} = 0 \quad \forall m \neq n \pm 1, \quad (2.28)$$

que nos resulta en elementos de matriz idénticos que en el doble pozo. Los elementos diagonales son

$$H_{mm} = \varepsilon S_{mm} + V_{mm}^{m-1} + V_{mm}^{m+1} = \varepsilon - 2c. \quad (2.29)$$

Aquí otra vez c es el campo cristalino, el valor esperado del potencial del sitio $m \pm 1$ en el orbital en el sitio m . El signo negativo aparece de la disminución de la energía de sitio por ocupar un espacio mayor. Observamos que los elementos diagonales no dependen del sitio y son

$$H_{mm} = \varepsilon. \quad (2.30)$$

Los elementos fuera de la diagonal en el hamiltoniano son nulos, excepto los adyacentes a la diagonal, los $H_{m,m \pm 1}$, formando una matriz tridiagonal.

Consideremos el término $H_{m,m+1}$, el índice l en $V_{m,m+1}^l$ puede ser sólo m o $m+1$, pero $l = m+1$ ya se ha utilizado para dar origen a ε . Esto implica $l = m$, entonces,

$$H_{m,m+1} = \varepsilon S_{m,m+1} + V_{m,m+1}^m = \varepsilon s - T, \quad (2.31)$$

donde s es la integral de no ortogonalidad para funciones de onda adyacentes; T es la integral de transferencia o tuneleo:

$$T = \int \phi_i^*(z) H \phi_{i+1}(z) dz. \quad (2.32)$$

Considerando que el traslape, aun entre vecinos inmediatos, es muy pequeño y que el potencial de confinamiento en cada sitio es de magnitud tal que la cantidad s es mucho menor que 1, podemos considerar los estados de Wannier como ortogonales, esto es $s = 0$, y entonces los elementos fuera de diagonal son:

$$H_{m,m+1} = -T \quad (2.33)$$

Utilizando la completez de la base de Wannier y la notación de segunda cuantización podemos escribir cualquier operador \hat{O} de la siguiente manera $\hat{O} = \sum_{i,j} O_{ij} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j$, donde \hat{c}_i^\dagger (\hat{c}_i) son los operadores de creación (aniquilación) de fermiones en el sitio con coordenada $i = id$, y $O_{ij} = \langle i | \hat{O} | j \rangle$ son los elementos de matriz del operador en la base, los cuales se obtienen a partir de la integral $\int \phi_i^*(z - id) \hat{O} \phi_j(z - jd) dz$.

El operador de ocupación por sitio dado por

$$\hat{n} = \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n, \quad (2.34)$$

al ser aplicado sobre un elemento de la base de Wannier, indica si el n -ésimo sitio se encuentra ocupado o no por una partícula.

Entonces el hamiltoniano escrito en segunda cuantización tiene dos términos, la energía de sitio y la de tuneleo:

$$\mathbf{H} = \sum_i \varepsilon \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i - T (\hat{c}_{i+1}^\dagger \hat{c}_i + \hat{c}_{i-1}^\dagger \hat{c}_i). \quad (2.35)$$

El primer término proviene de las componentes diagonales del hamiltoniano, donde ε es la energía de sitio dada por $\varepsilon = \varepsilon_i = \int \phi_i^*(z) H \phi_i(z) dz$.

El segundo término, es decir los elementos fuera de la diagonal (energía de tuneleo), se obtienen a partir de integrales de la forma (2.33). La localización de las funciones implica que un traslape entre funciones de onda de sitios no adyacentes despreciable (Grifoni y Hänggi, 1998), esto es una partícula en el i -ésimo sitio sólo puede tunelear a sitios que son primeros vecinos ($i \pm 1$).

Para resolver la dinámica escribimos la función de onda del electrón como una combinación lineal de los estados de sitio de Wannier $|\psi\rangle = \sum_n a_n |n\rangle$, tal que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ puede escribirse de la siguiente manera:

$$\sum_n [\varepsilon a_n - T a_{n-1} - T a_{n+1}] |n\rangle = E \sum_n a_n |n\rangle, \quad (2.36)$$

lo que es equivalente, por la ortogonalidad de las funciones de Wannier, a N (infinitas) ecuaciones de la forma,

$$\varepsilon a_n - T a_{n-1} - T a_{n+1} = E a_n, \quad (2.37)$$

Desarrollamos la función de onda por sitio en ondas planas $a_n = \sum_k a_k e^{iknd}$, y

sustituimos en la Ec. (2.37), de esta manera obtenemos la relación de dispersión,

$$E_k = \varepsilon - 2T \cos kd. \quad (2.38)$$

Una vez que conocemos las eigenenergías, la evolución de los eigenestados para el modo k esta dada por,

$$|a_k(t)\rangle = \frac{A_k}{\sqrt{N}} \exp(-iE_k t/\hbar) \sum_n \exp(iknd) |n\rangle, \quad (2.39)$$

con E_k dado por la Ec.(2.38), y donde A_k es un coeficiente que se determina por la condición inicial. La función de onda del electrón se escribe en esta base como

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k |a_k(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \frac{A_k}{\sqrt{N}} \exp(-iE_k t/\hbar) \sum_n \exp(iknd) |n\rangle, \quad (2.40)$$

Intercambiando sumas, identificamos la expresión para las funciones de onda por sitio de la siguiente manera:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \frac{1}{N} \sum_k A_k \exp(-iE_k t/\hbar) \exp(iknd) |n\rangle = \sum_n a_n(t) |n\rangle, \quad (2.41)$$

entonces

$$a_n(t) = \frac{1}{N} \sum_k A_k \exp(-iE_k t/\hbar) \exp(iknd). \quad (2.42)$$

Si la condición inicial es que el electrón esté totalmente localizado en el sitio central cero $a_n(t=0) = \delta_{n,0}$, lo que implica $A_k = N$, la ecuación (2.42) se reduce a

$$a_n(t) = \sum_k \exp(-iE_k t/\hbar) \exp(iknd), \quad (2.43)$$

en esta expresión resultante la energía es proporcional a un coseno. Para simplificar esta expresión se utiliza la relación de Jacobi-Anger (Abramowitz y Stegun, 1970)

$$\exp[ix \cos \theta] = \sum_{-\infty}^{\infty} i^n J_n(x) \exp[in\theta], \quad (2.44)$$

donde $J_n(x)$ es la función de Bessel de orden n .

Haciendo $x = 2Tt$ y $\theta = kd$ la ecuación (2.43) se puede finalmente escribir como

$$a_n(t) = \exp\left(\frac{i\pi n}{2}\right) \exp\left(-\frac{i\epsilon t}{\hbar}\right) J_n\left(\frac{2Tt}{\hbar}\right), \quad (2.45)$$

que nos da de manera exacta la función de onda por sitio para todo tiempo y por tanto la función de onda de electrón es

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \phi_n |n\rangle. \quad (2.46)$$

Es importante resaltar que la ecuación anterior (2.45) soluciona el problema en el caso en que la condición inicial es la partícula totalmente localizada en el sitio cero, y no son las eigenfunciones; estas eigenfunciones son las mostradas en la Ec. (2.39). De hecho, ya que las funciones de cada sitio no son eigenfunciones del hamiltoniano, una partícula inicialmente localizada en un sitio no se mantiene allí.

La probabilidad de encontrar el electrón en el sitio n -ésimo P_n , está dada por el cuadrado de la expresión en la ecuación (2.45)

$$P_n = J_n^2\left(\frac{2Tt}{\hbar}\right), \quad (2.47)$$

en la Figura 2.4 se muestra la evolución temporal de la probabilidad de encontrar a la partícula en el sitio cero, en el que inicialmente se encontraba totalmente localizado el electrón.

En esta figura se observa que la probabilidad decae de manera dramática: de ser 1 al tiempo inicial es menos de 0.1 a tiempos de $5Tt/\hbar$ ($\approx 13 \times 10^{-16}$ s para GaSb) y menos de 0.02 para tiempos de $20Tt/\hbar$ ($\approx 51 \times 10^{-16}$ s para GaSb) (Davies, 1998). Para tiempos largos la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio cero toma la forma (utilizando el desarrollo asintótico de la función Bessel para argumentos grandes)

$$P_{0, \infty} = \frac{\hbar}{\pi Tt} \cos^2\left(\frac{2Tt}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (2.48)$$

de esta manera para tiempos largos la probabilidad decae como t^{-1} .

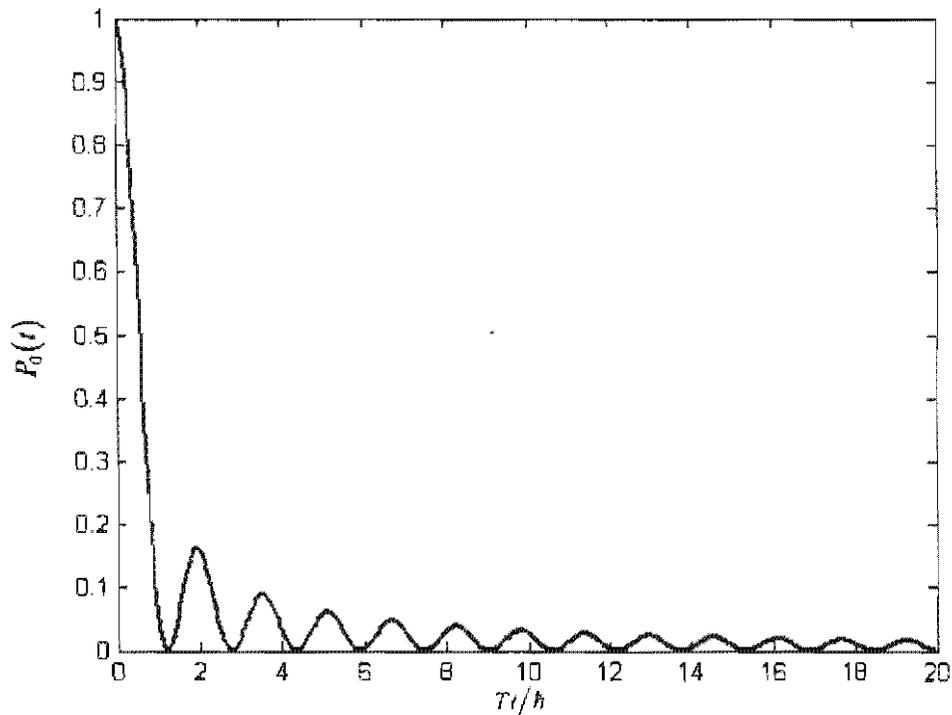


Figura 2.4. Probabilidad de encontrar al electrón en el sitio cero como función del tiempo en ecuación (2.47). Donde T es la energía de tunelaje.

Si observamos el comportamiento de la función de onda del electrón en todos los sitios, vemos que ésta se difunde rápidamente. La figura 2.5 muestra un mapa de colores, en donde en el eje y están etiquetados los sitios y el eje x representa el tiempo normalizado. Inicialmente la función de onda tiene probabilidad diferente de cero (uno) solo en el sitio cero. A medida que transcurre el tiempo, la probabilidad se dispersa ocupando un mayor número de sitios en la red.

La probabilidad se difunde rápidamente, o dicho de otro modo, para tiempos cortos es posible encontrar el electrón en una región considerablemente grande del sistema 80 sitios para tiempos de $20T/\hbar$ ($\approx 51 \times 10^{-16}$ s para GaSb).

En resumen, hemos resuelto el problema en términos de las funciones de onda por sitio, funciones de Wannier, con la aproximación de amarre fuerte; en esta representación y con la condición inicial del electrón totalmente localizado en el sitio central, encontramos expresiones exactas para los coeficientes de las funciones de Wannier para todo tiempo.

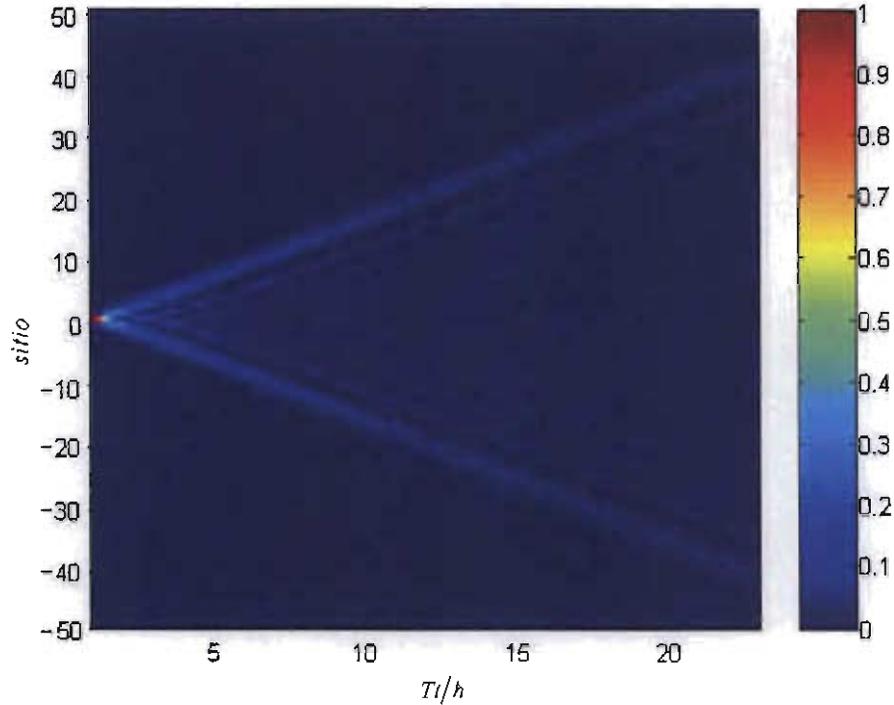


Figura 2.5 Probabilidad por sitio como función del tiempo. La magnitud de la probabilidad esta indicada por el color del punto, el sitio en el eje vertical y el tiempo en el eje horizontal, donde T es la energía de tuneleo. n n

Existe un gran número de trabajos dentro del contexto de este problema, concentrados en estudiar los aspectos estacionarios, como el espectro de energía, y los dinámicos, como la difusión en estos sistemas. Entre las cantidades físicas que se estudian para analizar y caracterizar las propiedades dinámicas de estos sistemas cuánticos se encuentran: el desplazamiento cuadrático medio, la función de participación y la entropía de Shannon (Griffoni y Hänggi, 1998).

El desplazamiento cuadrático medio $\langle r^2 \rangle$ es una cantidad que proporciona una estimación de la dispersión del paquete de ondas en el espacio. Para tiempos asintóticamente largos se espera que $\langle r^2 \rangle \sim t^\mu$, con t el tiempo y μ un parámetro que caracteriza la difusión del sistema, $\mu < 1$ para localización, $\mu = 1$ para difusión, y $\mu > 1$ para superdifusión. En particular, si $\mu = 2$ el movimiento se conoce como balístico (Grifoni y Hänggi, 1998). En el caso estudiado podemos calcular la dispersión cuadrática media utilizando la función de onda del electrón en (2.46) para obtener

$$\langle r^2 \rangle = \langle \Psi(t) | a^2 n^2 | \Psi(t) \rangle = a^2 \sum_n n^2 J_n^2 \left(\frac{2Tt}{\hbar} \right), \quad (2.49)$$

en esta última ecuación utilizamos la siguiente relación para las funciones Bessel

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 J_n^2(z) = 2 \left(\frac{z}{2} \right)^2, \quad (2.50)$$

que es un corolario del teorema del producto de las Bessel (Gradshteyn y Ryzhik, 1963), para simplificarla y obtener

$$\langle r^2 \rangle = 2T^2 a^2 t^2. \quad (2.51)$$

Este resultado caracteriza el sistema como superdifusivo o (también se le puede llamar) balístico. En la figura 2.6 se muestra una gráfica de la dispersión cuadrática media como función del tiempo. En ella es posible observar el comportamiento parabólico de la dispersión cuadrática media predicho por la Ec. (2.51). Este fue uno de los resultados encontrados y publicados, en 1995, por Katsanos *et al.*

La función de participación $F(t)$ está relacionada con el número de sitios del sistema con probabilidad diferentes de cero

$$F(t) = \left[\sum_n |a_n(t)|^4 \right]^{-1}. \quad (2.52)$$

Si la función de onda Ψ está normalizada: $F=1$ para un estado completamente localizado en un sitio y $F=N$ si la onda se encuentra extendida uniformemente sobre los N sitios de la red. En la figura 2.7 se muestra la función de participación para la red unidimensional de sitios estudiada en esta sección. Observamos que inicialmente la función de participación es uno, y conforme transcurre el tiempo, ésta va aumentando de manera escalonada, con períodos de tiempo en los que se mantiene constante de alrededor de $T/2\hbar$ segundos.

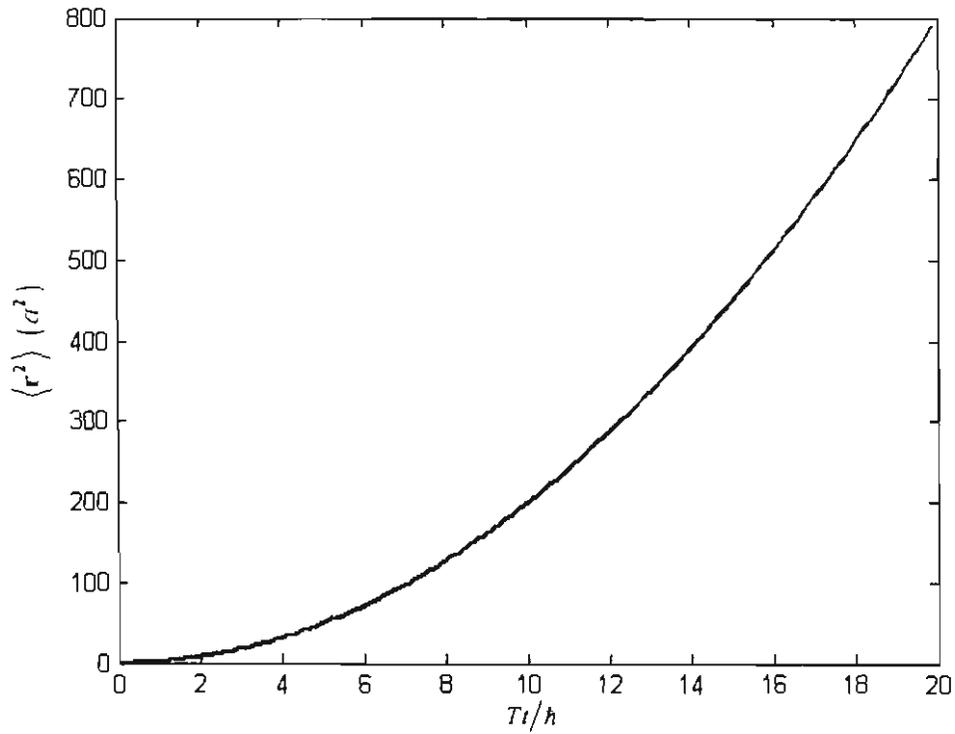


Figura 2.6. Dispersión cuadrática media como función del tiempo de ecuación (2.51). La unidad de tiempo es \hbar/T , donde T es la energía de tunelamiento, y en la dispersión la unidad es el parámetro de red al cuadrado.

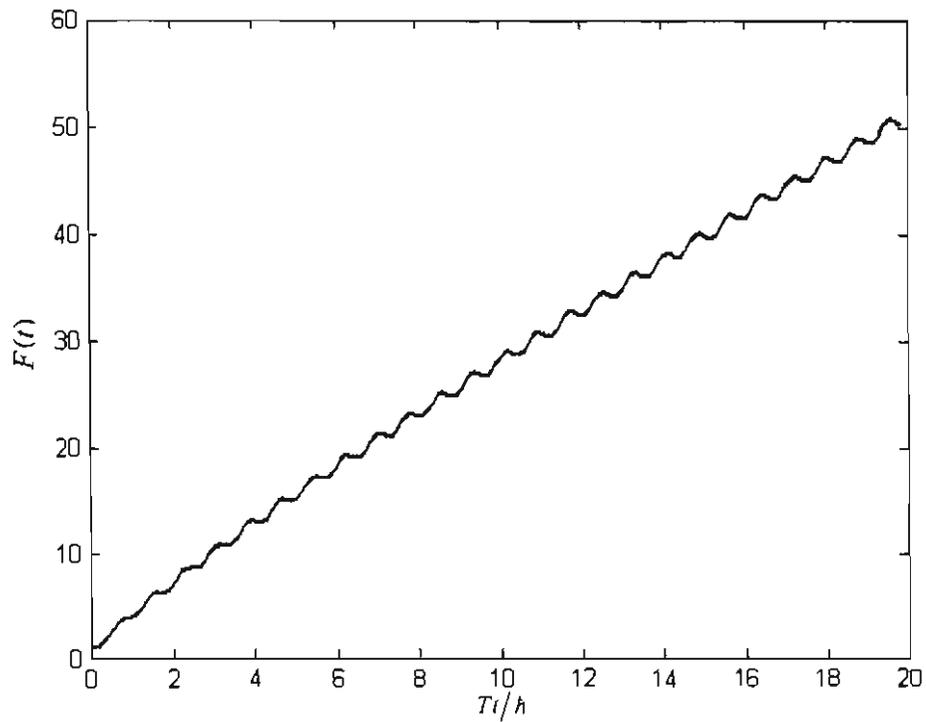


Figura 2.7. Función de participación como función del tiempo de ecuación (2.52). La unidad de tiempo es \hbar/T , donde T es la energía de tunelamiento.

2.3 Campo eléctrico constante: Oscilaciones de Bloch

Las diferentes propiedades dinámicas que caracterizan al sistema de la sección anterior muestran el comportamiento superdifusivo del electrón, donde parámetros como la energía de tunelaje T , o el parámetro de red a , sólo cambian la rapidez con que se difunde el electrón a través del sistema. Este comportamiento, sin embargo, cambia drásticamente en presencia de campos eléctricos, siendo esta una de las razones por las que se estudian dichas propiedades en este tipo de sistemas. De hecho, los trabajos en la manipulación de la evolución del comportamiento de electrones de banda con campos eléctricos externos han progresado considerablemente en los últimos años. El interés se ha enfocado principalmente en la propagación de electrones en estructuras periódicas espacialmente, controlados por campo eléctricos dependientes del tiempo, despreciando generalmente la interacción Coulombiana (Griffoni y Hänggi, 1998).

Explícitamente la presencia de un campo eléctrico constante ξ se refleja en el hamiltoniano como un potencial con dependencia lineal en la posición $V = -e\xi x$, que se escribe en la base de Wannier como

$$V = \sum_n -e\xi a \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n = -\sum_n e\xi a \hat{n}, \quad (2.53)$$

donde e es la carga del electrón y hemos utilizado la definición del operador de número Ec. (2.34).

Desde la década de los 60's se sabe que un campo eléctrico uniforme puede destruir la estructura de bandas de Bloch en una red cristalina. Esto sucede porque rompe la simetría de traslación, creando una dependencia de la energía con la posición Ec. (2.53), lo que resulta en la discretización del espectro de energía, misma que se conoce como escalera de Wannier-Stark (Wannier, 1962),

$$E = \varepsilon + a n e \xi, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (2.54)$$

La confirmación experimental de este efecto fue establecida por mediciones del espectro de absorción óptica en superredes semiconductoras por Méndez en 1988. Los saltos de energía de la ecuación (2.54) son de magnitud $a e \xi$; para campos eléctricos realistas ($\xi < 10^6$ V/cm) y a del orden de un Armstrong (para un sólido), esta magnitud es muy pequeña, es por esto que la formación de la escalera de Stark se observó por primera vez en una superestructura, ya que estas últimas tienen parámetros de red del orden de $\approx 100 \text{ \AA}$.

En la demostración experimental se realizó un estudio de fotoluminiscencia a una superred de capas intercaladas de GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As, con parámetro de red de 65Å. La fotoluminiscencia es una técnica en la que se irradia la muestra con luz de frecuencia conocida (con energía mayor al gap del semiconductor) y se registra la intensidad de la radiación emitida por la muestra producto de la excitación. En el experimento, Méndez *et al.*, obtuvieron el espectro de luminiscencia de la superred en presencia de diferentes campos eléctricos, y observaron que conforme aumenta el campo eléctrico aparecen nuevos picos en el espectro; dado que la distancia entre estos picos es de magnitud $ae\xi$, los atribuyen a la formación de la escalera de Stark en el espectro energético de la estructura. La figura 2.9 muestra los resultados de Méndez. En el cuarto y quinto espectro (de arriba hacia abajo) están señalados los picos producto de la formación de la escalera de Stark.

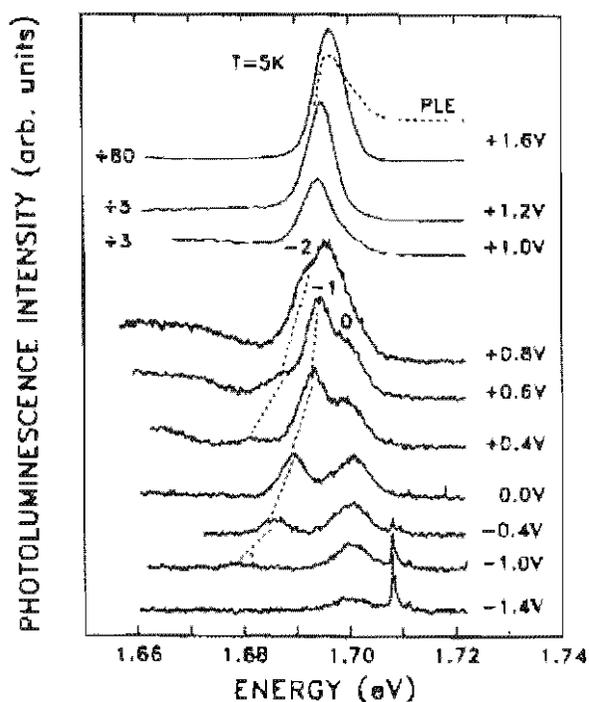


Figura 2.9 Espectro de fotoluminiscencia (PL) de una súper red de 30–35-Å de GaAs/Ga_{0.65}Al_{0.35}As para diferentes voltajes. El campo eléctrico ξ (en kilovolts por centímetro) está relacionado al campo externo, V_{ext} , por la relación $\xi \cong 20|V_{ext} - 1.6V|$. Los picos etiquetados por 0, -1, -2 corresponden a las diferentes transiciones inter-bandas. (Tomada de Méndez *et al.*, 1988).

En 1973 Hidetoshi Fukuyama, Robert A. Bari y Hans C. Fogedby estudiaron electrones bajo la aproximación de amarre fuerte en presencia de campo eléctrico uniforme, como en el experimento de Méndez *et al.*, para diferentes condiciones de frontera: sistema infinito, sistema periódico y periódico con paredes rígidas; encontraron expresiones para la función de onda $\psi(t)$ y para la probabilidad de ocupación del n -ésimo sitio de la red $|\phi_n|^2$ en términos de un propagador. En general, el propagador es el núcleo de la transformación lineal que lleva la función de onda de un estado inicial, en este caso a $t=0$, a un tiempo posterior t . Fukuyama *et al.* encontraron que el propagador del electrón de un sitio m a uno n en el tiempo t , en un cristal unidimensional infinito bajo un campo eléctrico ξ es

$$K(m, n, t) = e^{im(-e\xi a)t/\hbar} e^{-i(m-n)(-e\xi a t/\hbar - \pi)/2} J_{m-n} \left[\frac{4T}{e\xi a} \operatorname{sen} \left(\frac{e\xi a t/\hbar}{2} \right) \right], \quad (2.55)$$

Esta expresión muestra el movimiento oscilatorio del electrón, el cual resulta en un confinamiento del electrón en una región limitada del espacio y es un comportamiento muy distinto al del electrón en ausencia de campo eléctrico. El confinamiento se hace evidente de notar que la magnitud de K está dada por la función Bessel de orden $m-n$. Supongamos que como en el problema de la sección anterior el electrón inicialmente se encuentra en el sitio 0, osea $n=0$ en la ecuación (2.55), entonces ya que la magnitud del argumento de la Bessel es a lo más $4T/e\xi a$, existe un n' a partir del cual $J_{n'}, J_{n'+1}, \dots$ y $J_{-n'}, J_{-n'-1}, \dots$ son iguales a cero para todo tiempo, resultando en un confinamiento del electrón entre el sitio $-n'$ y n' . La longitud de dicha región es inversamente proporcional al valor del campo aplicado, pues el argumento de la función Bessel va como ξ^{-1} . Este comportamiento inusual de una cuasipartícula en un cristal fue predicho por Bloch en 1928, y por esa razón se le denomina oscilación de Bloch.

La existencia de las oscilaciones de Bloch, el análogo dinámico de la escalera de Wannier-Stark, fue corroborada experimentalmente (Washke *et al.*, 1993) a través de la detección de radiación electromagnética coherente en las oscilaciones de Bloch de portadores de carga en una superred semiconductor. En este experimento, Christian Waschke *et al.*, utilizaron una heteroestructura de 35 periodos, cada uno de ellos formados por una capa de GaAs de 97 Å, y otra de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ de 17 Å como barrera; esta heteroestructura se obtuvo por la técnica de crecimiento epitaxial por haz

molecular sobre una capa de 2500 Å de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, misma que a su vez se creció sobre un sustrato de GaAs con dopado tipo n . Sobre los 35 periodos de GaAs - $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ se creció una capa de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ con 3500 Å de ancho, y sobre esta última se colocó un contacto Schottky de Cr semitransparente, de tal forma que fue posible crear una diferencia de potencial entre este contacto y el sustrato dopado, generando un campo eléctrico constante en la heteroestructura periódica. En este sistema periódico se realizó primero un estudio para corroborar la existencia de la escalera de Stark, y se obtuvo el espectro de fotocorriente de baja excitación (un procedimiento similar al realizado por Méndez *et al.*).

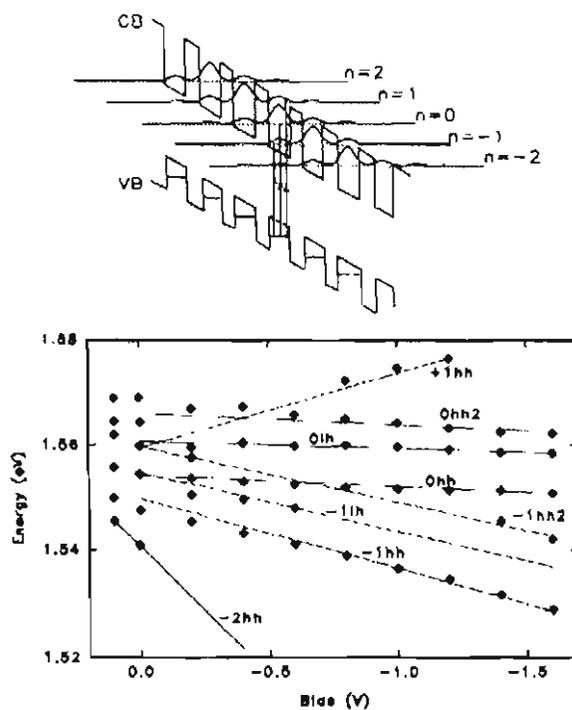


Figura 2.10 Superior: Representación Esquemática de las transiciones de la banda de valencia (VB) con la banda de conducción (CB) de una súper red semiconductor con un voltaje externo. Inferior: Gráfica tipo abanico de las escaleras de Wannier Stark observadas en el espectro de fotocorriente de la heteroestructura a 4 °K y baja densidad de excitación. (Tomada de Waschke *et al.*, 1993).

La parte superior de la figura 2.10 muestra de manera esquemática las transiciones que se realizan entre la banda de conducción y de valencia después de la discretización de ambas bandas por la presencia del campo eléctrico constante. Los índices n no se refieren a los sitios, sino a los diferentes niveles de energía. En la parte

inferior de figura 2.10, la gráfica muestra como puntos romboidales las diferentes transiciones detectadas a través del espectro de fotocorriente. El eje x indica el voltaje aplicado en la muestra y, en el eje y , la energía de las transiciones. En este gráfico se observa la escalera de Stark y como varía ésta con el voltaje aplicado.

Para mostrar la existencia de las oscilaciones de Bloch, se procedió de manera diferente. Se colocó la muestra en un crióstato cerrado a 15°K , donde se irradió con un pulso óptico de longitud de onda de 802 nm en un ángulo de 45° . La radiación emitida por la muestra, casi colineal al haz reflejado, es proyectado por espejos parabólicos en una antena de dipolo del rango de subpicosegundos ($50\text{-}\mu\text{m}$). Esta espectroscopía está en el dominio de frecuencias del orden de los terahertz, y es sólo sensitiva a procesos de emisión coherente (Washke *et al.*, 1993); se aplicó un campo eléctrico entre el sustrato y el contacto, y se registró la radiación en la antena.

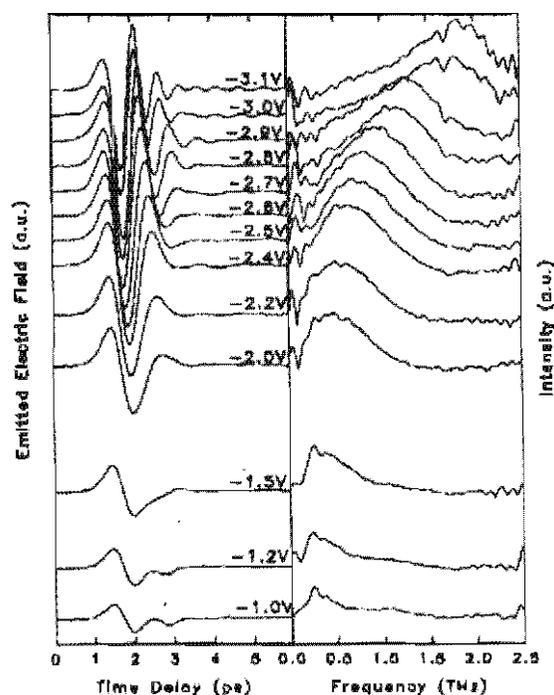


Figura 2.11 Izquierda: Radiación electromagnética coherente como función del tiempo para diferentes voltajes en la heteroestructura. Derecha: Transformadas de Fourier de los espectros de radiación. (Tomada de Waschke *et al.*, 1993).

La gráfica en figura 2.11 muestra la radiación electromagnética coherente detectada por la antena como función del tiempo, para diferentes voltajes en la muestra. En la parte derecha se muestra el espectro de Fourier de la radiación detectada. Para

campos relativamente bajos ($-1, -1.5 \text{ V}$) los picos en este espectro son independientes del voltaje. Sin embargo, para voltajes superiores ($> 1.5 \text{ V}$) el pico en el espectro se mueve continuamente a frecuencias mayores. Este comportamiento se puede predecir observando que la frecuencia en el argumento de la función Bessel de la ecuación (2.55) es lineal con el campo eléctrico.

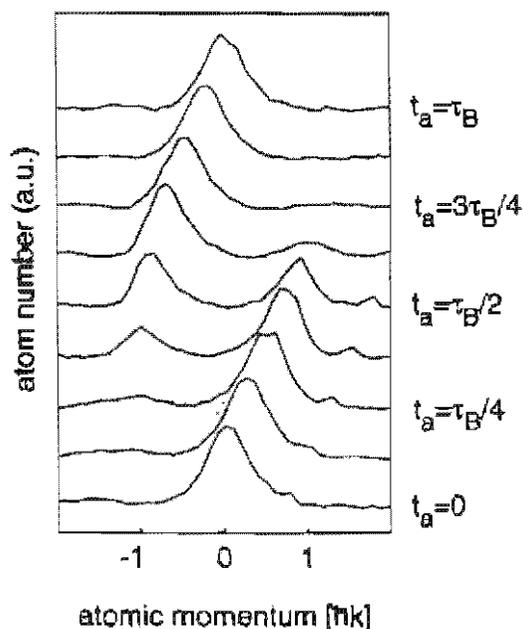


Figura 2.12 Oscilaciones de Bloch de átomos: distribuciones de momento para tiempo de 0 a 8.2 ms. (Tomada de Dahan *et al.*, 1993).

La presencia de las oscilaciones en la radiación electromagnética y la dependencia de éstas con el campo eléctrico muestran la presencia de oscilaciones de Bloch. Las heteroestructuras no son los únicos sistemas en los que es posible encontrar evidencia experimental de las oscilaciones de Bloch. Maxime Ben Dahan, *et al.* (Dahan et al, 1996) mostraron la existencia de este fenómeno en átomos de Cesio superenfriados y sujetos a un potencial óptico periódico. En el experimento se utiliza un láser Raman unidimensional de enfriamiento para preparar un gas de átomos libres con dispersión de momento $\delta p = \hbar k/4$ en alguna dirección fija. En esta misma dirección se crea un potencial periódico, iluminando los átomos con una luz láser constante. Después miden la distribución del momento de los átomos mientras aplican un potencial de rampa simulando el campo eléctrico constante, un potencial lineal con la posición. La figura 2.12 muestra las distribuciones de momento en los átomos de Cesio obtenidas a

diferentes tiempos, en ella se puede observar la presencia de oscilaciones de Bloch; el máximo en la distribución oscila en el tiempo con un periodo en el rango de los milisegundos, 10 órdenes de magnitud mayor que el periodo de las oscilaciones de Bloch en semiconductores.

2.4 Campo eléctrico dependiente del tiempo: Localización dinámica

Los estudios en estos sistemas periódicos no se limitaron a campos eléctricos constantes. El trabajo teórico de Fukuyama *et al.* fué extendido por Dunlap y Kenkre a campos eléctricos dependientes del tiempo; ellos remplazaron el término en el hamiltoniano de la ecuación (2.53) por uno más general,

$$V = -\sum_n e\xi f(t) a_n, \quad (2.56)$$

donde ξ es otra vez una constante, y $f(t)$ una función que contiene la dependencia temporal. Utilizando el método de las características, solucionaron las ecuaciones diferenciales resultantes de escribir la ecuación de Schrödinger, y encontraron expresiones en forma de integral para la magnitud cuadrada de la función de onda por sitio y para la dispersión cuadrática media:

$$|\phi_m(t)|^2 = J_m^2 \left(2T \left[v^2(t) + u^2(t) \right]^{1/2} \right), \quad (2.57)$$

$$\langle m^2 \rangle = 2T^2 \left[v^2(t) + u^2(t) \right], \quad (2.58)$$

con

$$u(t) = \int_0^t \cos[\xi\eta(t')] dt', \quad v(t) = \int_0^t \text{sen}[\xi\eta(t')] dt', \quad \text{y} \quad \eta(t) = \int_0^t f(t') dt'.$$

Las expresiones en las ecuaciones (2.57) y (2.58) se reducen a las obtenidas para campo eléctrico constante por Hidetoshi *et al.* si $f(t) = 1$, y a las que se obtendrían a partir de Ec. (2.45) si $\xi = 0$. Dunlap estudió el caso particular de un campo eléctrico sinusoidal $f(t) = \cos \omega t$. Para este caso las ecuaciones (2.57) y (2.58) se reducen a

$$u(t) = (1/\omega) \int_0^{\omega t} d\tau \cos \left[(\xi/\omega) \text{sen} \tau \right], \quad (2.59)$$

$$v(t) = (1/\omega) \int_0^{\omega t} d\tau \text{c sen} \left[(\xi/\omega) \text{sen} \tau \right], \quad (2.60)$$

y se presenta el fenómeno de localización dinámica que describimos en detalle a continuación.

Anteriormente hemos visto que en ausencia de campo eléctrico la partícula se dispersa en todo el espacio; que para campos eléctricos constantes la partícula permanece en una región del espacio; y que a determinados instantes de tiempo se encuentra totalmente localizada en el sitio inicial. En la presencia de campo eléctrico dependiente del tiempo, la localización de la partícula depende de la magnitud del campo en relación con la magnitud de la frecuencia del mismo, ambos parámetros externos.

Para entender esta localización es necesario notar que las ecuaciones (2.59) y (2.60) muestran que siempre que ωt sea igual a un número entero de veces 2π , $u(t)$ toma la forma integral de la función Bessel de orden cero, $u(t) = [J_0(\xi/\omega)]t$, y $v(t)$ se anula. Por tanto, para un t general las diferencias respectivas entre u y v de ecuaciones (2.59) y (2.60) y sus valores cuando $\omega t = 2\pi n$, son funciones acotadas con periodo $2\pi/\omega$, y su magnitud no puede exceder π/ω . Denotamos estas diferencias relativas como $A_u(t)$ y $A_v(t)$:

$$A_u(t) = u(t) - tJ_0(\xi/\omega), \quad (2.61)$$

$$A_v(t) = v(t). \quad (2.62)$$

Con ayuda de estas diferencias reescribimos la probabilidad por sitio y el desplazamiento cuadrático medio:

$$|\phi_m(t)| = J_m^2 \left(2Tt \left[J_0^2(\xi/\omega) + f_1(t)J_0(\xi/\omega) + f_2(t) \right]^{1/2} \right), \quad (2.63)$$

$$\langle m^2 \rangle = 2T^2 t^2 \left[J_0^2(\xi/\omega) + f_1(t)J_0(\xi/\omega) + f_2(t) \right], \quad (2.64)$$

con $f_1(t) = 2(A_u/t)$ y $f_2(t) = 2(A_u^2 + A_v^2)/t^2$.

Las funciones $f_1(t)$ y $f_2(t)$ contienen a las funciones acotadas $A_u(t)$ y $A_v(t)$ y por tanto decaen a tiempos largos (Dunlap y Kenkre, 1986). Entonces las expresiones en ecuaciones (2.63) y (2.64) a tiempo largos se pueden escribir como:

$$|\phi_m(t)| = J_m^2(2T^{\text{ef}}t), \quad t \gg 2\pi/\omega, \quad (2.65)$$

$$\langle m^2 \rangle = 2(T^{\text{ef}}t)^2, \quad t \gg 2\pi/\omega, \quad (2.66)$$

que se pueden comparar con las ecuaciones (2.45) y (2.49) del caso sin campo eléctrico, donde se presenta la difusión. La única diferencia entre el caso libre y el caso del campo sinusoidal es que en este caso existe un tuneo efectivo

$$T^{\text{ef}} = TJ_0(\xi/\omega). \quad (2.67)$$

Así el campo eléctrico sinusoidal tiene el efecto de reducir la velocidad efectiva, o la razón de deslocalización de la partícula en el sistema. De la ecuación (2.67) vemos que el tuneo efectivo se anula siempre que ξ/ω sea alguna raíz de J_0 . Entonces la dispersión cuadrática media permanece acotada, por lo tanto, la partícula está localizada por la acción del campo eléctrico dependiente del tiempo. A este comportamiento Dunlap y Kenkre le llamaron localización dinámica.

La idea principal que emergió de los estudios anteriores, es que las propiedades dinámicas de los electrones son ajustables a través de parámetros del campo externo, tales como amplitud y frecuencia, con consecuencias reales en experimentos (Zhu et al., 1999).

En un segundo trabajo los mismos autores (Dunlap y Kenkre, 1988) ampliaron este estudio al incluir el efecto de la dispersión de la partícula por imperfecciones en la red. Utilizando la ecuación estocástica de Liouville encontraron soluciones exactas para la dispersión cuadrática media y obtuvieron la constante de difusión para un campo alterno sinusoidal.

Trabajos posteriores agregaron asimetría al sistema: en 1994, Nazareno, da Silva y Brito (Nazareno *et al.*, 1994) consideraron una impureza en el centro del cristal bajo un campo eléctrico constante, explícitamente agregaron el término

$$\delta_{0i} c_i^\dagger c_i, \quad (2.68)$$

y el campo eléctrico constante de la ecuación (2.53) en el hamiltoniano de la ecuación (2.35). Mostraron que en este sistema se produce localización espacial en la región de la impureza y que la magnitud del campo eléctrico constante ξ determina que tan localizado se encuentra el electrón en dicha región.

En 1995, Katsanos, Evagelou, y Xiong estudiaron la dinámica electrónica sin campo eléctrico en sistemas periódicos y no periódicos (Thue-Morse); corroboraron el comportamiento ballístico en sistemas periódicos, y mostraron uno superdifusivo de orden superior en los sistemas no periódicos, estudiando la dependencia temporal de la dispersión cuadrática media.

Por otro lado, X-G Zhao (Zhao, 1994) mostró que si se toma el sistema más allá del amarre fuerte, esto es, si se considera interacción no sólo los primeros vecinos, la localización dinámica desaparece ante campos eléctricos alternantes con dependencia sinusoidal. Sin embargo, en un trabajo posterior en colaboración con Zhu y Niu (Zhu *et*

et al., 1999) demostró que ante campos eléctricos de onda rectangular la localización dinámica se recupera, y a esto llamaron localización dinámica exacta, para diferenciarla de la que se presenta bajo la aproximación a primeros vecinos.

Posteriormente, Dignam y Sterke (Dignam y Sterke, 2002) examinaron las condiciones para la localización dinámica de electrones en un potencial periódico ante la presencia de un campo alterno aplicado. Establecieron que sólo campos eléctricos que son discontinuos en todos los cambios de signo pueden generar localización dinámica exacta; además, propusieron un procedimiento general para construir campos AC que resulten en localización dinámica. Este procedimiento se basa en una condición sobre el área bajo la curva en una grafica del campo eléctrico externo $\xi f(t)$ como función del tiempo. Más adelante complementaron estos resultados en colaboración con Domachuck y Wan (Domachuck *et al.*, 2002), en donde establecieron: 1) que aunque la localización dinámica exacta puede ocurrir sólo en campos alternantes discontinuos, en todos los cambios de signo la presencia de localización dinámica es altamente tolerante a suavizar estas discontinuidades; 2) que en el límite de amarre fuerte todo campo alterno simétrico garantiza exhibir localización dinámica para alguna amplitud de campo, y 3) un teorema de área bajo la curva para campos eléctricos simétricos con sólo dos ceros por período.

Existen trabajos extensos en donde se hace referencia a los principales resultados para el sistema que nos interesa estudiar (Griffoni y Hänggi, 1998). Así mismo, hay monografías especializadas, por ejemplo la de Kosevich (Kosevich, 2001), en la que se ofrece una interpretación de los fenómenos de oscilaciones de Bloch y la localización dinámica, además de ponerlos en otro contexto, el de los solitones; otra monografía es la de Hartmann (Hartmann *et al.*, 2004), donde se considera al electrón distribuido espacialmente en forma gaussiana como condición inicial, y se estudia el problema cuasi clásicamente por medio de la aproximación de una sola banda.

2.5 Solución mediante álgebras de Lie

Otro enfoque para resolver el problema dinámico es el que utiliza un método de operadores, elementos de un álgebra de Lie, para construir el operador de evolución temporal $U(t)$. En 1963 James Wei y Edgard Norman publican en el número 4 del volumen 4 del Journal of Mathematical Physics (Wei y Norman, 1963) el artículo titulado "Lie Algebraic Solution of Linear Differential Equations" y en el que establecen un teorema de gran importancia.

A continuación siguiendo la metodología de Wei y Norman vamos a explicar sus resultados, ya que estos han sido utilizado con gran éxito en el contexto de la dinámica cuántica de electrones en sistemas periódicos, y han posibilitados la obtención de generalizaciones, además de corroborar resultados anteriores.

Consideramos la siguiente ecuación diferencial de primer orden

$$\frac{d\hat{U}(t)}{dt} = \hat{H}(t)\hat{U}(t), \hat{U}(0) = \hat{I}, \quad (2.69)$$

donde \hat{H} y \hat{U} son operadores lineales dependientes del tiempo en un espacio de Banach, o sea un espacio vectorial normado en el cual toda secuencia de Cauchy converge, o bien en un espacio dimensional finito. El operador \hat{H} puede ser el hamiltoniano en la ecuación de onda de Schrödinger o en la ecuación de movimiento o bien la matriz de transición de probabilidades en una ecuación maestra. Usualmente uno puede escribir el hamiltoniano como una combinación lineal de operadores que forman una base de dimensionalidad m (finito),

$$\hat{H}(t) = \sum_{i=1}^m a_i(t)\hat{H}_i, \quad (2.70)$$

donde las a_i 's son un conjunto de funciones complejas linealmente independientes que dependen del tiempo, y las H_i 's son operadores constantes en el tiempo.

El conjunto de operadores $\{\hat{H}_1, \hat{H}_2, \dots, \hat{H}_m\}$ puede ser extendido por conmutación repetitiva a un álgebra de Lie \mathcal{L} de dimensión n , usualmente con $n \geq m$. Este es siempre el caso si $\hat{H}(t)$ es un operador con representación matricial finita.

Las álgebras de Lie son una importante clase de álgebra no asociativa y se deben al matemático noruego Sophus Lie (184-1899). En general, un álgebra de Lie \mathcal{L} es un espacio vectorial con soporte real o complejo y con una ley de composición o producto bracket $B(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) = [\mathbf{X}, \mathbf{Y}]$, $B: \mathcal{L} \times \mathcal{L} \rightarrow \mathcal{L}$ que satisface

$$[\mathbf{X}, \mathbf{Y}] = -[\mathbf{Y}, \mathbf{X}] \text{ (Antisimetría)}, \quad (2.71)$$

$$[\mathbf{X}, a\mathbf{Y} + b\mathbf{Z}] = a[\mathbf{X}, \mathbf{Y}] + b[\mathbf{X}, \mathbf{Z}] \text{ (Ley distributiva)}, \quad (2.72)$$

$$[\mathbf{X}, [\mathbf{Y}, \mathbf{Z}]] + [\mathbf{Y}, [\mathbf{Z}, \mathbf{X}]] + [\mathbf{Z}, [\mathbf{X}, \mathbf{Y}]] = 0 \text{ (Identidad de Jacobi)}. \quad (2.73)$$

Wei y Norman mostraron que si \mathcal{L} , el álgebra de Lie que contiene los operadores constantes con los que se escribe el hamiltoniano, es de dimensión finita, el

sistema de ecuaciones en (2.69) se puede desacoplar en un conjunto de ecuaciones independientes. Explícitamente

$$\hat{U}(t) = \hat{U}_1(t) \hat{U}_2(t) \dots \hat{U}_n(t), \quad (2.74)$$

donde cada $\hat{U}_i(t)$ es un operador que satisface una ecuación de la forma,

$$\frac{d}{dt} \hat{U}_i(t) = \dot{g}_i(t) \hat{H}_i \hat{U}_i(t), \quad \hat{U}_i(0) = \mathbf{I} \quad (2.75)$$

y a su vez las $\dot{g}_i(t)$ son funciones complejas del tiempo. Es evidente que las soluciones a las ecuaciones (2.75) son (Magnus, 1954):

$$\hat{U}_i(t) = \exp \left[g_i(t) \hat{H}_i \right], \quad (2.76)$$

y entonces el operador $\hat{U}(t)$ se vuelve un producto de exponenciales

$$\hat{U}(t) = \prod_{i=1}^n \exp \left[g_i(t) \hat{H}_i \right]; \quad (2.77)$$

las funciones escalares $g_i(t)$'s son soluciones del conjunto de ecuaciones diferenciales no lineales dadas por

$$\frac{d}{dt} g_i(t) = \sum_{k=1}^n \eta_{ik} a_k(t), \quad g_i(0) = 0 \quad (2.78)$$

donde las η_{ik} 's son funciones no lineales de las $g_i(t)$'s.

De esta manera se reducen las ecuaciones diferenciales acopladas implícitas en (2.69) por las ecuaciones diferenciales no lineales desacopladas en (2.78).

El conjunto de elementos de \mathcal{L} que se puede obtener a través de la operación bracket de dos elementos de \mathcal{L} forman el álgebra derivada, \mathcal{L}' .

El álgebra derivada de \mathcal{L}' se denota \mathcal{L}'' . Por inducción se tiene que un álgebra derivada es subconjunto de todas las álgebras de grado menor, es decir

$$\mathcal{L} \supset \mathcal{L}' \supset \mathcal{L}'' \supset \dots \quad (2.79)$$

Un álgebra de Lie \mathcal{L} se dice que es soluble si $\mathcal{L}^{(h)} = \{0\}$, para algún h . Para este caso, las η_{ik} 's forman una matriz triangular y el sistema en (2.78) puede solucionarse por cuadratura, por ejemplo.

Al resultado plasmado en la ecuación (2.77) Wei y Norman lo llamaron teorema de desacoplamiento, sin embargo, se le conoce junto con los resultados anteriores como teorema de Wei-Norman. Este teorema tiene múltiples aplicaciones en Mecánica Cuántica, señaladas incluso por los mismos autores (Wei y Norman, 1963). Ellos

aplicaron este formalismo al cálculo de las probabilidades de transición Landau-Teller en el oscilador armónico y de la cinética de la reacción de intercambio del deuterón.

Las primeras aplicaciones de los resultados de Wei y Norman se realizaron en el oscilador armónico, ya que en este sistema surge de manera natural la estructura algebraica de Lie, al escribir el hamiltoniano en términos de operadores de ascenso y descenso. De hecho, fue en este contexto donde Wolf y Korsch (Wolf y Korsch, 1988) ejemplificaron su contribución a la teoría, la factorización del álgebra de Lie para facilitar la utilización del teorema de Wei Norman. Para detallar esta contribución, mencionaremos dos conceptos básicos dentro de la teoría de las álgebras de Lie.

Un ideal \mathcal{I} de un álgebra de Lie \mathcal{L} es un subconjunto de \mathcal{L} tal que $[X, Y] \in \mathcal{I}$ para todo $X \in \mathcal{L}$ y todo $Y \in \mathcal{I}$, una condición que se puede escribir brevemente como $[\mathcal{L}, \mathcal{I}] \subseteq \mathcal{I}$. El radical de \mathcal{L} es el ideal soluble de mayor cardinalidad.

Wolf y Korsch (Wolf y Korsch, 1988) utilizaron el teorema de Levi-Malcev que establece que cualquier álgebra de Lie con dimensión finita se puede escribir como una única suma semidirecta de su radical \mathcal{R} y una subálgebra semisimple S , isomórfica al álgebra factor \mathcal{L}/\mathcal{R} . Además utilizaron el teorema de descomposición única de la álgebras semisimples en sumas semidirecta de ideales simples, es decir que

$$S = S_1 \oplus S_2 \oplus \dots \oplus S_k, \quad (2.80)$$

por lo que es posible descomponer un hamiltoniano en una ecuación de la forma (2.69)

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_{\mathcal{R}}, \hat{H}_s \in S, \hat{H}_{\mathcal{R}} \in \mathcal{R}, \quad (2.81)$$

y por tanto

$$\hat{U} = \hat{U}_s \hat{U}_{\mathcal{R}}, \quad (2.82)$$

mientras que $\hat{H}_s = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 \dots + \hat{H}_k$. Reduciendo el problema en la ecuación (2.69) a la solución de problemas subordinados más pequeños. Ya que \hat{U} esta dado en una forma factorizada uno puede después de realizar el procedimiento de Wolf y Korsch optar por solucionar cada una de sus partes, ya sea por el método de Magnus (Magnus, 1954) o por el de Wei-Norman (Wei y Norman, 1962) anteriormente discutido.

Los primeros en utilizar estos resultados en la dinámica electrónica en sistemas periódicos, que son los de interés en este trabajo, fueron Korsch y Mossmann (Korsch y Mossmann, 2003). Ellos utilizaron el álgebra de Lie \mathfrak{l} formada por el operador de

número \hat{N} y los operadores \hat{K} y \hat{K}^\dagger , análogos espaciales de los operadores de descenso y ascenso del oscilador armónico, definidos respectivamente por,

$$\hat{N} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n, \quad (2.83)$$

$$\hat{K} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1}, \quad (2.84)$$

$$\hat{K}^\dagger = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n, \quad (2.85)$$

con la operación usual conmutador $[\hat{X}, \hat{Y}] = \hat{X}\hat{Y} - \hat{Y}\hat{X}$, que genera las siguientes relaciones de estructura

$$[\hat{K}, \hat{N}] = \hat{K}, \quad [\hat{K}^\dagger, \hat{N}] = -\hat{K}^\dagger, \quad [\hat{K}^\dagger, \hat{K}] = 0. \quad (2.86)$$

Es fácil ver que

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle, \quad \hat{K}|n\rangle = |n-1\rangle, \quad \hat{K}^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle, \quad (2.87)$$

de aquí la analogía con los operadores de escalera del oscilador armónico.

De acuerdo con las definiciones anteriores, el álgebra $\mathfrak{I} = \{\hat{K}, \hat{K}^\dagger, \hat{N}\}$ tiene radical $\mathfrak{R} = \{\hat{K}, \hat{K}^\dagger\}$, y es soluble pues $[\hat{K}^\dagger, \hat{K}] = 0$; la parte simple es $S = \{\hat{N}\}$, y \mathfrak{I} se puede escribir como la suma semidirecta $\mathfrak{I} = \mathfrak{R} \oplus S$.

Korsch y Mossmann utilizaron la descomposición en suma semidirecta y el teorema de Wei-Norman para encontrar el operador de evolución temporal, y con este el propagador para el problema con campo eléctrico con dependencia arbitraria en el tiempo. Obtuvieron resultados de acuerdo con los derivados por Dunlap y Kenkre (Dunlap y Kenkre, 1998).

La visión de álgebra de operadores no sólo es un método alternativo para la solución del problema de la dinámica electrónica bajo campos eléctricos, es una generalización pues permite encontrar resultados analíticos para el caso bidimensional (Mossmann et al., 2005), caso en el cual anteriormente sólo se habían obtenido resultados numéricos (Witthaut, 2004).

Hasta 2002 los trabajos, tanto en oscilaciones de Bloch como en localización dinámica en sistemas periódicos, habían despreciado la interacción electrón-electrón en

estos sistemas. En 2003 Ken-Ichi Noba estudió la dinámica coherente de dos electrones con espín antiparalelo bajo un campo eléctrico alternante, mostrando a través de cálculos numéricos la presencia de la localización dinámica para los dos electrones.

Existen otros aspectos físicos importantes que pueden afectar la dinámica y que no se han tomado en cuenta, entre los que se encuentran el grado de libertad de espín, el cual es de interés en presencia de interacción espín-órbita, ya que en ciertos materiales esta interacción acopla el movimiento del electrón con su espín de manera considerable. En particular es de interés para nosotros el efecto que el acoplamiento espín-órbita tiene sobre los fenómenos de oscilaciones de Bloch y localización dinámica y en la dinámica electrónica en general.

3. Interacción espín-órbita tipo Dresselhaus

3.1 El espín del electrón

Después del establecimiento de la mecánica cuántica se realizó una intensa labor para entender la estructura de los espectros atómicos. En particular, fue posible avanzar en la descripción del efecto Zeeman; sin embargo, no fue posible entender este fenómeno sino hasta el momento en que se incorporó a la teoría de Schrödinger la teoría de Pauli del espín del electrón. Como recuerdo de la situación confusa que privó durante esos años, aún queda en la actualidad el nombre de efecto Zeeman anómalo, dado a una cierta forma de este fenómeno, precisamente a la parte de él que no pudo ser “justificada” en términos de los modelos clásicos, para distinguirla de la llamada “normal” y que corresponde al efecto Zeeman que se debe exclusivamente al momento angular orbital.

El análisis detallado del efecto Zeeman anómalo condujo a Landé a proponer en 1921 que la fórmula para la relación entre el momento magnético asociado a una carga que circula (por ejemplo, un electrón orbital) y el correspondiente momento angular, es decir, la relación giromagnética, debe ser modificada. En concreto, propuso que en vez de la fórmula clásica,

$$\frac{\mu_z}{L_z} = \frac{e}{2mc} = -\frac{e_0}{2mc}, \quad (3.1)$$

($e_0 = |e|$) se escribiera,

$$\frac{\mu_z}{L_z} = -g \frac{e_0}{2mc}, \quad (3.2)$$

en donde μ_z es el momento magnético, L_z es el momento angular que lo genera, m es la masa, c la velocidad de la luz y g es un factor numérico llamado *factor de Landé*, cuyo valor como función de los números cuánticos característicos del sistema atómico pudo establecer Landé sobre bases empíricas, pero sin justificación teórica apropiada. Además la fórmula para g tenía la peculiaridad sorprendente de requerir el empleo de números cuánticos semienteros.

La fórmula (3.2) había sido estudiada experimentalmente para el caso de los electrones, con anticipación a los trabajos de Landé. En efecto, en 1915 Einstein realizó en Holanda una serie de trabajos experimentales en colaboración con de Haas para verificar su observación de que la ley de Ampère, aplicada a la moléculas de un cuerpo

rígido macroscópico magnetizado, implica que la relación giromagnética del mismo está dada por la ecuación (3.1). En una nota preliminar, Einstein hacía notar lo imprevisible de este resultado, ya que la relación giromagnética del cuerpo macroscópico depende sólo del cociente e/m para el electrón (cuyo valor experimental había sido establecido por Robert Millikan en 1909), y no de cantidades como la velocidad orbital de los electrones o las dimensiones de su órbita. Para corroborar la teoría, Einstein y de Haas suspendieron un cilindro magnetizable de un hilo de cuarzo y le indujeron una corriente alterna mediante una bobina, como su muestra en la figura 3.1, procurando que la frecuencia de las corrientes inducidas coincidiera con la frecuencia de oscilación torsional para producir resonancia. Con este dispositivo Einstein y de Haas pudieron comprobar que la variación de la magnetización genera una variación similar en el momento angular, de tal manera que μ_z/L_z permanece constante y negativa. Interesados más en el orden de magnitud que en los detalles del fenómeno en sí —que lleva el nombre de *efecto Einstein-de Haas*—, su determinación del coeficiente de proporcionalidad entre el cambio del momento angular del cilindro y el cambio de magnetización que produce no fue muy precisa, aunque el valor que ellos notificaron es equivalente a $g = 1$. Mediciones ulteriores muy cuidadosas realizadas por diferentes autores (Barnett, 1917; Stewart, 1918) mostraron que, la razón giromagnética para los electrones de un cuerpo ferromagnético era ya conocido previamente a la proposición de Landé y podía considerarse como una prueba independiente de la necesidad de adoptar la ecuación (3.2) en vez de la (3.1) en el caso general atómico, con $g = 2$ en el caso específico de los electrones.

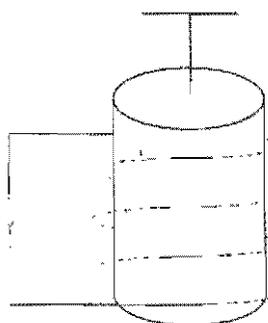


Figura 3.1. Esquema del experimento Einstein-de Haas para la determinación del factor g de Landé de los electrones.

Por la misma época (1921), Otto Stern propuso la realización de un experimento para comprobar las reglas de cuantización espacial del momento angular en un campo magnético, descubiertas poco antes. La componente del momento orbital en la dirección del campo magnético puede poseer sólo el valor $\hbar m$, en donde m es un número entero. Expresado esto en términos del correspondiente momento magnético μ , su proyección μ_z puede tener sólo los eigenvalores:

$$\mu_z = -\mu_0 m, \quad (3.3)$$

en donde $\mu_0 = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ es el magnetón de Bohr. Este sorprendente resultado, establecido por Sommerfeld en 1916 dentro de la teoría de Bohr, recibió el nombre de cuantización espacial y es el que Stern propuso verificar. El mismo Stern, con la colaboración de W. Gerlach, efectuó una serie de experimentos con este propósito en Frankfurt y Hamburgo, en los cuales hacía pasar un haz de átomos monovalentes (de plata) por un campo magnético fuertemente inhomogéneo. Según se sigue de la electrodinámica clásica, cuando un momento magnético $\vec{\mu}$ (un dipolo) está en presencia de un campo magnético \mathbf{B} , sufre una fuerza de valor

$$\mathbf{F} = \nabla(\vec{\mu} \cdot \mathbf{B}). \quad (3.4)$$

Si para simplificar el análisis, consideramos campos orientados predominantemente a lo largo del eje Oz con $B_y = 0$ (y es la dirección del haz), la rápida precesión del momento magnético alrededor del eje Oz hace que la componente μ_x promedio cero, por lo que podemos aproximar la fuerza en la dirección Oz que actúa sobre el momento magnético como

$$F_z = \mu_x \frac{\partial B_x}{\partial z} + \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\mu_0 \frac{\partial B_z}{\partial z} m = -F_0 m \quad (3.5)$$

con $F_0 = \mu_0 \partial B_z / \partial z$. Vemos que la fuerza que actúa sobre el dipolo depende del número cuántico m , por lo que el haz de partículas deberá descomponerse en tantas ramas como valores diferentes pueda tener este número. En particular, el experimento se realizó inicialmente con átomos del grupo I de la tabla periódica (H, Li, Na, Ag, Au, etc.) en el estado s para los cuales $l = 0$ y $m = 0$ y, por lo tanto, el haz no debería descomponerse. Sin embargo, el experimento mostró *dos* haces, indicando que los átomos poseían un momento magnético diferente de cero aún en el estado s . Si el momento angular asociado al momento magnético es $\hbar s$, entonces deberá tener que $2s + 1 = 2$, es decir,

$s = 1/2$. Aunque este resultado estaba de acuerdo con la teoría empírica de Landé, el origen de este momento angular $\hbar/2$ quedaba sin explicar. Más aún tan pronto fue conocido este resultado, Einstein y Ehrenfest (1922) señalaron la existencia de graves dificultades para concebir algún mecanismo satisfactorio y aceptable desde el punto de vista conceptual. En otras palabras, concluyeron que no era aceptable asignar el momento angular $\hbar/2$ al movimiento angular electrónico.

Paralelamente a esta serie de trabajos, diversos investigadores se ocupaban de problemas conexos, como el de la estructura y el origen de la tabla periódica de los elementos. En cada uno de esos trabajos, generalizando los puntos de vista de Bohr y desarrollando una sugerencia de E.C. Stoner respecto del posible número de estados estacionarios de un átomo en un campo magnético externo, Wolfgang Pauli concluyó en 1925 que es posible entender en forma natural la estructura de la tabla periódica de los elementos si cada estado electrónico orbital es caracterizado por cuatro números cuánticos, en vez de tres, y se supone simultáneamente que cada estado puede estar ocupado sólo por un electrón, observación que es conocida como *Principio de Exclusión de Pauli*. Nos interesa recalcar la necesidad de un nuevo número cuántico (además de n , l y m) para caracterizar el estado atómico de un electrón, el cual, de acuerdo a los trabajos del propio Pauli, puede tomar sólo dos posibles valores. De hecho, el principio de exclusión venía a resolver no sólo el problema del número de electrones que pueden acomodarse en cada capa con momento angular definido, sino que daba respuesta cualitativa a un problema mucho más general, básico y viejo, a saber: ¿Qué es lo que impide que no caigan todos los electrones de un átomo pesado (que pueden contener decenas de ellos) al estado de menor energía, lo que parecería ser una solución menos energética y más estable?

En 1925, los jóvenes físicos holandeses G.E. Uhlenbeck y S. Goudsmit propusieron una reinterpretación novedosa de los resultados anteriores, que resolvía de manera muy simple varias dificultades, en vez de interpretar el nuevo número cuántico dicotómico como una característica del estado del átomo, propusieron interpretarlo como un momento angular intrínseco del electrón, de valor $1/2$ en unidades de \hbar . Este es el espín del electrón, cuya descripción formal cuántica fuera formulada poco tiempo después (1927) por el propio Pauli. El valor $1/2$ (en unidades de \hbar) para el espín del electrón queda unívocamente fijado por la condición de que su proyección, identificada con el nuevo número cuántico, puede tomar sólo dos valores, que son, según las reglas

de la mecánica cuántica, los valores $+\hbar/2$ y $-\hbar/2$ para la proyección en alguna dirección de dicho espín. (de la Peña, 2006):

Considerando que el espín vale $\hbar/2$ podemos aplicarle la teoría de momento angular y expresar el operador de espín en términos de las matrices de Pauli

$$\hat{S} = \frac{1}{2} \hbar \bar{\sigma}, \quad \bar{\sigma} = (\sigma_i), \quad (3.6)$$

donde las $\hat{\sigma}_i$ son las matrices de Pauli definidas por

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.7)$$

El momento magnético en la dirección Oz es $\mu_z = -g(e_0/2mc)\hat{S}_z$, lo que se puede ver de la ecuación (3.1). En forma vectorial podemos escribir entonces, con $g = 2$ y el magnetón de Bohr dado por $\mu_b = e_0\hbar/2mc$

$$\boldsymbol{\mu} = -2 \frac{e_0}{2mc} \hat{S} = -\frac{e_0}{2mc} \hbar \bar{\sigma} = -\mu_b \bar{\sigma}. \quad (3.8)$$

Si, ε_{ijk} es el tensor de Levi-Civita, las matrices de Pauli cumplen las reglas de conmutación dadas por

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k. \quad (3.9)$$

Además de estas relaciones de conmutación, propias de todo operador de momento angular, las matrices de Pauli satisfacen otras que le son específicas y resultan del hecho de que se trata de matrices 2×2 . En concreto es posible demostrar que

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{ij} + \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (3.10)$$

esta fórmula muestra, en particular, que el cuadrado de cada una de las tres matrices de Pauli es la matriz identidad de 2×2 .

Puesto que el espín queda representado por el operador matricial de 2×2 , $\hat{S} = \hbar \bar{\sigma}/2$, la función de onda del electrón posee dos componentes, es decir, el estado general de un electrón consiste en una superposición de estados con espín hacia arriba $|\uparrow\rangle$ y hacia abajo $|\downarrow\rangle$, explícitamente:

$$|\psi\rangle = \psi_\uparrow |\uparrow\rangle + \psi_\downarrow |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \psi_\uparrow + \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \psi_\downarrow = \begin{pmatrix} \psi_\uparrow \\ \psi_\downarrow \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

a esta cantidad se le llama espinor. Si tomamos otro espinor $|\varphi\rangle$ con componentes φ_\uparrow y φ_\downarrow , podemos construir el producto escalar

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \begin{pmatrix} \varphi_{\uparrow}^* & \varphi_{\downarrow}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} = \varphi_{\uparrow}^* \psi_{\uparrow} + \varphi_{\downarrow}^* \psi_{\downarrow}, \quad (3.12)$$

en particular, tomando $\psi = \varphi$ obtenemos la densidad de partículas

$$\langle \psi | \psi \rangle = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2 = \rho_{\uparrow} + \rho_{\downarrow}. \quad (3.13)$$

Los espinores son objetos matemáticos que deben distinguirse de por ejemplo los vectores en un plano. En particular, las propiedades de transformación de los operadores frente a rotaciones del sistema coordenado son peculiares. El operador de rotaciones por el ángulo θ alrededor de un eje \hat{n} que pasa por el origen para espín 1/2 es

$$\hat{R}_{\hat{n}}(\theta) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{n}\cdot\hat{S}\right) = \exp\left(-\frac{1}{2}i\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}\right), \quad (3.14)$$

que se puede reescribir, utilizando que $(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})^{2k} = \mathbf{I}$ y que $(\hat{n}\cdot\vec{\sigma})^{2k+1} = \hat{n}\cdot\vec{\sigma}$, como

$$\hat{R}_{\hat{n}}(\theta) = \mathbf{I} \cos\frac{\theta}{2} - i(\hat{n}\cdot\vec{\sigma}) \sin\frac{\theta}{2}, \quad (3.15)$$

en particular para rotaciones infinitesimales por el ángulo $\delta\theta$ resulta

$$\hat{R}_{\hat{n}}(\theta) = \mathbf{I} - \frac{1}{2}i\delta\theta\hat{n}\cdot\vec{\sigma}. \quad (3.16)$$

Para construir la ecuación de evolución temporal para Ψ , que sustituye (o mejor, que generaliza) a la ecuación de Schrödinger para el caso del electrón con espín, el procedimiento que suele emplearse es el introducido por Pauli. Este consiste en tomar en cuenta que al colocar el electrón en un campo magnético externo $\hat{\mathbf{B}}$, dicha partícula y el momento magnético asociado al espín se acoplan, y así aparece la energía mutua

$$\hat{V}_{\mu} = -\boldsymbol{\mu}\cdot\hat{\mathbf{B}} = -\mu_0\hat{\mathbf{B}}\cdot\vec{\sigma}, \quad (3.17)$$

como se sigue de (3.8). Este término de interacción se agrega al hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger que se escribe ahora como una ecuación matricial para el espinor Ψ . La ecuación resultante se llama ecuación de Pauli y se escribe

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m}\left(\hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c}\hat{\mathbf{A}}\right)^2\Psi + \left(\hat{V}_{ext} - \frac{\hbar e}{2mc}\hat{\mathbf{B}}\cdot\vec{\sigma}\right)\Psi. \quad (3.18)$$

Por supuesto, se trata de una manera posible de ampliar el espacio de Hilbert para incluir en él las funciones espinoriales. La ecuación de Pauli es un postulado, que introduce *ad hoc* el espín y el valor correcto del momento magnético intrínseco del electrón, con razón giromagnética $g=2$. Sin embargo, la ecuación (3.18) se puede

derivar de la teoría fundamental del electrón relativista de Dirac que incorpora el espín de manera natural.

Si se modifica apropiadamente la ecuación de Schrödinger para hacerla consistente con la relatividad especial, se obtiene la ecuación del Klein-Gordon. Por otro lado, si a la ecuación de Schrödinger se le agrega el espín del electrón, se obtiene la ecuación de Pauli, como se vio anteriormente. Al incorporar simultáneamente la relatividad especial y el espín en forma cerrada se obtiene la ecuación de Dirac. Esta ecuación refiere solamente a partículas de espín 1/2; la descripción relativista de partículas de espín 1 se hace mediante la ecuación de Proca, la de partículas de espín 3/2 mediante la de Rarita-Schwinger, etc. De todas estas la más importante es sin duda la de Dirac, pues a partir de ella pueden obtenerse las que corresponden a valores más altos del espín, además de que describe el comportamiento de las partículas más fundamentales, como son el electrón y los nucleones. (de la Peña, 2006)

3.2 La interacción espín-órbita. El término k^3 de Dresselhaus

El espín del electrón puede influir significativamente en las propiedades electrónicas y dinámicas de estructuras cuánticas a través de diversos mecanismos. Una de las interacciones fundamentales del electrón en el estado sólido es la que relaciona los grados de libertad espacial y de espín de la partícula, el acoplamiento conocido como interacción espín-órbita (Zutić, *et al.*, 2004).

El origen físico de la interacción espín-órbita puede explicarse considerando un electrón moviéndose con velocidad $\hat{v} = \hat{p}/m$ ante la presencia de un campo eléctrico \mathbf{E} creado por cualquier otra carga. La teoría de relatividad especial indica que en el marco de referencia del electrón existe un campo magnético efectivo dado por

$$\hat{\mathbf{B}}_{ef} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}, \quad (3.19)$$

quedándonos a primer orden en v/c , y donde c es la velocidad de la luz en el vacío. Dado que el electrón tiene momento magnético intrínseco $\boldsymbol{\mu} = (e\hbar/2mc)\boldsymbol{\sigma}$, donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de matrices de espín de Pauli, interactúa con el campo efectivo \mathbf{B}_{ef} . La correspondiente energía de interacción esta dada por

$$\hat{\mathbf{H}}_{SO} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B}_{ef}. \quad (3.20)$$

Para el caso del potencial de Coulomb, el campo electrostático puede ser escrito como $\mathbf{E} = -(1/e)\nabla V(r)$, donde $eV(r)$ es la energía electrostática; entonces la interacción espín-órbita queda dada como

$$\hat{H}_{so} = \frac{\hbar}{2m^2c^2} [\nabla V(r) \times \hat{\mathbf{P}}] \cdot \bar{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (3.21)$$

la cual acopla el momento angular y el espín. Este tipo de acoplamiento es relevante en materiales semiconductores, porque presentan valores pequeños de la masa efectiva.

Esta deducción de la fórmula para el hamiltoniano espín-órbita, aunque intuitiva y físicamente posible arroja un factor de 1/2 del valor real del coeficiente de la interacción. El origen de la imprecisión estriba en el hecho de que existen efectos relativistas, asociados a que el electrón no se mueve en línea recta (en un átomo por ejemplo) sino en una trayectoria curvilínea, no considerados en el análisis. Este efecto es conocido como Precesión de Thomas.

La interacción espín-órbita se obtiene formalmente a partir de la ecuación de Dirac, la cual como mencionamos anteriormente es relativista y describe a partículas de espín 1/2, entre las cuales se encuentran el electrón y su antipartícula, el positrón. La ecuación de Dirac se resuelve mediante una función de onda de cuatro componentes, un biespinor, y está dada por

$$E\Psi = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{P}} + \beta mc^2 + V(r)]\Psi, \quad (3.22)$$

donde $\hat{\mathbf{P}}$ es el momento lineal dado por $\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar\nabla$, $V(r)$ es el potencial efectivo que actúa sobre la partícula, $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ y $\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix}$ son las matrices de Dirac, \mathbf{I} es la matriz identidad de 2×2 y $\bar{\boldsymbol{\sigma}} = (\boldsymbol{\sigma}_x, \boldsymbol{\sigma}_y, \boldsymbol{\sigma}_z)$ es el vector de matrices de espín de Pauli.

En el límite no relativista las partes correspondientes al electrón y al positrón se pueden separar por medio de la transformación de Foldy-Wouthuysen, con lo cual se obtiene una función de onda de dos componentes que describe únicamente el comportamiento del electrón. El hecho de que la función de onda del electrón tenga dos componentes es consistente con el grado de libertad correspondiente al espín, el cual es $\hbar/2$ y puede apuntar hacia arriba o hacia abajo. El hamiltoniano de Dirac reducido, obtenido a partir de un desarrollo de la ecuación de Dirac en términos de $1/mc^2$, está dado por

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V - \frac{\hat{P}^4}{8m^3c^2} - \frac{i\sigma \cdot \hat{P} \times [\hat{P}, V]}{4m^2c^2} - \frac{\mathbf{P} \cdot [\hat{P}, V]}{4m^2c^2}. \quad (3.23)$$

Los dos primeros términos de la ecuación anterior corresponden al hamiltoniano de Schrödinger. El término de $O(\hat{P}^4)$ es una corrección relativista a la energía cinética, el cual refleja el incremento relativista de la masa del electrón, y es conocido como *término de masa-velocidad*. El cuarto término de la ecuación (3.23), en el cual nos enfocaremos, describe la interacción espín-órbita. Éste puede ser entendido cualitativamente como la energía de alineamiento del momento magnético intrínseco del electrón con el campo magnético causado por su propio movimiento orbital. El término originado por la interacción espín-órbita en el hamiltoniano anterior se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\hat{H}_{so} = \left(\frac{\hbar}{4m^2c^2} \right) [\nabla V(r) \times \hat{P}] \cdot \vec{\sigma}. \quad (3.24)$$

Y por último, el quinto término es conocido como *hamiltoniano de Darwin*. Este término refleja el hecho de que en teoría cuántica relativista ninguna partícula puede ser localizada a dimensiones menores que la longitud de Compton ($\lambda_c = \hbar/mc$) (Taylor y Heinonen, 2002).

La interacción espín-órbita puede jugar un rol observable en la estructura de bandas de muchos semiconductores. Cuando el potencial al que las cargas se encuentran sujetas no posee simetría de inversión espacial, la interacción espín-órbita remueve la degeneración del espín sin la presencia de un campo magnético externo (Voskoboynikov *et al*, 2001).

Existen dos contribuciones a la interacción espín-órbita en sólidos cristalinos. Una es originada por la asimetría de inversión del bulto, conocida como Dresselhaus; otra se debe a la asimetría del potencial de confinamiento, interacción de Rashba (Glazov *et al*, 2005; Moroz *et al*, 1999).

La interacción espín-órbita Rashba, puede ser entendida como un campo efectivo cuya dirección y magnitud dependen del momento del electrón en el plano bidimensional. Así, la presencia de este campo causa un desfase en espín del electrón, el espín precesa alrededor del campo efectivo mientras se propaga (Pareek y Bruno, 2002). Este efecto es conocido como efecto Rashba.

La interacción espín-órbita debida a la asimetría de inversión en el bulto fue estudiada por G. Dresselhaus (Dresselhaus, 1955) para electrones. En aproximación de masa efectiva el término Dresselhaus se escribe de la siguiente manera

$$\hat{H}_D = \gamma[\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (3.25)$$

donde σ_α son las matrices de Pauli, γ es constante y depende del material semiconductor (Figura 3.2), y los ejes coordenados x , y , y z son asumidos paralelos a los ejes cristalográficos cúbicos, $[100]$, $[010]$ y $[001]$, respectivamente.

Material Semiconductor	GaSb	InAs	GaAs	InP	InSb
Constante γ de Dresselhaus (eV·Å ⁻¹)	187	130	24	8	220
Masa efectiva relativa m/m_0	0.041	0.023	0.067	0.081	0.013

Figura 3.2 Tabla de valores para la constante de Dresselhaus en diferentes materiales semiconductores (Perel *et al.*, 2003).

Recientemente ambas interacciones espín-órbita han sido objeto de un gran número de estudios. El efecto Rashba es la base teórica del transistor de efecto de campo de espín propuesto por Datta y Das (Datta y Das, 1990). Este transistor es quizá el dispositivo más importante de todos los que se han propuesto en la Espintrónica. En este dispositivo una corriente de espín polarizada es inyectada a partir de un material ferromagnético hacia un gas de electrones bidimensional, que se forma de un confinamiento en uno de los grados de libertad por medio de un potencial; después es colectado por un segundo material ferromagnético. El acoplamiento Rashba inducirá que los espines que se mueven paralelos a la interfaz precesen, rotándolos con respecto a la magnetización del segundo ferromagneto –colector– (Mireles *et al.*, 2001). Dicha modulación puede ser controlada mediante voltaje externo. De aquí la importancia de este acoplamiento y el amplio número de estudios relacionados con esta propiedad.

Otro aspecto importante que se ha estudiado con la interacción espín-órbita tipo Rashba es el transporte electrónico espín polarizado, así como la posibilidad de métodos de inyección de espín polarizado en semiconductores.

Experimentalmente, una manera natural de lograr orientación de espín polarizado es la inyección de portadores espín polarizados de materiales magnéticos. Aunque se ha realizado un progreso considerable, la inyección de espín en sistemas de bajas dimensiones sigue siendo un reto, cuyo obstáculo fundamental para la inyección

eléctrica de un ferromagneto a un semiconductor es la diferencia en la conductividad en entre estos materiales (Schmidt, 2000). Sin embargo, Rashba mostró que este problema puede resolverse utilizando contacto de tuneleo en la interfase (Rashba, 2000). En un artículo posterior Kirczenow determina criterios para la elección de la combinación de semiconductores y ferromagnetos para un filtro ideal (Kirczenow, 2001).

Por otro lado, Voskoboynikov, Liu y Lee (Voskoboynikov *et al.*, 1998) propusieron que una barrera semiconductor no magnética con asimetría de inversión con interacción espín órbita de Rashba y Dresselhaus, puede servir como un filtro de espín por sí misma. Se demostró que la reflexión dependiente del espín entre dos interfaces similares resulta en una dependencia en la transmisión de tuneleo con la orientación de espín del electrón. Este efecto es causado por un acoplamiento espín-órbita Rashba inducido y puede ser sustancial para tuneleo resonante a través de dobles o triples barreras asimétricas en heteroestructuras. Sin embargo, en el caso de barreras de potencial simétricas, la interfase de acoplamiento espín-órbita genera una dependencia en el tuneleo con la orientación de espín.

En este contexto de transporte de espín y considerando la interacción espín-órbita de Dresselhaus en vez de la Rashba, V.I. Perel' *et al.* mostraron que el proceso de tuneleo es dependiente del espín por sí mismo, y que una considerable polarización de espín puede esperarse en el tuneleo de electrones, incluso a través de una simple barrera simétrica, si sólo la barrera del material tiene una asimetría de inversión, como ocurre en los semiconductores con estructura tipo zinc blenda.

El origen microscópico del efecto es el rompimiento de simetría traslacional que se refleja en los términos k^3 de Dresselhaus (Dresselhaus, 1955); en su estudio, Perel' *et al.* consideraron el movimiento a lo largo del eje z cambiando k_z en el hamiltoniano por el operador $-i\partial/\partial z$, además de suponer energías bajas en los electrones, simplificando el hamiltoniano de la ecuación (3.25) para expresarlo como (Perel' *et al.*, 2003)

$$\hat{H}_D = \gamma(k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) \frac{d^2}{dz^2}, \quad (3.26)$$

llamaremos a esta expresión Ec.(3.26) hamiltoniano Dresselhaus en aproximación de Perel'. En forma matricial se escribe como sigue (Perel' *et al.*, 2003)

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} 0 & \gamma(k_x + ik_y) \frac{d^2}{dz^2} \\ \gamma(k_x - ik_y) \frac{d^2}{dz^2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.27)$$

Pere! *et al.* mostraron que este hamiltoniano se diagonaliza en espín a través de los espinores dados por

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.28)$$

donde φ es el ángulo polar del vector de onda k en el plano xy .

$$\varphi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right). \quad (3.29)$$

Si se define el momento en el plano xy como

$$k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \quad (3.30)$$

el hamiltoniano de la ecuación (3.27) en la base de los eigenestados (3.28) queda de la siguiente manera

$$\hat{H}_D = \begin{pmatrix} -\gamma\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{d^2}{dz^2} & 0 \\ 0 & \gamma\sqrt{k_x^2 + k_y^2} \frac{d^2}{dz^2} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

El sistema estudiado por Pere! *et al.* se muestra en la figura 3.3. El material no posee un centro de inversión, tal que existe interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus (Glazov, 2005).

Ellos encontraron que la interacción espín orbita crea una dependencia de la transmisión con el espín, y se obtuvo la transmisión t para cada componente de espín, a través de diagonalizar el hamiltoniano en espín escribiéndolo en términos de los espinores de Ec. (3.28); t se encuentra al acoplar la función de onda solución de la ecuación de Schrödinger y su derivada en la diferentes regiones.

Explícitamente encontraron que si t_+ (t_-) es la transmisión para la componente de espín $|+\rangle$ ($|-\rangle$),

$$t_{\pm} = t_0 \exp\left(\pm\gamma \frac{m_2 k_{\parallel}}{\hbar^2} a q_0\right), \quad (3.32)$$

donde t_0 es la amplitud de transmisión cuando se desprecia la interacción espín-órbita y está dado por

$$t_0 = -4i \frac{m_2}{m_1} \frac{k_x q_0}{(q_0 - ik_x m_2/m_1)^2} \exp(-q_0 a - ik_x a), \quad (3.33)$$

con m_1 y m_2 las masas efectivas fuera y dentro de la barrera respectivamente; y q_0 es el recíproco de la longitud de decaimiento de la función de onda en la barrera cuando no se toma en cuenta la interacción espín-órbita

$$q_0 = \sqrt{\frac{2m_2V}{\hbar^2} - k_z^2 \frac{m_2}{m_1} - k_y^2 \left(\frac{m_2}{m_1} - 1 \right)}. \quad (3.34)$$

En la ecuación (3.32) (para la transmisión por espín) vemos que cuando no existe interacción espín-órbita de Dresselhaus ($\gamma = 0$) la transmisión es independiente del espín, razón por la cual la probabilidad de transmisión se conserva. Sin embargo, en la presencia de interacción espín-órbita la amplitud de transmisión es mayor para la componente de espín $|+\rangle$, lo que genera que el proceso de tuneo no conserve el espín.

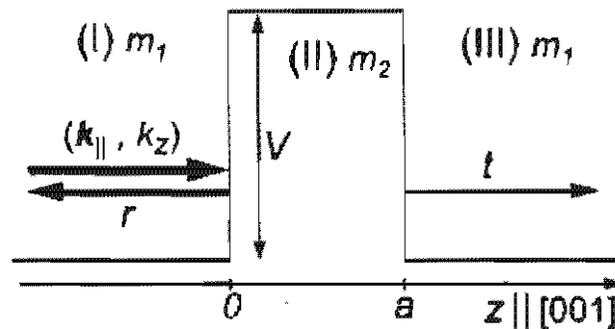


Figura 3.3. Esquema del sistema teórico estudiado por Perel *et al.*, La barrera está formada por un material con masa efectiva diferente (m_2) e interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus. t es la amplitud de transmisión, r la de reflexión, a el tamaño de la barrera, V la altura del potencial, k_y es el momento en el plano xy y k_z la componente del momento en la dirección z (Tomada de Perel' *et al.*, 2003).

Para estudiar la diferencia en la transmisión en componente de espín a través de la barrera con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus, Perel' *et al.* introdujeron la eficiencia de polarización P definida por

$$P = \frac{|r_+|^2 - |r_-|^2}{|r_+|^2 + |r_-|^2}. \quad (3.35)$$

En el caso que ellos estudian toma la forma

$$P = \tanh\left(2\gamma \frac{m_2 k_1}{\hbar} a q_0\right). \quad (3.36)$$

Entonces, dado un vector de onda \bar{k} de los electrones, la eficiencia de polarización P incrementa con la magnitud de la constante de Dresselhaus γ y con la anchura de la barrera $q_0 a$. Sin embargo, hay que recordar que con el aumento de a la transparencia de la barrera $|t_0|^2$ decrece.

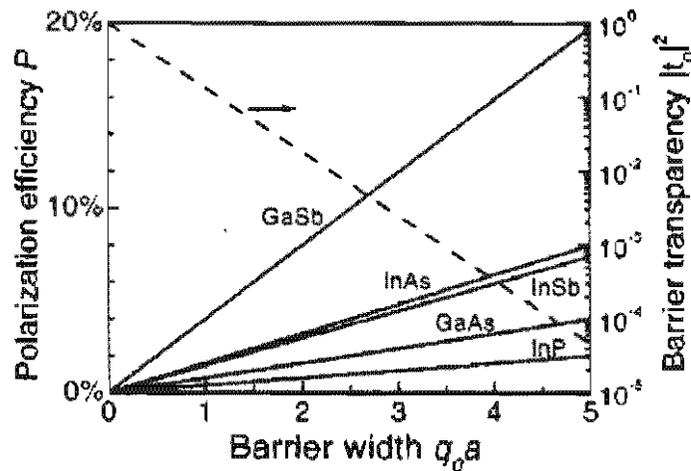


Figura 3.4. Eficiencia de polarización P y la transparencia de la barrera $|t_0|^2$ como función de la anchura de la barrera $q_0 a$ con $k_1 = 2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$ (Tomada de Perel' *et al.*, 2003).

La figura 3.4 muestra la eficiencia de polarización P y la transparencia de la barrera $|t_0|^2$ como función de la anchura de la barrera $q_0 a$. En esta gráfica se muestra que en este tipo de sistemas (barrera simple con interacción espín-órbita) es posible obtener polarizaciones cercanas a 20% para materiales como GaSb.

Siguiendo la misma línea de pensamiento, parte de este grupo de trabajo (Tarasenko *et al.*, 2004) estudiaron y explicaron el origen del efecto galvánico de espín en términos de la interacción con los términos k^3 de Dresselhaus.

Después de estos trabajos pioneros surgió el interés por estudiar sistemas de múltiples barreras, como se había hecho antes en el caso de interacción espín-órbita tipo Rashba (Voskoboynikov *et al.*, 1998).

En 2005 Glazov *et al.* (Glazov *et al.*, 2005) estudiaron el tuneo resonante en una heteroestructura de doble barrera con interacción espín orbita con los términos k^3 de Dresselhaus en la aproximación de Perel'. La figura 3.5 muestra el esquema del sistema estudiado.

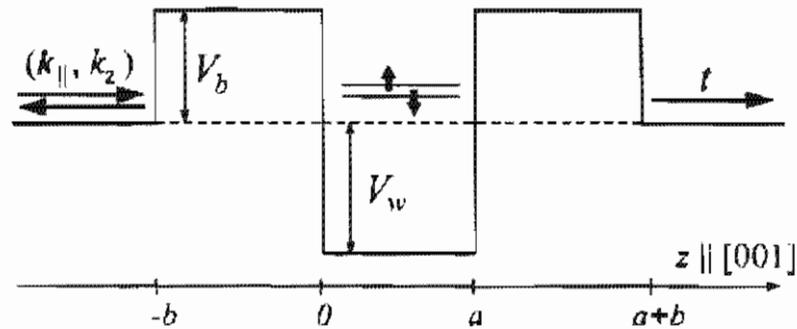


Figura 3.5. Esquema del sistema de doble barrera estudiado por Glazov *et al.*, t es la amplitud de transmisión, V_w la profundidad del potencial, k_{\parallel} es el momento en el plano xy y k_z la componente del momento en la dirección z (Tomada de Glazov *et al.*, 2005).

Glazov *et al.* toman el hamiltoniano del sistema en la figura 3.5 dado por

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_D \quad (3.37)$$

con \hat{H}_D definido de la ecuación (3.26); lo diagonalizan en espín escribiéndolo en términos de los eigenespinores del hamiltoniano Dresselhaus (en aproximación de Perel') mostrados de la ecuación (3.28), quedando de la forma

$$\hat{H}_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_D \quad (3.38)$$

con

$$m_{\pm} = m^* \left(1 \pm 2 \frac{\gamma m^* k_{\parallel}}{\hbar^2} \right)^{-1}. \quad (3.39)$$

Entonces la interacción espín-órbita hace que la masa efectiva en la dirección z sea diferente para las componentes de espín ($|+\rangle, |-\rangle$). Este resultado se traduce en que las energías de resonancia para este sistema sean diferentes para cada componente de espín. La figura 3.6 muestra la amplitud de tuneo (transparencia) como función de la

energía incidente para cada componente de espín. En esta gráfica se observan dos picos, uno para cada componente de espín donde la energía de resonancia para la componente de espín $|-\rangle$ es menor. En el recuadro observamos que la distancia entre ambos picos aumenta conforme se incrementa la magnitud del vector de onda en el plano xy , $k_{||}$.

La diferencia en energía en los picos resonantes genera se refleja en una polarización de espín dependiente de la energía de incidencia. La figura 3.7 muestra la polarización efectiva P_s como función de la energía resonante E_0 , que es donde se encontraría el único pico si no hubiera interacción espín-órbita. En esta gráfica se muestran cuatro curvas, dos para $0^\circ K$ y otras dos para $300^\circ K$; las curvas continuas corresponden a cálculos numéricos, las curvas punteadas a gráficas de las expresiones teóricas encontradas por Glazov *et al.*

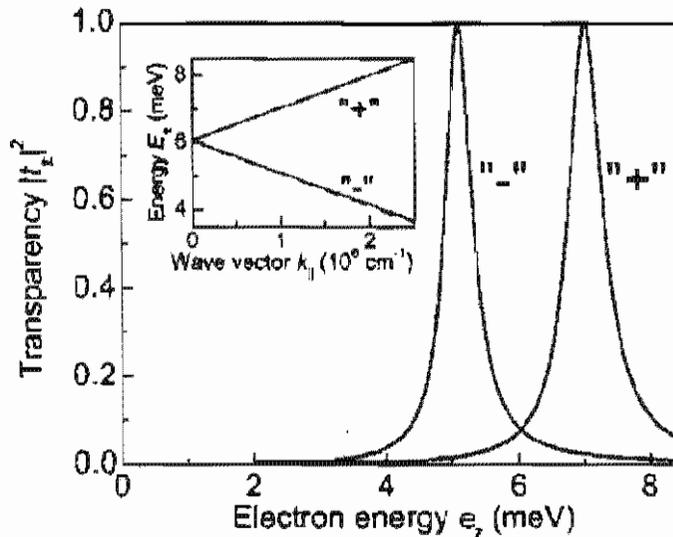


Figura 3.6. Transparencia (amplitud de transmisión al cuadrado) como función de la energía de incidencia del electrón (Tomada de Glazov *et al.*, 2005).

Lo primero que observamos es la correspondencia entre los cálculos numéricos y las expresiones teórica obtenidas por Glazov *et al.*. A $0^\circ K$ el sistema tiene polarizaciones del orden de 10%. Sin embargo para $300^\circ K$ solo es posible obtener como máximo, polarizaciones negativas de cerca de 5% .

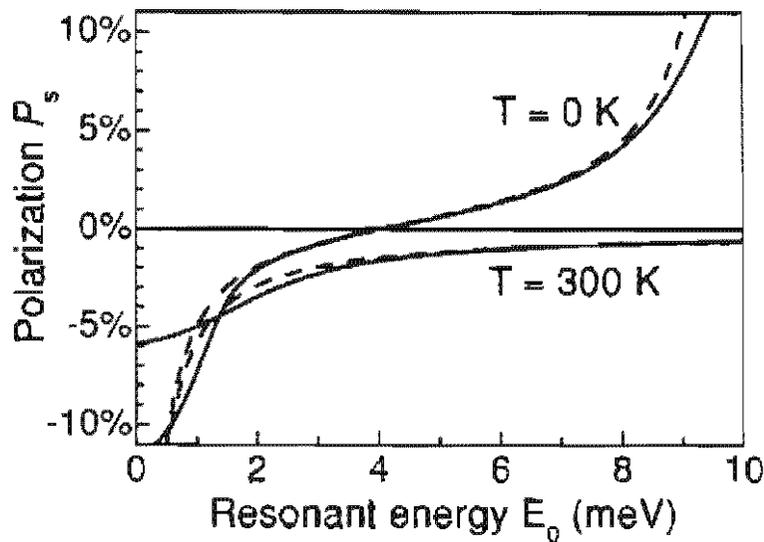


Figura 3.7. Polarización (amplitud de transmisión al cuadrado) como función de la energía de resonancia sin interacción espín-órbita (Tomada de Glazov *et al.*, 2005).

En el mismo año de la publicación de los resultados del grupo de Glazov, Tan *et al.* propusieron un dispositivo tipo transistor de campo basado en la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus (Tan *et al.*, 2005). La figura 3.8 muestra el esquema del dispositivo.

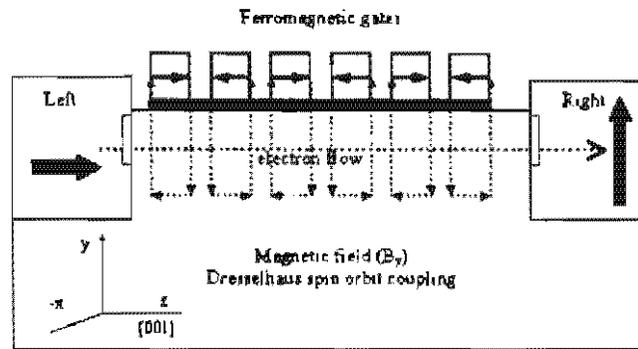


Figura 3.8. Esquema del dispositivo tipo transistor de campo propuesto por Tan *et al.* En este dispositivo los electrones viajan de izquierda a derecha, las cuadros en ambos extremos representan con flechas la polarización de los electrones, quienes inicialmente son inyectados de un ferromagneto, de manera que entran con una polarización dada por la dirección de la flecha de la izquierda; un arreglo de compuertas ferromagnéticas y la interacción spin-órbita tipo Dresselhaus causa una rotación en el espín (Tomada de Tan *et al.*, 2005).

En este dispositivo los electrones viajan de izquierda a derecha siendo inyectados desde un ferromagneto con dirección de campo indicada por la flecha de la izquierda; después entran en una región con interacción espín-órbita Dresselhaus de

GaAs. En esta región existen diferentes barreras de potencial creadas por compuertas ferromagnéticas. De esta manera la diferencia en el vector de onda de los electrones es traducida en una diferencia en la probabilidad de transmisión. Así teóricamente este dispositivo puede generar polarizaciones de hasta 80%.

Estudios posteriores para sistemas de una barrera, los cuales fueron realizados por L.G. Wan *et al*, consideran términos no diagonales en la representación matricial del operador de corriente, con lo que obtuvieron cambios significativos en los valores máximos de la polarización (Wan *et al*, 2005), aumentando los valores obtenidos anteriormente.

Además de los estudios de transporte en sistemas con Dresselhaus, existen trabajos que consideran potenciales de confinamiento sin la aproximación de Perel', en particular una función delta de Dirac negativa (Magarill y Chaplik, 2005). Ellos encontraron localización espacial dependiente del espín, esto es, el estado ligado característico de las funciones delta negativas es polarizado en espín cuando existe interacción espín-órbita con los términos k^2 de Dresselhaus en el material.

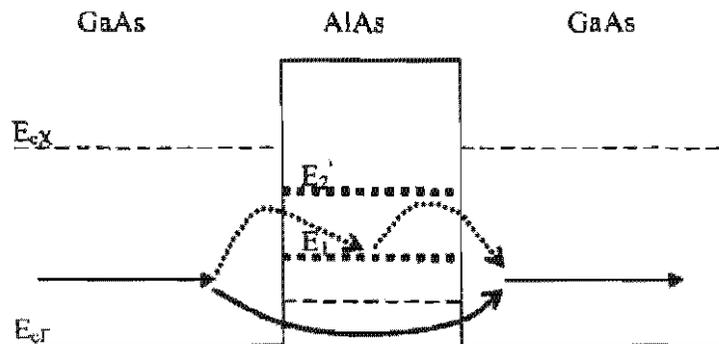


Figura 3.9. Sistema abierto estudiado por Sandu *et al*. Los electrones viajan de izquierda a derecha, la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus en la barrera de AlAs hace que las energías de tunelamiento sean diferentes para cada componente de espín $\{+, -\}$ (Tomada de Sandu *et al.*, 2006).

El hamiltoniano espín-órbita se ha utilizado también para estudiar el tunelamiento en sistemas abiertos. Titus Sandu, Athanasios Chantis y Radu Htimie realizaron cálculos de la transmisión y polarización para un sistema de una barrera con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus. El esquema se muestra en figura 3.9 (Sandu *et al.*, 2006).

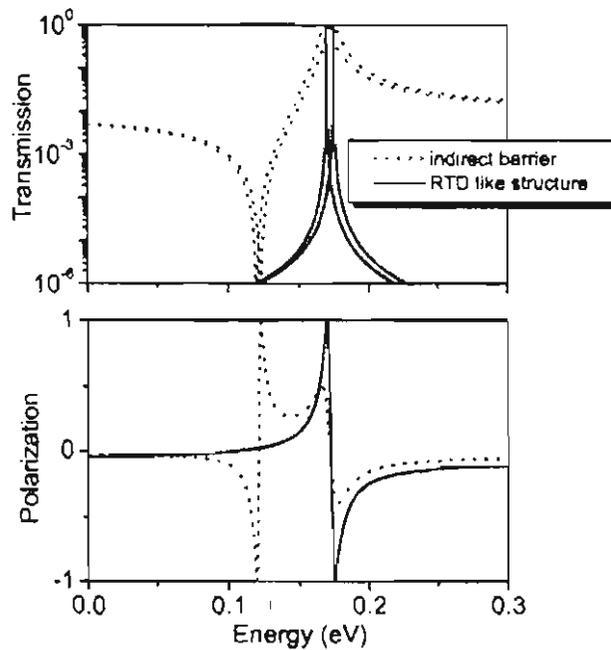


Figura 3.10. Superior. Gráfica de la transmisión como función de la energía comparada con el caso de diodo resonante (RTD). Inferior. Polarización como función de la energía comparada con el caso de diodo resonante (RTD) (Tomada de Sandu *et al.*, 2005).

Sandu *et al.* aplicaron el formalismo de la función de Green al hamiltoniano escrito en aproximación de amarre fuerte, y obtuvieron las probabilidades de transmisión y la polarización para este sistema. Ellos encontraron eficiencias de polarización de más de 20% (Sandu *et al.*, 2006).

La gráfica superior en figura 3.10 muestra la transmisión como función de la energía, la gráfica inferior muestra la polarización como función energía. En ambos caso, comparan con el caso de estructura de diodo resonante (RTD).

Después de la publicación de los artículos de Perel' *et al.* surgieron diversos trabajos centrados en el hamiltoniano Dresselhaus. En un principio al igual que con la interacción espín-órbita tipo Rashba, la mayoría de los trabajos se limitaron a casos independientes del tiempo, es decir, solo calculaban transmisión y la eficiencia de polarización.

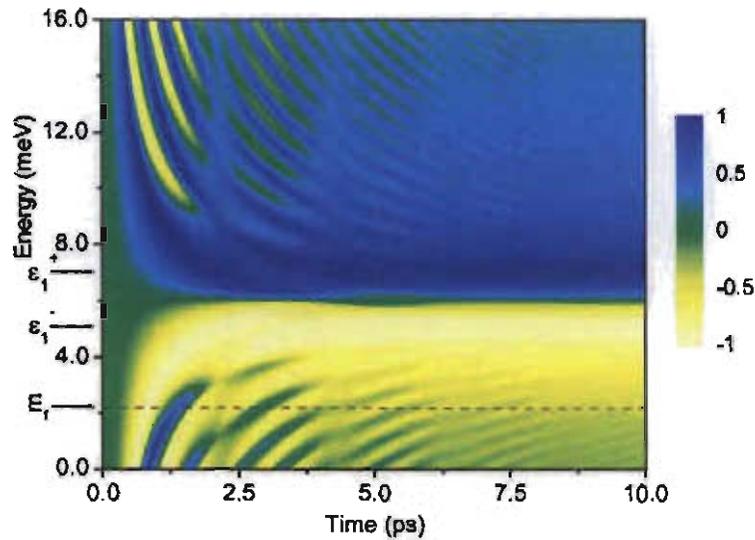


Figura 3.11. Polarización como función de la energía y el tiempo. El color indica la magnitud y signo de la polarización, azul para positiva y amarillas para negativa (RTD) (Tomada de Romo y Ulloa, 2005).

Sin embargo, en 2005 apareció un estudio dinámico con interacción espín-órbita Dresselhaus k^3 . Romo y Ulloa (Romo y Ulloa, 2005) retomaron el sistema de doble barrera y lo estudiaron dinámicamente; resolvieron analíticamente la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y obtuvieron la evolución temporal de la polarización para el caso de hamiltoniano sin dependencia explícita del tiempo: encontraron que la polarización de espín cambia de forma abrupta en el tiempo y así se encontró la potencialidad de este sistema como filtro de espín.

La gráfica en figura 3.11 es un mapa de colores con la polarización como función de la energía y del tiempo para regiones cercanas a las primeras energías de resonancia. En esta figura vemos que para energías muy cercanas a las de resonancias $(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ la polarización se mantiene constante, sin embargo conforme nos alejamos de estas energías, la polarización oscila en el tiempo.

En figura 3.12 la gráfica de la evolución de la polarización en el tiempo para una energía de 2.2 meV (marcada con una línea punteada en figura 3.11) se observa que la polarización no va a cero conforme el tiempo aumenta indefinidamente, sino a un valor finito.

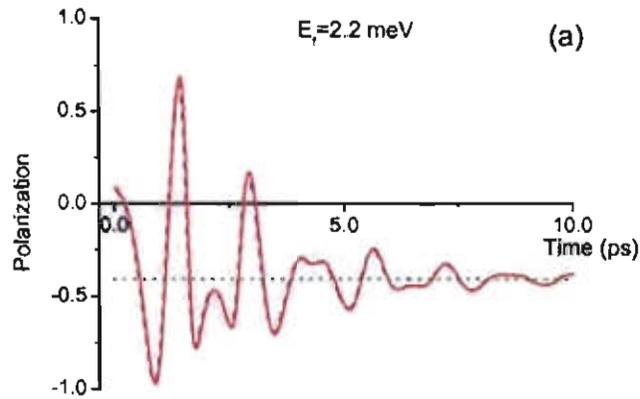


Figura 3.12. Polarización como función del tiempo para una energía de incidencia de 2.2 meV. La línea en rojo corresponde a la solución formal, la azul punteada a una aproximación realizada por Romo y Ulloa. (Tomada de Romo y Ulloa, 2005).

Por otra parte, Zhang, Nie y Liang estudiaron el sistema de un potencial de barrera con una dependencia temporal cosenoidal e interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus. Por medio del teorema de Floquet, análogo temporal del teorema de Bloch, encontraron un desdoblamiento en los picos asimétricos en la conductancia, es decir en las resonancias tipo Fano características de sistemas con barreras oscilantes. Este desdoblamiento da origen a eficiencia de polarización de hasta 80% (Zhang *et al*, 2006). La figura 3.13 muestra el desdoblamiento en los picos de la conductancia y la figura 3.14 muestra la eficiencia de polarización como función de la energía. En esta última se observan valores cercanos a 80% en la polarización.

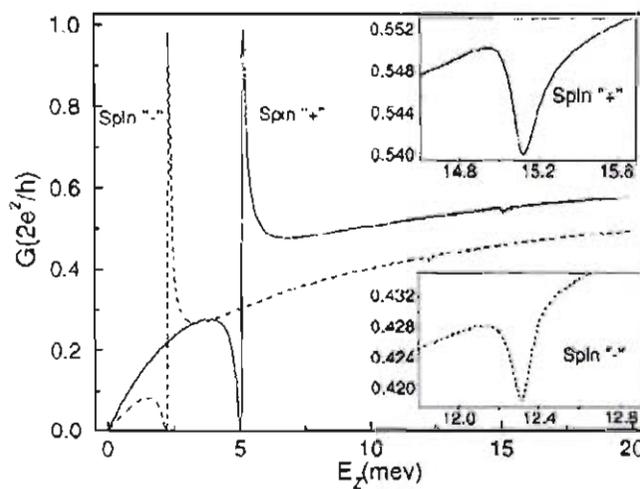


Figura 3.13. Conductancia como función de la energía incidente (Zhang *et al*, 2006).

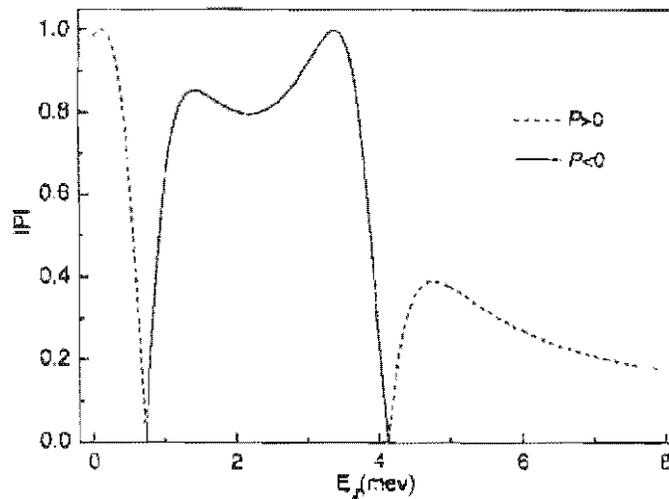


Figura 3.14. Gráfica de la polarización como función de la energía incidente (Tomada de Zhang et al., 2006).

En esta sección hemos discutido los trabajos realizados en el estudio de la interacción espín-órbita Dresselhaus, los principales resultados y los métodos para obtenerlos. De la misma manera, en el capítulo anterior discutimos los trabajos realizados en el estudio de la dinámica de electrones en sistemas periódicos unidimensionales y los fenómenos interesantes que allí se presentan en la presencia de campos eléctricos: las oscilaciones de Bloch y la localización dinámica (Griffoni y Hänggi, 1998).

El estudio de los sistemas con grado de libertad de espín es de importancia tecnológica, en especial en aquellos con acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus. Existen pocos trabajos que estudian la dinámica electrónica en sistemas con interacción espín-órbita.

Debemos subrayar la importancia de investigar el comportamiento dinámico de un electrón en un sistema periódico al incluir esta interacción espín-órbita y determinar si se presentan los fenómenos de oscilaciones de Bloch y localización dinámica. Con la medición indirecta de estos fenómenos, si es que se presentan, y conociendo cómo cambia su comportamiento con la interacción espín-órbita, se podría, por ejemplo, calcular la magnitud de la constante de acoplamiento espín-órbita, o lograr un dispositivo en el cual se mantenga determinado estado de espín electrónico por tiempos largos.

4. Dinámica electrónica con interacción espín-órbita

Este capítulo es la parte medular del presente trabajo. En los dos capítulos anteriores hemos realizado una revisión de diversos estudios sobre dinámica electrónica en amarre fuerte, subrayado sus principales resultados, se han mencionado algunos estudios sobre la interacción espín-órbita, en especial aquellos referentes al término k^3 de Dresselhaus. En el presente capítulo se presenta el estudio de la dinámica electrónica en amarre fuerte con interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus, en un doble pozo y en un arreglo unidimensional de un número infinito de sitios, que consiste en el objetivo y resultado principal de esta tesis.

4.1 El doble pozo cuántico con interacción espín-órbita: La magnetización

El estudio del efecto de la interacción espín-órbita en la dinámica de partículas cuánticas en potenciales periódicos no ha sido reportado en la literatura. En particular, no hay estudios que describan la dinámica en sistema con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus. En esta sección describimos la dinámica electrónica en un doble pozo con interacción espín-órbita; este sistema no ha sido estudiado antes y además de servirnos para mostrar cómo se introduce y representa la interacción espín-órbita en los sistemas periódicos y el efecto consecuente en la dinámica, presenta rasgos dinámicos diferentes de aquellos que se presentan en los sistemas periódicos, por lo que resulta interesante por sí mismo.

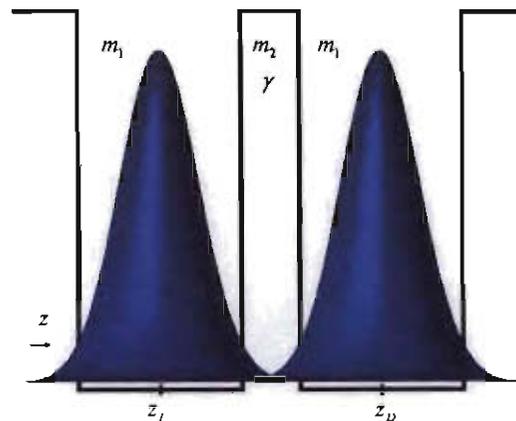


Figura 4.1. Esquema del doble pozo cuántico con interacción espín-órbita. La barrera esta formada de un material con asimetría, tal que existe dentro de ella interacción espín-órbita.

Consideramos dos pozos separados por una barrera similar a la estudiada por Perel' *et al.* (Perel' *et al.*, 2003). De hecho, el sistema de dos pozos, esquematizado en figura 4.1 es equivalente a sumergir en un pozo infinito el sistema estudiado por Perel'.

El material del sistema cuenta con asimetría tal que existe una interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus mostrados en la ecuación (3.25). Estudiamos el movimiento (tuneleo) en la dirección z , utilizando la aproximación de Perel', por lo que reemplazamos k_z con el operador $-i\partial/\partial z$ y sólo consideramos el término con k_x^2 en la ecuación (3.25). Entonces el hamiltoniano Dresselhaus se reduce a la Ec. (3.26).

El hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{H}_D + \hat{V}_I + \hat{V}_D, \quad (4.1)$$

donde \hat{T} es la energía cinética, \hat{H}_D el hamiltoniano Dresselhaus en la aproximación de Perel' de la ecuación (3.26) y \hat{V}_I y \hat{V}_D los potenciales de los pozos de la izquierda y derecha respectivamente.

Como en el caso sin interacción espín-órbita estudiado en la sección 2.1, este sistema se puede resolver de manera exacta (analíticamente). Haciendo, como hizo Perel', acoplar las soluciones de cada lado de la barrera, es posible encontrar la función de onda del sistema; sin embargo, a diferencia del sistema estudiado por Perel' las funciones a la izquierda y derecha de la barrera no son de partícula libre, sino las eigenfunciones de los pozos de potencial. También (como en sección 2.1) utilizaremos las soluciones individuales de cada pozo, considerando sólo el estado base de cada pozo (con su degeneración de espín).

Sean $|I, \sigma\rangle$ y $|D, \sigma\rangle$ los estados base del pozo de la izquierda y de la derecha con espín σ , y $\phi_I^\sigma(z) = \langle z|I, \sigma\rangle$ y $\phi_D^\sigma(z) = \langle z|D, \sigma\rangle$ sus funciones de onda correspondientes que satisfacen las siguientes dos ecuaciones de Schrödinger

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_I\right)\phi_I^\sigma = \varepsilon\phi_I^\sigma, \quad (4.2)$$

$$\left(\hat{T} + \hat{V}_D\right)\phi_D^\sigma = \varepsilon\phi_D^\sigma. \quad (4.3)$$

Estas ecuaciones son invariantes ante cambios en la base de espín, recordemos que la dependencia en el espín está en la barrera entre los pozos.

Notamos que en la ecuación del hamiltoniano total (4.1) sólo el término que representa la interacción espín-órbita Dresselhaus \hat{H}_D depende del espín, por lo tanto, recordando que dicho termino se diagonaliza en espín por los eigenvectores de Ec.

(3.28) y que \hat{H}_D se puede escribir como en la ecuación (3.31), es fácil ver que estos eigenespinores diagonalizan el hamiltoniano total, como se muestra en las ecuaciones (3.27)-(3.31); entonces el hamiltoniano se puede escribir como

$$\hat{H}_\pm = \hat{T}_\pm + \hat{V}_I + \hat{V}_D, \quad (4.4)$$

con

$$\hat{T}_\pm = \hat{T} \left(1 \pm \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2} \right). \quad (4.5)$$

Así el hamiltoniano Dresselhaus acopla la energía cinética con la dirección de espín, haciendo más energético moverse con la dirección de espín $|+\rangle$ que con la $|-\rangle$ (Con $|\pm\rangle$ dado por la Ec. (3.28)). El efecto de la interacción espín-órbita es cambiar la energía cinética, haciéndola dependiente del espín, o equivalentemente haciendo que la masa del electrón sea diferente para cada componente de espín $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

Escribimos la función de onda del sistema ψ como una suma sobre los ϕ_n con los coeficientes a determinar, $\psi = \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma$, $n \in \{I, D\}$, $\sigma \in \{+, -\}$. La ecuación de Schrödinger restringida a los estados base es

$$\hat{H} \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma = E \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma. \quad (4.6)$$

Esta ecuación puede reescribirse como

$$\sum_{n,\sigma} H_{mn}^{\sigma',\sigma} a_n^\sigma = E \sum_{n,\sigma} S_{mn}^{\sigma',\sigma} a_n^\sigma, \quad (4.7)$$

donde

$$H_{mn}^{\sigma',\sigma} = \int (\phi_m^{\sigma'})^* \hat{H} \phi_n^\sigma dz, \text{ y}$$

$$S_{mn}^{\sigma',\sigma} = \int (\phi_m^{\sigma'})^* \phi_n^\sigma dz,$$

con $\sigma, \sigma' \in \{+, -\}$ y los kets $|+\rangle$ y $|-\rangle$ ortogonales, entonces $H_{mn}^{\sigma',\sigma} = H_{mn}^\sigma \delta_{\sigma',\sigma}$ y $S_{mn}^{\sigma',\sigma} = S_{mn}^\sigma \delta_{\sigma',\sigma}$, pues \hat{H} es diagonal en espín en la base $\{|+\rangle, |-\rangle\}$.

El problema de eigenvalores generalizado a resolver es

$$\hat{H} \psi = E \hat{S} \psi. \quad (4.8)$$

Para continuar, necesitamos los elementos de matriz no nulos en el hamiltoniano. Partimos de,

$$H_{II}^{**} = \int (\phi_I^+)^* (\hat{T}_+ + V_I + V_D) \phi_I^+ dz, \quad (4.9)$$

definimos $T_s = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, que es una cantidad adimensional cuyo valor es aproximadamente 0.05 para GaSb, y entonces

$$\begin{aligned} H_{II}^{**} &= \int (\phi_I^+)^* \left[(1+T_s) \hat{T}_+ + V_I + V_D \right] \phi_I^+ dz \\ &= \varepsilon + T_s \int (\phi_I^+)^* \hat{T}_+ \phi_I^+ + \int \phi_I^{**} V_D \phi_I^+ \\ &= \varepsilon + T_s \int \phi_I^{**} \hat{T}_+ \phi_I^+ - c, \end{aligned}$$

donde en el primer término hemos utilizado la ecuación de Schrödinger en (4.2); la integral del segundo término es igual a cero pues no existe interacción espín-órbita en los pozos; y el tercer término es el campo cristalino c , que también aparece en el caso sin interacción espín-órbita, y es la reducción a la energía de la función de onda por ocupar un mayor espacio. Entonces

$$H_{II}^{**} = \varepsilon - c. \quad (4.10)$$

De forma análoga

$$H_{II}^{--} = H_{DD}^{**} = H_{DD}^{--} = \varepsilon - c. \quad (4.11)$$

Los términos fuera de la diagonal son

$$\begin{aligned} H_{DI}^{**} &= \int (\phi_D^+)^* \left[(1+T_s) \hat{T}_+ + V_I + V_D \right] \phi_I^+ dz \\ &= (1+T_s) \int (\phi_D^+)^* \left[\hat{T}_+ + V_I \right] \phi_I^+ dz + \int (\phi_D^+)^* \left[-T_s V_I + V_D \right] \phi_I^+ dz \\ &= (1+T_s) \varepsilon - (1-T_s) T, \end{aligned} \quad (4.12)$$

donde para el primer término hemos completado la ecuación de Schrödinger Ec. (4.2). En el segundo término, T es la integral de transferencia o tuneo que también apareció en el caso sin interacción espín-órbita. Los otros elementos de matriz fuera de la diagonal se obtienen de manera análoga y son

$$H_{ID}^{**} = (1+T_s) \varepsilon - (1-T_s) T, \quad (4.13)$$

$$H_{DI}^{--} = (1-T_s) \varepsilon - (1+T_s) T, \quad (4.14)$$

$$H_{ID}^{--} = (1-T_s) \varepsilon - (1+T_s) T. \quad (4.15)$$

Entonces, separando por espín, el hamiltoniano es

$$\hat{H}^\pm = \begin{pmatrix} \varepsilon - c & (1 \pm T_s) \varepsilon - (1 \mp T_s) T \\ (1 \pm T_s) \varepsilon - (1 \mp T_s) T & \varepsilon - c \end{pmatrix}, \quad (4.16)$$

donde el superíndice en \hat{H} representa la componente de espín. Escribimos el hamiltoniano como

$$\hat{H}^{\pm} = \begin{pmatrix} \varepsilon & T_{\pm} \\ T_{\pm} & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

para notar que en esta base de espín, el hamiltoniano es de forma idéntica al de la sección 2.1, y por tanto tiene la misma solución. Al igual que en ese caso despreciamos el campo cristalino c . Las eigenenergías son

$$E_{<}^{\pm} = \varepsilon - T_{\pm} = (1 \mp T_s) T, \quad (4.18)$$

$$E_{>}^{\pm} = \varepsilon + T_{\pm} = (2 \pm T_s) \varepsilon - (1 \mp T_s) T, \quad (4.19)$$

y los eigenvectores

$$|e_{<}^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I, \pm\rangle + |D, \pm\rangle), \quad (4.20)$$

$$|e_{>}^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I, \pm\rangle - |D, \pm\rangle). \quad (4.21)$$

Si como condición inicial el electrón se encuentra en el pozo de la izquierda con espín \uparrow

$$|\psi(t=0)\rangle = |I, \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|I, +\rangle + |I, -\rangle), \quad (4.22)$$

de forma equivalente la condición inicial por espín es $\frac{1}{\sqrt{2}}|I, \pm\rangle$, que es igual (salvo el factor 1/2) al caso sin interacción espín-órbita de sección 2.1, entonces

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(t)^{+}\rangle + |\psi(t)^{-}\rangle, \quad (4.23)$$

con

$$|\psi(t)^{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\varepsilon t/\hbar} \left(\cos(T_{\pm} t/\hbar) |\phi_I^{\pm}\rangle + i \operatorname{sen}(T_{\pm} t/\hbar) |\phi_D^{\pm}\rangle \right), \quad (4.24)$$

donde $T_{\pm} = (1 \pm T_s) \varepsilon - (1 \mp T_s) T$.

Entonces la función de onda total es

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} \left[e^{-i\epsilon t/\hbar} \cos\left[\left((1+T_s)\epsilon - (1-T_s)T\right)t/\hbar\right] |I,+\rangle \right. \\
& + i e^{-i\epsilon t/\hbar} \sin\left[\left((1+T_s)\epsilon - (1-T_s)T\right)t/\hbar\right] |D,+\rangle \\
& + e^{-i\epsilon t/\hbar} \cos\left[\left((1-T_s)\epsilon - (1+T_s)T\right)t/\hbar\right] |I,-\rangle \\
& \left. + i e^{-i\epsilon t/\hbar} \sin\left[\left((1-T_s)\epsilon - (1+T_s)T\right)t/\hbar\right] |D,-\rangle \right].
\end{aligned} \tag{4.25}$$

La función de onda de Ec. (4.25) está escrita en la base de espín que diagonaliza el hamiltoniano (4.1). Para escribirla en la base de espín referente al eje z, $\{\uparrow, \downarrow\}$, sustituimos los kets por sus equivalentes en esta base de espín

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = & \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-i\epsilon t/\hbar} \left[\cos\left[\left((1+T_s)\epsilon - (1-T_s)T\right)t/\hbar\right] \left(\frac{|I,\uparrow\rangle + e^{-i\varphi} |I,\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \right. \\
& + i \sin\left[\left((1+T_s)\epsilon - (1-T_s)T\right)t/\hbar\right] \left(\frac{|D,\uparrow\rangle + e^{-i\varphi} |D,\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \\
& + \cos\left[\left((1-T_s)\epsilon - (1+T_s)T\right)t/\hbar\right] \left(\frac{|I,\uparrow\rangle - e^{-i\varphi} |I,\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \\
& \left. + i \sin\left[\left((1-T_s)\epsilon - (1+T_s)T\right)t/\hbar\right] \left(\frac{|D,\uparrow\rangle - e^{-i\varphi} |D,\downarrow\rangle}{\sqrt{2}} \right) \right],
\end{aligned} \tag{4.26}$$

donde φ es el ángulo de inclinación del vector de momento en el plano xy . Para simplificar esta expresión podríamos hacer $\epsilon = 0$, que es la energía de sitio, agrupamos términos comunes y obtenemos

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = & \frac{1}{2} \left\{ \left\{ \cos\left[(1-T_s)Tt/\hbar\right] + \cos\left[(1+T_s)Tt/\hbar\right] \right\} |I,\uparrow\rangle \right. \\
& + e^{-i\varphi} \left\{ \cos\left[(1-T_s)Tt/\hbar\right] - \cos\left[(1+T_s)Tt/\hbar\right] \right\} |I,\downarrow\rangle \\
& - i \left\{ \sin\left[(1-T_s)Tt/\hbar\right] + \sin\left[(1+T_s)Tt/\hbar\right] \right\} |D,\uparrow\rangle \\
& \left. - i e^{-i\varphi} \left\{ \sin\left[(1-T_s)Tt/\hbar\right] - \sin\left[(1+T_s)Tt/\hbar\right] \right\} |D,\downarrow\rangle \right\},
\end{aligned} \tag{4.27}$$

que es la solución al problema. Esta expresión puede simplificarse utilizando las fórmulas para ángulos dobles de las funciones trigonométricas. Así

$$\begin{aligned}
|\psi(t)\rangle = & \left[\cos(Tt/\hbar) \cos(T_s T t/\hbar) |I,\uparrow\rangle \right. \\
& + e^{-i\varphi} \sin(Tt/\hbar) \sin(T_s T t/\hbar) |I,\downarrow\rangle \\
& - i \sin(Tt/\hbar) \cos(T_s T t/\hbar) |D,\uparrow\rangle \\
& \left. + i e^{-i\varphi} \cos(Tt/\hbar) \sin(T_s T t/\hbar) |D,\downarrow\rangle \right].
\end{aligned} \tag{4.28}$$

Con esta última expresión podemos obtener las diferentes cantidades que caracterizan a la dinámica del sistema. La primera cantidad que estudiamos es la probabilidad. La probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda con espín \uparrow es

$$P_I^\uparrow(t) = \left| \langle I, \uparrow | \psi(t) \rangle \right|^2 = \cos^2(Tt/\hbar) \cos^2(T_s T t/\hbar), \quad (4.29)$$

y el de encontrarlo en este pozo con espín \downarrow es

$$P_I^\downarrow(t) = \sin^2(Tt/\hbar) \sin^2(T_s T t/\hbar); \quad (4.30)$$

entonces la probabilidad de encontrar en el pozo de la izquierda, independientemente del espín es la suma de las probabilidades en las ecuaciones (4.29) y (4.30)

$$P_I(t) = P_I^\uparrow(t) + P_I^\downarrow(t) = \frac{1}{2} [1 + \cos(2T_s T t/\hbar) \cos(2Tt/\hbar)]. \quad (4.31)$$

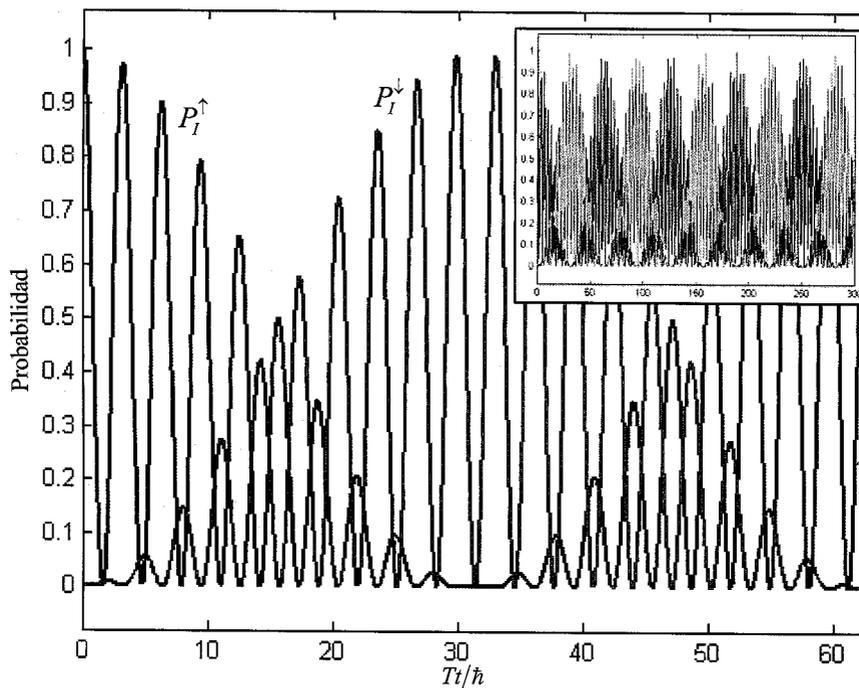


Figura 4.2. Probabilidad de encontrar el electrón en el pozo de la izquierda con espín arriba \uparrow (azul) y abajo \downarrow (rojo) como función de Tt/\hbar . Donde T es la amplitud de tunelaje o transferencia, t el tiempo, \hbar es la constante de Planck, y $T_s = 0.05$ que es equivalente a decir que el material de la barrera es GaSb. En la parte superior derecha la misma gráfica en un intervalo mayor de tiempo.

Si en la expresión de Ec. (4.31) $T_s = 0$, es decir si no existe interacción espín-órbita, recuperamos el resultado de la ecuación Ec. (2.17) de la sección 2.1. Lo mismo sucede con la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la derecha.

Se considera $T_s = 0.05$, que es el valor que toma esta cantidad cuando $\gamma = 187$, $m^* = 0.041$ (valores para GaSb) y la magnitud del momento en el plano xy perpendicular al movimiento es de aproximadamente $2 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Este valor para la magnitud del momento perpendicular está dentro del rango utilizado por Glazov *et al.* (Glazov *et al.*, 2005) en su estudio de las barreras resonantes. La figura 4.2 es la gráfica de las expresiones (4.29) y (4.30) para la probabilidad de encontrar el electrón en el pozo de la izquierda con espín \uparrow (azul) y \downarrow (rojo) respectivamente.

En esta gráfica observamos cómo inicialmente el electrón se encuentra en el pozo de la izquierda con espín \uparrow (la línea azul es 1) y conforme transcurre el tiempo esta probabilidad oscila. En esta oscilación podemos observar dos frecuencias características (veáse la ecuación (4.31)), una relacionada con el movimiento del electrón entre los pozos $2T/\hbar$, que es igual a la observada en el caso estudiado en la sección 2.1; la otra frecuencia de magnitud menor $2T_s T/\hbar$, modula esta probabilidad y está relacionada con el cambio de espín. Esta frecuencia más baja crea modulaciones en la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda con espín \uparrow , haciendo que a determinados intervalos de tiempo (mayores que los periodos de oscilación entre pozos) sea menos (o más) probable encontrar al electrón en el pozo de la izquierda con dicho espín. Estas dos frecuencias están presentes también en la probabilidad de encontrar al electrón con espín \downarrow ; de hecho ambas gráficas son iguales sólo que desfasadas. La gráfica en la esquina superior derecha muestra las mismas expresiones pero en un intervalo de tiempo mayor ($\sim 300 T/\hbar$), en ella vemos que el comportamiento se mantiene a lo largo del tiempo, eso lo podríamos haber predicho por las expresiones para ambas probabilidades.

La gráfica en figura 4.3 compara la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda de la ecuación (4.31) (línea morada continua) con la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda para el caso sin interacción espín-órbita de la sección 2.1, Ec. (2.17), como función de Tt/\hbar . En esta gráfica observamos que la interacción espín-órbita cambia de manera significativa la dinámica del sistema y que el efecto es notable incluso sin hacer distinción de espín.

Para tiempos alrededor de $15 T/\hbar$ la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda se mantiene más o menos constante en 0.5, mientras en el caso sin interacción espín-órbita esta probabilidad oscila entre cero y uno en esta región. Antes de esta región, ambas curvas coinciden en la posición de los máximos sin embargo después de esta los máximos de encuentran totalmente desfasados. Este comportamiento muestra que la medición de la interacción espín-órbita (o la detección de la misma) es en principio posible aun cuando no se mida el espín del electrón: por ejemplo midiendo el desplazamiento de los picos de fotoluminiscencia como en el experimento de Mendez (Mendez *et al.*, 1988).

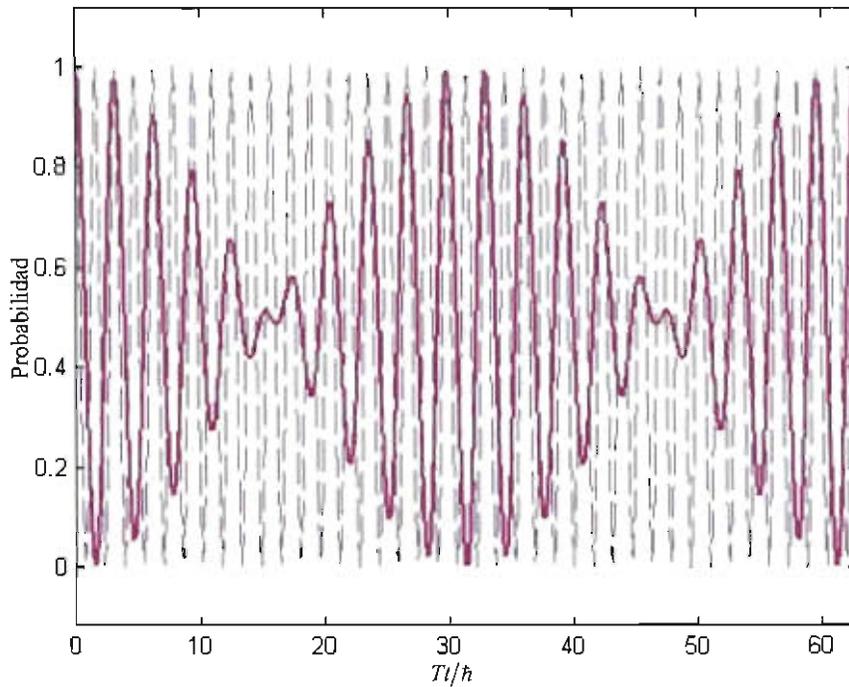


Figura 4.3. Probabilidad de encontrar el electrón en el pozo de la izquierda para el caso con interacción espín-órbita (línea morada continua) en comparación con el caso sin interacción espín-órbita (línea gris discontinua), como función de Tt/\hbar (valores como en Fig. 4.2).

Para el pozo del lado derecho las expresiones son muy parecidas. Las probabilidades por espín son

$$P_D^\uparrow(t) = \text{sen}^2(Tt/\hbar)\text{cos}^2(T_s T t/\hbar) \quad (4.32)$$

$$P_D^\downarrow(t) = \text{cos}^2(Tt/\hbar)\text{sen}^2(T_s T t/\hbar) \quad (4.33)$$

y la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo derecho, es decir la suma de las probabilidades en ecuaciones (4.32) y (4.33) es

$$P_D(t) = \frac{1}{2} [1 - \cos(2Tt/\hbar) \cos(2T_s T t/\hbar)], \quad (4.34)$$

esta expresión también se reduce a la obtenida en el caso sin interacción espín-órbita Ec. (2.18) si $T_s = 0$.

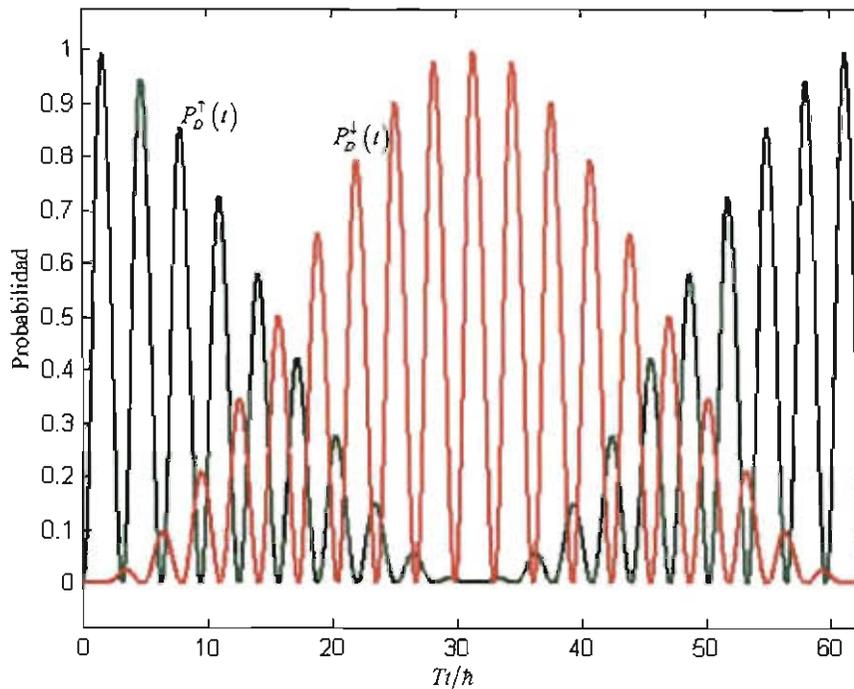


Figura 4.4. Probabilidad de encontrar el electrón en el pozo de la derecha con espín arriba \uparrow (verde) y abajo \downarrow (naranja) como función de Tt/\hbar (Valores como en Fig. 4.2).

La expresión para encontrar al electrón en el pozo de la derecha independiente del espín de la ecuación (4.34) está graficada en figura 4.5 (rojo) junto con la probabilidad de encontrar al electrón en el pozo de la izquierda (negro). En esta figura observamos que para ciertos intervalos de tiempo electrón se encuentra con aproximadamente la misma probabilidad en ambos pozos. Este comportamiento difiere al del caso sin interacción espín-órbita, donde estas probabilidades siempre están oscilando.

En los artículos referentes al hamiltoniano de Perel' se propone utilizar la polarización para caracterizar el comportamiento del espín, el análogo dinámico de dicha propiedad es la magnetización, definida por

$$M_n(t) = \frac{|\langle n, \uparrow | \psi(t) \rangle|^2 - |\langle n, \downarrow | \psi(t) \rangle|^2}{\sum_{\sigma=\uparrow, \downarrow} |\langle n, \sigma | \psi(t) \rangle|^2}, \quad (4.35)$$

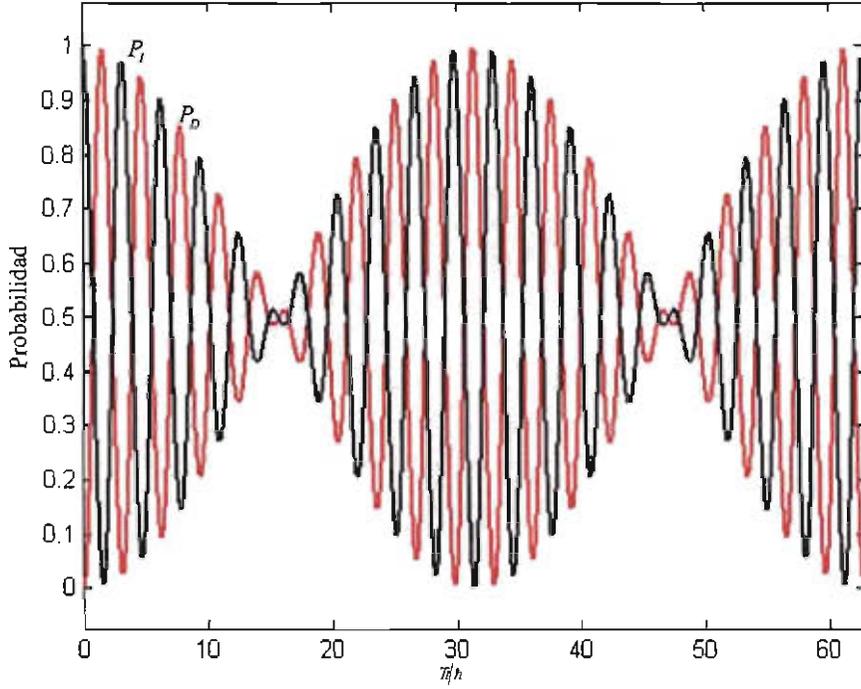


Figura 4.5. Probabilidad de encontrar el electrón en el pozo de la izquierda (negro) y de la derecha (rojo), como función de Tt/\hbar (Valores como en Fig. 4.2).

De esta manera la magnetización para el pozo de la izquierda es

$$M_l(t) = \frac{1}{2} [\cos(2T_s T t/\hbar) + \cos(2T t/\hbar)], \quad (4.36)$$

y

$$M_d(t) = \frac{1}{2} [\cos(2T_s T t/\hbar) - \cos(2T t/\hbar)], \quad (4.37)$$

para el pozo de la derecha. De este modo la magnetización total, la suma de las magnetizaciones de ambos pozos, es

$$M(t) = \cos(2T_s T t/\hbar). \quad (4.38)$$

Si en las ecuaciones (4.36) y (4.37) se hace $T_s = 0$ estas ecuaciones se convierten en las probabilidades para encontrar al electrón en el pozo de la izquierda y derecha en el caso sin interacción espín-órbita, (2.17) y (2.18) respectivamente; y es que sin interacción espín-órbita el electrón tiene por condición inicial siempre espín \uparrow , y el término con el signo negativo en (4.35) se anula; por esta misma razón la ecuación (4.38) es igual a la unidad si $T_s = 0$.

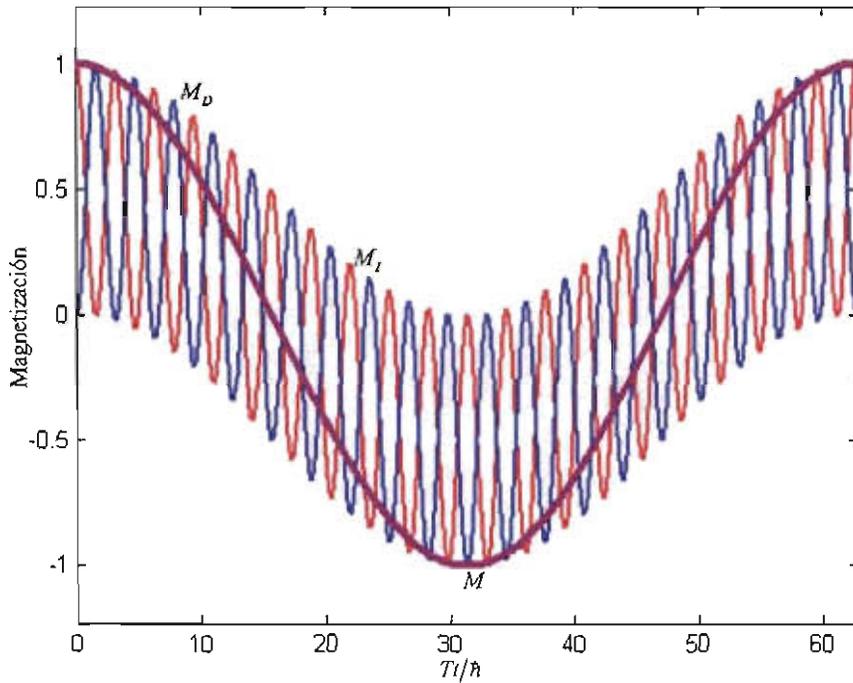


Figura 4.6. Magnetización total (morado), magnetización del pozo de la izquierda (rojo) y de la magnetización del pozo de la derecha (azul); como función de Tt/\hbar . Donde $T_s = 0.05$.

En la figura 4.6 están graficadas las expresiones para la magnetización del pozo izquierdo (línea roja), del pozo derecho (línea azul) y total (línea morada) de ecuaciones (4.36), (4.37). y (4.38), respectivamente. Las tres magnetizaciones van de -1 a 1 . A ciertos instantes de tiempo la magnetización del sistema es -1 (1), lo que implica que el electrón tiene espín \uparrow (\downarrow) con probabilidad 1 . En esta figura se observa que las magnetizaciones de cada pozo oscilan con dos periodos, uno corto $2\hbar\pi/2T$ relacionada con el movimiento del electrón entre los pozos y otro más largo $2\pi\hbar/2T_s T$ relacionado

con el cambio de espín. De hecho la frecuencia ($2T_s T/\hbar$) relacionada con este último período es la que controla la magnetización total del sistema.

Las expresiones (4.36) y (4.37) pueden reescribirse como un producto de funciones trigonométricas

$$M_I(t) = \cos(2(1+T_s)Tt/\hbar)\cos(2(1-T_s)Tt/\hbar), \quad (4.39)$$

$$M_D(t) = \text{sen}(2(1+T_s)Tt/\hbar)\text{sen}(2(1-T_s)Tt/\hbar), \quad (4.40)$$

estas hacen evidente la positividad de las magnetizaciones por pozo si $T_s = 0$.

Para ver el efecto del valor de T_s en la magnetización del sistema graficamos la magnetización total como función de T_s y Tt/\hbar en figura 4.7. En esta gráfica vemos que conforme aumenta T_s las oscilaciones en la magnetización se vuelven más frecuentes. La magnetización siempre va en cada oscilación de -1 a 1 independientemente del valor T_s , no existe una relajación.

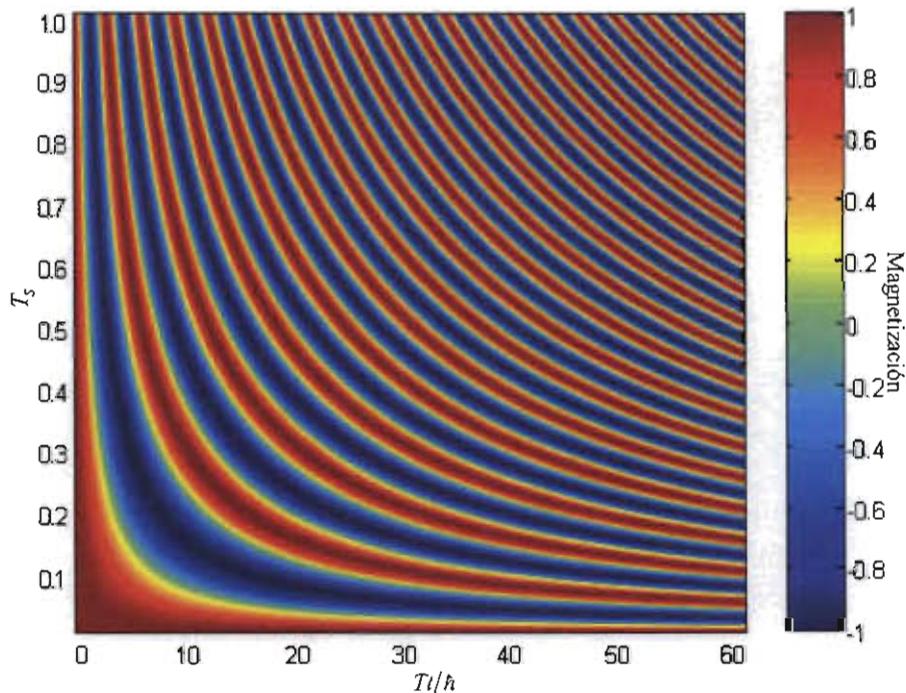


Figura 4.7. Magnetización total como función de Tt/\hbar y T_s .

En resumen, en esta sección hemos visto como la interacción espín-órbita se refleja en la dinámica electrónica del doble pozo cuántico. En este sistema un electrón

con espín inicial \uparrow oscila entre los pozos y cambia de espín con frecuencias $2T/\hbar$ y $2\gamma T/\hbar$ respectivamente.

4.2 El hamiltoniano para el cristal unidimensional infinito con interacción espín-órbita.

En esta sección estudiaremos la dinámica electrónica en un material con interacción espín-órbita Dresselhaus. Un electrón moviéndose en GaSb, InAs, GaAs, InP o InSb, o bien en una superestructura formada de estos materiales, representa un sistema físico para el cual el modelo estudiado en este capítulo es válido. Sin embargo, como en el caso sin interacción espín-órbita, sólo en las superestructuras es factible (con lo métodos actuales) realizar mediciones de las propiedades de la dinámica (Méndez *et al.*, 1988).

El modelo físico consiste en un arreglo unidimensional infinito de sitios espaciados uniformemente por una distancia a , en los cuales se tiene un electrón. En la dirección de movimiento z se aplica un campo eléctrico constante en el espacio con temporal en su magnitud. En las otras direcciones (x, y) se considera una asimetría tal que existe una interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus para un electrón moviéndose en la dirección z . La figura 4.8 muestra el esquema del sistema a estudiar.

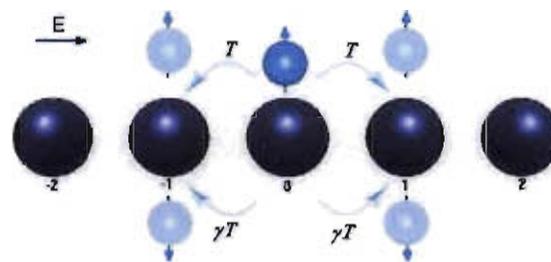


Figura 4.8. Esquema del electrón (esfera central azul claro) y modelo unidimensional de N sitios (esferas azul oscuro), con los posibles eventos mostrados, tunelamiento a vecinos más cercanos sin cambio de espín con amplitud T , y tunelamiento con cambio de espín con amplitud γT . La flecha horizontal muestra la dirección del campo eléctrico E .

Definamos explícitamente el modelo a estudiar. Partimos del hamiltoniano

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}(\mathbf{I}) + \gamma(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \frac{d^2}{dz^2} - eE(t)z(\mathbf{I}) + \sum_n V_n(\mathbf{I}), \quad (4.41)$$

donde el primer término es la energía cinética, m^* es la masa efectiva (para GaSb $m^* = 0.041$); el segundo término es la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus de orden cúbico en el momento bajo la aproximación de Perel'; γ es la constante Dresselhaus de acoplamiento espín-órbita (para GaSb $\gamma = 187 \text{ eV\AA}^3$ -Perel *et al*, 2003); σ_x y σ_y son las matrices de espín de Pauli; (k_x, k_y) es el vector de momento perpendicular a la dirección de movimiento; el tercer término representa la interacción del electrón con el campo eléctrico, que depende en general del tiempo; y el cuarto término es el potencial periódico que forma los sitios donde $V_{n\pm 1}(z) = V_n(z \mp d)$ con la constante d como el parámetro de red en la dirección z .

Utilizamos el conjunto de kets $\{|i, \sigma\rangle = |i\rangle \otimes |\sigma\rangle\}$ (estados de Wannier por espín) que será nuestra *base de sitio y espín*, donde el ket $|\sigma\rangle$ es el espín del electrón, y el ket $|i\rangle$ representa la función de onda $\phi_i(z) = \langle z|i\rangle$ del estado base del i -ésimo sitio -pozo de potencial, solución de una ecuación de Schrödinger de la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_i \right) \phi_i(z) = \epsilon_0 \phi_i(z), \quad (4.42)$$

donde ϵ_0 no depende de i pues los pozos son idénticos. Como en el caso de la red infinita estudiada en sección 2.2, más adelante consideraremos esta base como ortogonal, argumentando localización de estas funciones de onda en los sitios.

Con esta base de sitio y espín escribimos la función de onda del electrón

$$|\psi\rangle = \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma |n, \sigma\rangle, \quad (4.43)$$

o bien,

$$\psi(z) = \langle z|\psi\rangle = \sum_{n,\sigma} \langle z|a_n^\sigma |n, \sigma\rangle = \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma, \quad (4.44)$$

donde los a_n^σ son coeficientes a determinar, y para determinarlos resolveremos la ecuación de Schrödinger de la red de sitios.

El primer paso para resolver la ecuación de Schrödinger es escribir el hamiltoniano en términos de la base de sitio y espín, para después solucionarlo por alguno de los métodos que existen.

En el hamiltoniano de la ecuación (4.41) todos los términos excepto el segundo (el hamiltoniano Dresselhaus) son diagonales en espín. Este término de interacción espín-órbita es diagonal en la eigenbase de espín de la ecuación (3.28):

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp e^{-i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (4.45)$$

donde $\varphi = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$. De hecho, como en el caso del doble pozo con interacción espín-órbita, esta base de espín hace diagonal en espín el hamiltoniano total del sistema,

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(1 + \frac{2m^*}{\hbar^2} \gamma \sqrt{k_x^2 + k_y^2}\right) \frac{d^2}{dz^2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(1 - \frac{2m^*}{\hbar^2} \gamma \sqrt{k_x^2 + k_y^2}\right) \frac{d^2}{dz^2} \end{pmatrix} + \left[-eE(t)\mathbf{z} + \sum_n V_n \right] \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.46)$$

Definimos el operador $\hat{\mathbf{T}} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2}$, y el término $T_s = \frac{2m^*}{\hbar^2} \gamma \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ y con ellos reescribimos el hamiltoniano por componente de espín como sigue,

$$\hat{\mathbf{H}}^\pm = (1 \pm T_s) \hat{\mathbf{T}} + \sum_n V_n - eE(t)\mathbf{z}. \quad (4.47)$$

La ecuación de Schrödinger restringida a los estados base de los pozos es:

$$\hat{\mathbf{H}} \psi = \hat{\mathbf{H}} \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma = E \sum_{n,\sigma} a_n^\sigma \phi_n^\sigma. \quad (4.48)$$

donde, como dijimos anteriormente, cada ϕ_n^σ es a su vez solución de una ecuación de Schrödinger de la forma (4.42). Reescribimos la ecuación (4.48) en términos de los elementos de matriz de la siguiente manera

$$\sum_{n,\sigma} H_{mn}^{\sigma'\sigma} a_n^\sigma = E \sum_{n,\sigma} S_{mn}^{\sigma'\sigma} a_n^\sigma \quad (4.49)$$

donde

$$H_{mn}^{\sigma'\sigma} = \int (\phi_m^{\sigma'})^* \hat{\mathbf{H}} \phi_n^\sigma dz, \quad (4.50)$$

y

$$S_{mn}^{\sigma'\sigma} = \int (\phi_m^{\sigma'})^* \phi_n^\sigma dz \quad (4.51)$$

con σ y $\sigma' \in \{+, -\}$ y los kets $|+\rangle$ y $|-\rangle$ ortogonales; entonces

$$H_{mn}^{\sigma'\sigma} = H_{mi} \delta_{i\sigma'\sigma} \quad (4.52)$$

y

$$S_{mn}^{\sigma'\sigma} = S_{mi} \delta_{i\sigma'\sigma}. \quad (4.53)$$

El problema de eigenvalor generalizado a resolver es, en forma matricial,

$$\hat{H}\Psi = E\hat{S}\Psi. \quad (4.54)$$

Necesitamos los elementos de matriz no nulos en el hamiltoniano para continuar. Estos se calculan a partir de hacer el braket del hamiltoniano entre las funciones de onda soluciones de las ecuaciones de Schrödinger de cada pozo con los eigenvectores de espín; explícitamente

$$H_{m,n}^{\pm,\pm} = \int \phi_m^{\pm*} \left[(1 \pm T_s) \hat{T} + \sum_i V_i - eE(t)n \right] \phi_n^{\pm} dz. \quad (4.55)$$

Consideramos primero los elemento de la diagonal, es decir aquellos en que

$$m = n, \text{ como en el caso de doble pozo } H_{n,n}^{\pm,\pm} = \int \phi_n^{\pm*} \left[\hat{T} + V_n + \sum_{i \neq n} V_i \pm T_s \hat{T} - eE(t)n \right] \phi_n^{\pm} dz,$$

$$H_{n,n}^{\pm,\pm} = \varepsilon_0 \pm T_s \int \phi_n^{\pm*} \hat{T} \phi_n^{\pm} dz - 2c - eE(t)n, \quad (4.56)$$

donde para obtener el primer término de (4.56) hemos utilizado la ecuación (4.42) y normalizaremos la energía tal que $\varepsilon_0 = 0$; la integral del segundo término es igual a cero pues como en el caso de doble pozo no xiste interacción espín-órbita dentro de los pozos; el tercer término es dos veces el campo cristalino $c = \int \phi_n^{\pm*} V_{n\pm} \phi_n^{\pm} dz$, que también aparece en el caso sin interacción espín-órbita, y es la reducción a la energía de la función de onda por ocupar un mayor espacio. Los términos que contemplan la interacción con pozos más lejanos se desprecian por amarre fuerte, es decir, por considerar sólo interacciones con los primeros vecinos $\int \phi_n^{\pm*} V_{n+d} \phi_n^{\pm} dz = 0 \quad \forall |d| > 1$; por último el cuarto término es la interacción con el campo eléctrico. Entonces los términos de la diagonal son

$$H_{n,n}^{\pm,\pm} = -eE(t)n. \quad (4.57)$$

De los términos fuera de la diagonal sólo son distintos de cero aquellos que relacionan sitios vecinos, es decir aquellos en que $m = n \pm 1$,

$$H_{m,m\pm 1}^{\pm,\pm} = \int \phi_m^{\pm,*} \left[(1 \pm T_s) \hat{T} + \sum_i V_i - eE(t)n \right] \phi_{m\pm 1}^{\pm} dz.$$

Nos interesa completar, como en el caso de los términos diagonales, la ecuación (4.42), para esto desarrollamos algunos términos de la sumatoria y sumamos y restamos

$T_s V_{m\pm 1}$,

$$H_{m,m\pm 1}^{\pm,\pm} = \int \phi_m^{\pm,*} \left[(1 \pm T_s) \hat{T} + V_m + V_{m\pm 1} + \sum_{i \neq m,m\pm 1} V_i \pm T_s V_{m\pm 1} \mp T_s V_{m\pm 1} - eE(t)n \right] \phi_{m\pm 1}^{\pm} dz$$

entonces

$$H_{m,m\pm 1}^{\pm,\pm} = (1 \pm T_s) \varepsilon_0 \int \phi_m^{\pm,*} \phi_{m\pm 1}^{\pm} dz + \int \phi_m^{\pm,*} V_m \phi_{m\pm 1}^{\pm} dz \mp T_s \int \phi_m^{\pm,*} V_{m\pm 1} \phi_{m\pm 1}^{\pm} dz, \quad (4.58)$$

donde el primer término se anula pues hemos considerado $\varepsilon_0 = 0$, y las integrales del segundo y tercer término son idénticas por simetría y son las integrales de tuneleo o transferencia T . Entonces los elementos fuera de la diagonal son:

$$H_{m,m\pm 1}^{\pm,\pm} = -(1 \mp T_s) T. \quad (4.59)$$

Por lo tanto el hamiltoniano del sistema expresado en brakets es

$$\hat{H} = \sum_n \left\{ -T(1-T_s) \left[|n+1,+\rangle \langle n,+| + |n-1,+\rangle \langle n,+| \right] - f(t)n |n,+\rangle \langle n,+| \right. \\ \left. -T(1+T_s) \left[|n+1,-\rangle \langle n,-| + |n-1,-\rangle \langle n,-| \right] - f(t)n |n,-\rangle \langle n,-| \right\}, \quad (4.60)$$

donde hemos definido $f(t) = eE(t)$.

Cada renglón del hamiltoniano de Ec. (4.60) es el equivalente al hamiltoniano de un electrón en una red periódica con una masa efectiva $m^* = m^*/(1 \pm T_s)$, y sin interacción espín-órbita. Entonces los términos k^3 de la interacción espín-órbita Dresselhaus causan una dependencia de la masa efectiva con en el espín, como apuntaron en su artículo Perel' *et al.* (Perel' *et al.*, 2003). La dinámica procede en el espacio $|+\rangle$, $|-\rangle$ como dos sistemas independientes con tuneleo efectivo $T(1-T_s)$ y $T(1+T_s)$.

En esta base de funciones de Wannier por sitio y por espín la función de onda del electrón es

$$|\Psi\rangle = \sum_n a_n^+ |n,+\rangle + a_n^- |n,-\rangle; \quad (4.61)$$

a_n^+ y a_n^- son coeficientes de las funciones de Wannier a determinar a partir de resolver la ecuación de Schrödinger, ya sea dependiente o independiente del tiempo, según cada

caso de $f(t)$. Si consideramos al electrón inicialmente localizado en el sitio central $n = 0$, con espín arriba, tenemos:

$$|\Psi(t=0)\rangle = |0, \uparrow\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0, +\rangle + |0, -\rangle). \quad (4.62)$$

4.3 Campo eléctrico cero.

En el caso en que $f(t) = 0$, es decir, cuando no existe campo eléctrico, el hamiltoniano de Ec. (4.60) se simplifica para ser

$$\hat{H} = \sum_n \left\{ -(T - TT_s) [|n+1, +\rangle \langle n, +| + |n-1, +\rangle \langle n, +|] \right. \\ \left. -(T + TT_s) [|n+1, -\rangle \langle n, -| + |n-1, -\rangle \langle n, -|] \right\}, \quad (4.63)$$

y sólo hay que encontrar la solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle. \quad (4.64)$$

Comenzamos por sustituir la función de onda (4.61) y el hamiltoniano de (4.63) en la ecuación de Schrödinger para obtener la siguiente expresión

$$E \sum_n \{ a_n^+ |n, +\rangle + a_n^- |n, -\rangle \} = \sum_n \left\{ -(T - TT_s) [a_{n-1}^+ |n, +\rangle + a_{n+1}^+ |n, +\rangle] \right. \\ \left. -(T + TT_s) [a_{n-1}^- |n, -\rangle + a_{n+1}^- |n, -\rangle] \right\}, \quad (4.65)$$

la cual por independencia lineal de los estado de Wannier por espín, es equivalente a N (N es el número de sitios que en nuestro caso consideramos infinito) pares de ecuaciones de la forma

$$Ea_n^+ = -(T - TT_s) [a_{n-1}^+ + a_{n+1}^+], \quad (4.66)$$

$$Ea_n^- = -(T + TT_s) [a_{n-1}^- + a_{n+1}^-]. \quad (4.67)$$

Las funciones a_n^+ y a_n^- son funciones periódicas en n , porque consideramos una red periódica infinita. Y por el teorema de Bloch, podemos escribir las amplitudes como

$$a_n^\pm = \sum_k a_k^\pm \exp(iknd), \quad (4.68)$$

donde k es el momento de Bloch y d el parámetro de red.

En este análisis consideraremos $d = 1$, sabemos que el valor de esta constante no aparece explícitamente en la función de onda (vea sección 2.2). Por esto la vamos a

considerar igual la unidad. No obstante es importante resaltar que el valor de T , y por tanto la dinámica del sistema, sí depende de a .

Sustituyendo la expresión de Bloch para la función de onda de la ecuación (4.68) en las de ecuaciones (4.66) y (4.67), se obtiene

$$E \sum_k a_k^\pm \exp(ikn) = -(T \mp TT_s) \left\{ \sum_k a_k^\pm \exp[ik(n-1)] + \sum_k a_k^\pm \exp[ik(n+1)] \right\}. \quad (4.69)$$

Utilizando la independencia lineal de las a_k^\pm , obtenemos sin pérdida de generalidad que (para algún $k = \kappa$)

$$E a_\kappa^\pm \exp(i\kappa n) = -(T \mp TT_s) [a_\kappa^\pm \exp[i\kappa(n-1)] + a_\kappa^\pm \exp[i\kappa(n+1)]], \quad (4.70)$$

de esta expresión podemos obtener la energía, y obtener así los eigenvalores del hamiltoniano.

$$E_\kappa^\pm = -2T(1 \mp T_s) \cos(\kappa). \quad (4.71)$$

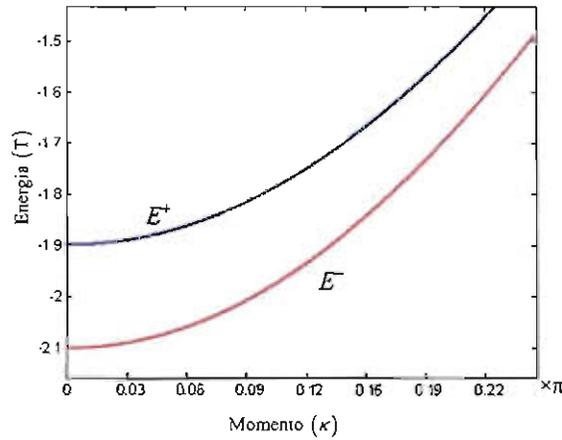


Figura 4.9 Niveles de energía de la ecuación (4.71).

La ecuación (4.71) muestra los eigenvalores de energía, la relación de dispersión, que es muy parecida a la relación correspondiente para el caso sin interacción espín-órbita (vea sección 2.2). La diferencia principal entre ellas es el cambio en el coeficiente del coseno. En este caso el coeficiente depende del espín, es decir, para una misma κ hay una diferencia de $4TT_s \cos \kappa$ en energía entre cada componente de espín. Esto genera dos subbandas de energía esquematizadas en la figura 4.9.

Para encontrar la evolución de las funciones de onda por sitio al tiempo t , escribimos la función de onda total en términos de los eigenestados k por espín

$$|\psi(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k a_k^+(t) \otimes |+\rangle + a_k^-(t) \otimes |-\rangle, \quad (4.72)$$

donde $N = \sum n$ y a_k^\pm tiene la forma de Bloch. De manera explícita

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = & \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k C_k^+ \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \exp[-iE_k^+ t] \sum_n \exp[ikn] |n\rangle \right\} \otimes |+\rangle \\ & + C_k^- \left\{ \frac{1}{\sqrt{N}} \exp[-iE_k^- t] \sum_n \exp[ikn] |n\rangle \right\} \otimes |-\rangle, \end{aligned} \quad (4.73)$$

con E_k^\pm dado por (4.71), y C_k^\pm constantes a determinar a partir de las condiciones iniciales. Podemos reescribir entonces la Ec. (4.73) como

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle = & \sum_n \frac{1}{N} \left\{ \sum_k C_k^+ \exp[-iE_k^+ t] \exp[ikn] |n, +\rangle \right. \\ & \left. + \sum_k C_k^- \exp[-iE_k^- t] \exp[ikn] |n, -\rangle \right\}. \end{aligned} \quad (4.74)$$

Ahora bien, de las ecuaciones (4.61) y (4.74) obtenemos los coeficientes de Wannier dependientes del tiempo para el sitio n por espín,

$$a_n^\pm = \frac{1}{N} \sum_k C_k^\pm \exp[-iE_k^\pm t] \exp[ikn]. \quad (4.75)$$

Esta ecuación representa la solución general del problema dependiente del tiempo. Para encontrar la solución particular pedimos que se cumpla la condición inicial Ec. (4.62), esto es

$$a_n^\pm(t=0) = \frac{1}{N} \sum_k C_k^\pm \exp[ikn] = \frac{\delta_{n,0}}{\sqrt{2}}. \quad (4.76)$$

Para satisfacer este par de ecuaciones requerimos se cumpla que el coeficiente sea

$$C_k^\pm = \frac{N}{\sqrt{2}} \forall k, \quad (4.77)$$

por lo tanto, sustituyendo los eigenvalores de energía obtenemos

$$a_n^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k \exp[i2T(1 \mp T_s) \cos(\kappa)t + ikn]. \quad (4.78)$$

Para simplificar esta expresión, que es una suma infinita, utilizamos la relación de Jacobi-Anger: $e^{ix \cos \omega} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(x) e^{in\omega}$, y escribimos la función exponencial como

$$\exp[i2(T \mp T_s) \cos(k)t + ikn] = \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m[2T(1 \mp T_s)t] \exp(ikm + ikn), \quad (4.79)$$

y llegamos a la siguiente expresión

$$a_n^\pm(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m[2T(1 \mp T_s)t] \exp(ikm + ikn), \quad (4.80)$$

en la cual después de intercambiar sumas y utilizar la definición de la delta de Kronecker se llega a

$$\begin{aligned} a_n^\pm(t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m[2T(1 \mp T_s)t] \underbrace{\sum_k \exp[ik(m+n)]}_{\delta_{m,-n}} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m[2T(1 \mp T_s)t] \delta_{m,-n} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} i^{-n} J_{-n}[2T(1 \mp T_s)t], \end{aligned} \quad (4.81)$$

como $i^{-n} = (-1)^n (i)^n$, $\exp\left[\frac{i\pi}{2}\right] = i$, y $J_n(x) = (-1)^n J_{-n}(x)$; llegamos a la forma simplificada del coeficiente de la función de Wannier por espín

$$a_n^\pm(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \exp\left[\frac{i\pi n}{2}\right] J_n[2T(1 \mp T_s)t]. \quad (4.82)$$

Esta es la solución escrita en términos de la base de espín $\{+, -\}$ que diagonaliza el hamiltoniano Dresselhaus. Sin embargo nos interesa expresar estos coeficientes en la base de espín de σ_z , $\{\uparrow, \downarrow\}$. A partir de la ecuación (4.45) tenemos que

$$a_n^\uparrow = \left(\frac{a_n^+ + a_n^-}{\sqrt{2}} \right), \quad (4.83)$$

$$a_n^\downarrow = e^{-i\theta} \left(\frac{a_n^+ - a_n^-}{\sqrt{2}} \right). \quad (4.84)$$

Entonces los coeficientes de las funciones de Wannier en la base de σ_z son las siguientes

$$a_n^\uparrow = \frac{1}{2} \exp\left[\frac{i\pi n}{2}\right] (J_n[2T(1-T_s)t] + J_n[2T(1+T_s)t]), \quad (4.85)$$

$$a_n^\downarrow = \frac{1}{2} e^{-i\theta} \exp\left[\frac{i\pi n}{2}\right] (J_n[2T(1-T_s)t] - J_n[2T(1+T_s)t]). \quad (4.86)$$

Estas ecuaciones junto con la Ec. (4.61) proporcionan la solución analítica del problema. Lo primero a verificar, es la normalización de la función de onda,

$$\begin{aligned}
|\langle \Psi | \Psi \rangle|^2 &= \left(\sum_m (\varphi_m^+)^* \langle m, + | + (\varphi_m^-)^* \langle m, - | \right) \sum_n \varphi_n^+ |n, + \rangle + \varphi_n^- |n, - \rangle \\
&= \sum_n |\varphi_n^+|^2 + |\varphi_n^-|^2 = \frac{1}{2} \left(\sum_n J_n^2 [2T(1-T_s)t] + J_n^2 [2T(1+T_s)t] \right).
\end{aligned} \tag{4.87}$$

Esta expresión es idéntica a la unidad. Para demostrarlo es necesario utilizar el conocido teorema de adición de Neumann para la funciones Bessel (Abramowitz y Stegun, 1970),

$$1 = J_0^2(z) + 2 \sum_{k=1}^{\infty} J_k^2(z). \tag{4.88}$$

Al igual que en el caso sin interacción espín-órbita los coeficientes de las funciones de Wannier involucran funciones Bessel con argumentos efectivos. La similitud, sin embargo, no es evidente como en las relaciones de dispersión.

Si en los coeficientes para los kets de Wannier por espín de las ecuaciones (4.85) y (4.86) hacemos $T_s = 0$, la primera de la ecuación se reduce a

$$a_n^\uparrow = \exp\left[\frac{i\pi n}{2}\right] J_n[2Tt], \tag{4.89}$$

que es idéntica a la ecuación para los coeficientes en el caso sin interacción espín-órbita (con $\varepsilon = 0$, pues así lo hemos considerado en este análisis). En la segunda ecuación todos los coeficientes se anulan.

Cuando hacemos $T_s = 0$ estamos despreciando la interacción espín-órbita. Como en la condición inicial el electrón tiene espín \uparrow y no existe mecanismo que acopla el espín con la dinámica, el espín se conserva. Es por eso que los coeficientes para la componente \downarrow se anulan y que los coeficientes para la componente \uparrow son idénticos a los obtenidos para el caso sin interacción espín-órbita.

Una vez que tenemos la función de onda y los coeficientes de los estados de Wannier por espín, es posible calcular las propiedades que caracterizan la dinámica del sistema.

Inicialmente el electrón está totalmente localizado en el sitio cero con espín \uparrow , la probabilidad de encontrar al electrón dicho estado como función del tiempo es útil para caracterizar que tanto se difunde el electrón en el sistema, y la memoria que guarda el sistema de la condición inicial (al menos de manera cualitativa). La expresión para calcular la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio n con espín σ es

$$P_n^\sigma(t) = \langle \psi(t) | n, \sigma \rangle \langle n, \sigma | \psi(t) \rangle = |a_n^\sigma(t)|^2. \tag{4.90}$$

Sustituyendo las expresiones para los coeficientes en ecuaciones (4.85) y (4.86) obtenemos la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio n con espín $\uparrow(\downarrow)$

$$P_n^\uparrow(t) = |a_n^\sigma(t)|^2 = \frac{1}{4} \left(J_n [2T(1-T_s)t] \pm J_n [2T(1+T_s)t] \right)^2. \quad (4.91)$$

Esta expresión es muy importante pues además de que con ella podemos calcular todas las propiedades dinámicas del sistema, nos da por sí misma información muy valiosa de la dinámica del sistema.

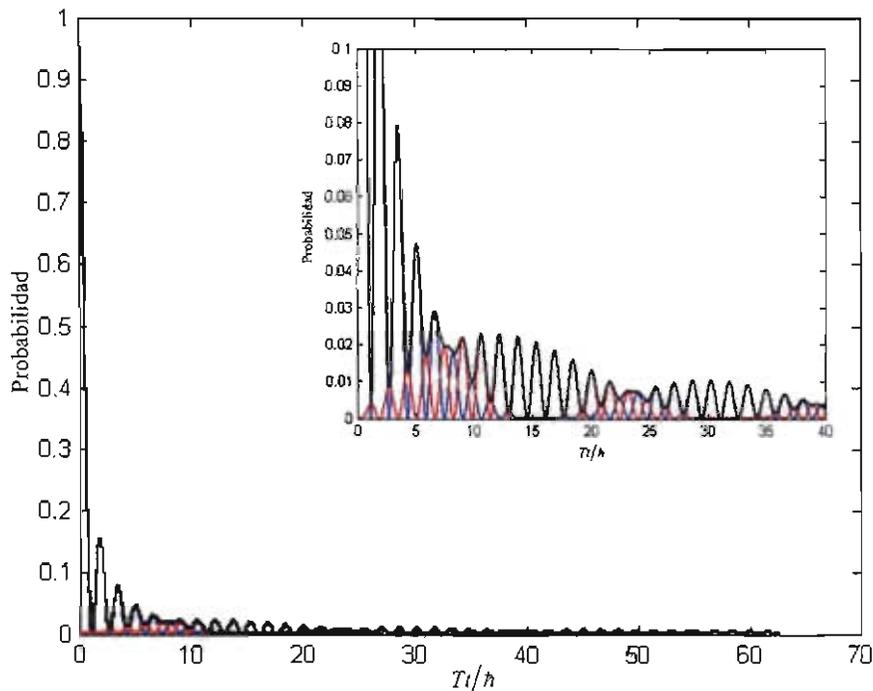


Figura 4.10 Evolución temporal de la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 0 como función de Tt/h (negro) y las probabilidades para cada componente de espín, arriba (azul) y abajo (rojo) como función de Tt/h . Donde T es la amplitud de tuneldeo, t el tiempo, y hemos considerado $T_s = 0.05$. Esquina superior derecha: un acercamiento de la gráfica para tiempos cortos.

La figura 4.10 muestra la evolución temporal de la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 0 como función del tiempo (negro) y las probabilidades para cada componente de espín, arriba (azul) y abajo (rojo). En esta figura vemos cómo inicialmente el electrón está en este sitio con probabilidad 1 (condición inicial), y para tiempos relativamente cortos esta probabilidad disminuye de manera drástica. En la gráfica interna se muestra una vista más cercana del comportamiento para tiempos

cortos en la que se puede apreciar cómo la probabilidad de encontrar el electrón con espín abajo es inicialmente cero y luego aumenta para de nuevo llegar a cero; este comportamiento se repite con menos intensidad cada vez. Es en la componente de espín abajo donde podemos notar la presencia de dos frecuencias en la dinámica electrónica, una controlada por el tuneo entre vecinos generado por la energía cinética del hamiltoniano (oscilaciones con periodo corto) y otra frecuencia controlada por la magnitud de tuneo con interacción espín-órbita. Algo similar ocurre en el caso de los dos pozos con interacción espín-órbita.

Para saber cómo se distribuye la probabilidad de encontrar a electrón a través de los sitios, graficamos la expresión (4.91) como función del tiempo y el sitio.

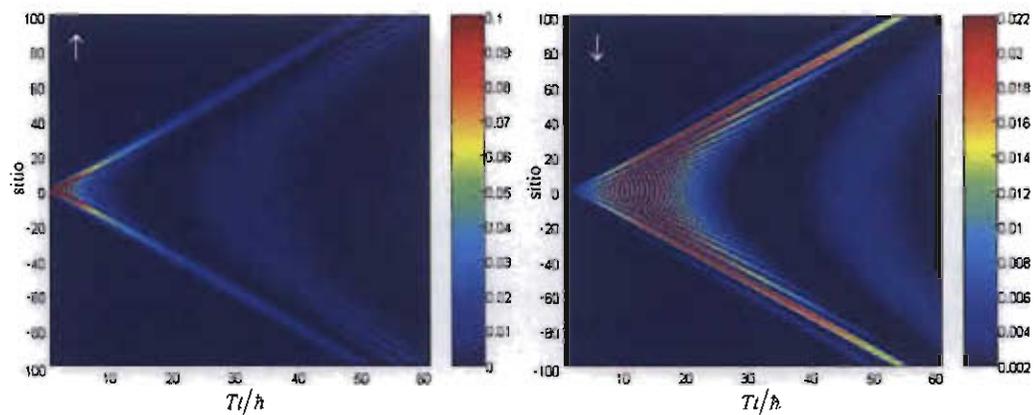


Figura 4.11 Probabilidad de encontrar al electrón por sitio con espín arriba (izquierda) y con espín abajo (derecha) como función de Tt/\hbar . Donde T es la amplitud de tuneo, t el tiempo, y hemos considerado $T_t = 0.05$. El color indica la magnitud de la probabilidad de acuerdo con la escala mostrada a la derecha.

Las gráficas en la figura 4.11 muestran las componentes de la función con espín \uparrow (izquierda) y \downarrow (derecha) por sitio para diferentes tiempos. En el eje vertical se muestran los sitios, en medio el sitio central 0, hacia arriba los sitios etiquetados como positivos y hacia abajo los sitios etiquetados como negativos. En el eje horizontal se representa el tiempo. El color de cada punto indica la probabilidad de encontrar al electrón en ese sitio al instante correspondiente de tiempo. Existe una diferencia en las escalas entre ambas gráficas: la probabilidad de encontrar al electrón con espín \uparrow es mayor por un orden de magnitud. Podemos observar en la escala a la derecha de cada mapa de colores en Fig. 4.11 como para el espín \uparrow el máximo es 0.1 y para el espín \downarrow

es 0.022. En ambos gráficos hemos eliminado el primer intervalo de tiempo Tt/\hbar para poder observar la evolución, ya que la probabilidad decae muy rápido.

En estas gráficas se observa que la función de onda es simétrica en el espacio para ambas componentes de espín, y que conforme aumenta el tiempo la función de onda del electrón se difunde a través de la red.

Utilizando la forma asintótica principal de la función Bessel para un n fijo y el módulo del argumento tendiendo a infinito $|z| \rightarrow \infty$, dada por

$$J_\nu(z) = \sqrt{2/\pi z} \cos(z - \nu\pi/2 - \pi/4), \quad (4.92)$$

obtenemos la expresión de la probabilidad por sitio y espín para tiempos largos ($t \rightarrow \infty$)

$$\begin{aligned} P_n^\uparrow(t)_{t \rightarrow \infty} = & \frac{1}{4\pi Tt} \left(\frac{1}{1-T_s} \cos^2[2T(1-T_s)t - n\pi/2 - \pi/4] \right. \\ & \pm \frac{1}{2(1-T_s^2)} [\cos(4Tt) + \cos(4Tt - n\pi - \pi/2)] \\ & \left. + \frac{1}{1+T_s} \cos^2[2T(1+T_s)t - n\pi/2 - \pi/4] \right). \end{aligned} \quad (4.93)$$

En esta expresión observamos que la probabilidad por sitio decae en el tiempo como $1/t$.

Si sumamos las contribuciones a la función de onda de las dos componentes de espín obtenemos la probabilidad de encontrar al electrón por sitio, explícitamente:

$$P_n(t) = |\varphi_n^\uparrow(t)|^2 + |\varphi_n^\downarrow(t)|^2 = \frac{1}{2} \left(J_n^2[2T(1-T_s)t] \pm J_n^2[2T(1+T_s)t] \right). \quad (4.94)$$

Las gráficas en la figura 4.12 muestran la probabilidad por sitio para diferentes intervalos de tiempo (sin importar el espín). En ellas se observa como el sistema es difusivo, conforme transcurre el tiempo la función de onda del electrón se extiende en una gran cantidad de sitios y como en el caso libre, crece como t^2 .

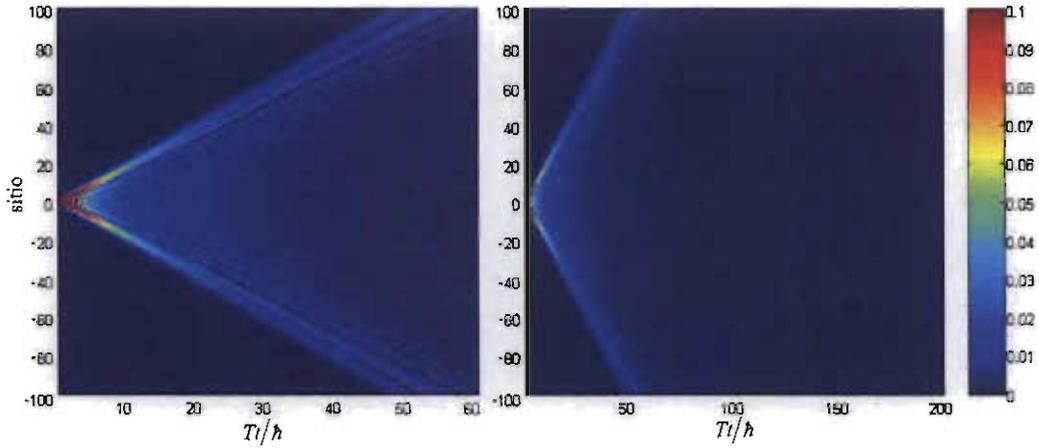


Figura 4.12 Probabilidad de encontrar al electrón por sitio como función de Tt/\hbar , para diferentes intervalos de tiempo. Donde T es la amplitud de tuneleo, t el tiempo, y hemos considerado $T_s = 0.05$. El color indica la magnitud de la probabilidad de acuerdo con la escala mostrada a la derecha.

Para caracterizar la difusión en el sistema, se utiliza la dispersión cuadrática media, cuya expresión es

$$\langle r^2(t) \rangle = \langle \Psi(t) | n^2 | \Psi(t) \rangle = \sum_n \left\{ |a_n^\uparrow|^2 n^2 + |a_n^\downarrow|^2 n^2 \right\}; \quad (4.95)$$

sustituyendo la probabilidad por sitio en (4.91) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle r^2(t) \rangle = \sum_n \frac{1}{4} \left\{ \left(J_n[2(T - TT_s)t] + J_n[2(T + TT_s)t] \right)^2 n^2 \right. \\ \left. + \left(J_n[2(T - TT_s)t] - J_n[2(T + TT_s)t] \right)^2 n^2 \right\}, \end{aligned} \quad (4.96)$$

$$\langle r^2(t) \rangle = \frac{1}{2} \sum_n n^2 J_n^2[2(T - TT_s)t] + \frac{1}{2} \sum_n n^2 J_n^2[2(T + TT_s)t]. \quad (4.97)$$

Donde en esta última ecuación (4.97) utilizamos la siguiente relación para las funciones Bessel

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} n^2 J_n^2(z) = 2 \left(\frac{z}{2} \right)^2, \quad (4.98)$$

que es un corolario del teorema del producto de las Bessel (Gradshteyn y Ryzhik, 1963), para simplificarla y obtener

$$\langle r^2(t) \rangle = 2T^2 t^2 + 2T^2 T_s^2 t^2 = 2T^2 (1 + T_s^2) t^2. \quad (4.99)$$

Ya que la dispersión cuadrática media es directamente proporcional al cuadrado del tiempo, concluimos que el sistema es superdifusivo, tal como en el caso sin interacción espín-órbita de la sección 2.2; sin embargo, en este caso el coeficiente de difusión es mayor por un factor el $(1+T_r^2)$.

También podemos caracterizar la difusión por espín. La dispersión cuadrática media por espín nos habla de la dispersión por componente de espín, podemos predecir de las gráficas en figura 4.11 que el comportamiento no difusivo no difiere mucho entre las componentes de espín. La expresión para calcular la dispersión cuadrática por espín es

$$\langle r_\sigma^2(t) \rangle = \langle \psi(t) | \sigma \rangle n^2 \langle \sigma | \psi(t) \rangle = \sum_n \left(|a_n^\sigma(t)|^2 \right) n^2, \quad (4.100)$$

en nuestro caso toma la forma

$$\langle r_\uparrow^2(t) \rangle = T^2 [1 + T_r^2] t^2 \pm \frac{1}{2} \sum_n J_n [2(T - TT_r)_t] J_n [2(T + TT_r)_t] n^2, \quad (4.101)$$

según esta expresión la difusión por espín podría considerarse cuadrática debido al primer término, sin embargo el segundo término también crece con el tiempo y es oscilatorio. En la dispersión total este término no aparece pues se elimina al sumar las contribuciones de cada componente de espín, sin embargo da origen a un comportamiento oscilatorio.

En la figura 4.13 se muestran las gráficas de la dispersión total (negro), la dispersión para el espín \uparrow (azul), y la dispersión para el espín \downarrow (rojo). En ella vemos que el segundo término del lado derecho de la ecuación (4.101) para la dispersión por espín causa oscilaciones entre ambas componentes de espín. Esto sugiere que conforme transcurre el tiempo hay instantes en los que la parte de la función de onda con espín \uparrow ocupa un mayor espacio o con mayor probabilidad las regiones más alejadas del centro, que la parte con espín \downarrow y hay otros momentos en los que sucede lo contrario.

De las gráficas en figura 4.13 vemos que cuando el electrón se difunde en los sitios del sistema hay intervalos de tiempo en los cuales una componente de espín está más presente (tiene mayor probabilidad en la red) que la otra, esto sugiere la existencia de una magnetización o polarización en el sistema.

La magnetización, como vimos en el capítulo anterior, es el valor esperado de σ_z . Podemos calcular la magnetización por sitio y la magnetización total del sistema.

El hamiltoniano del sistema (Ec. (4.63)) es diagonal al ser escrito en la base de espín $\{+, -\}$. El estado de espín \uparrow , que es el estado inicial del electrón, no es elemento de esta base, y por tanto no es un eigenespínor del hamiltoniano. Es evidente que en el sistema existirá una magnetización total no constante.

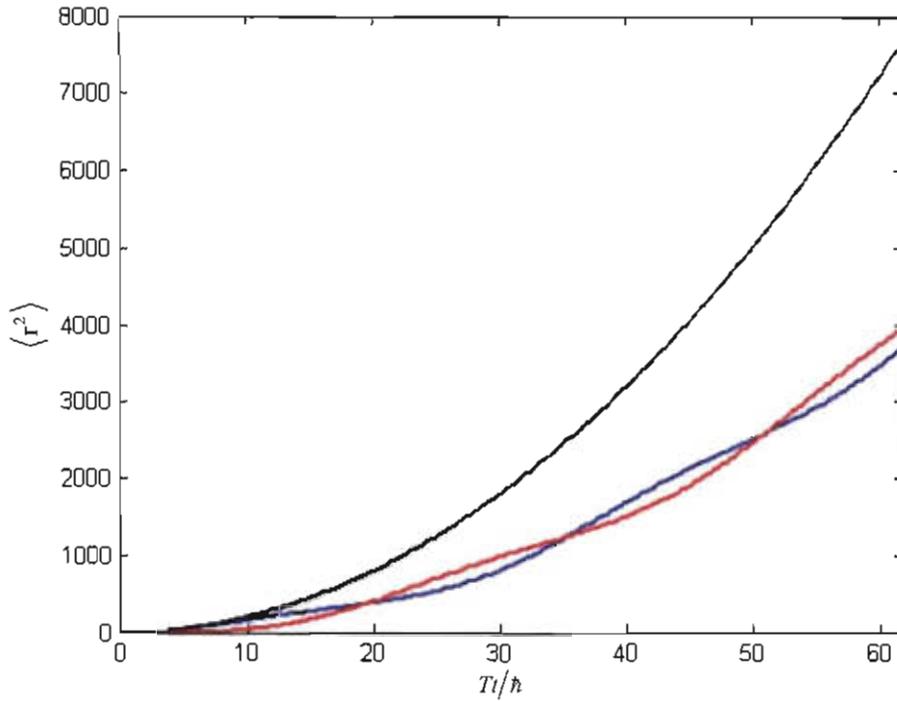


Figura 4.13 Dispersión cuadrática media total (negro) y dispersiones cuadráticas por componentes de espín \uparrow (azul) y \downarrow (rojo) como función de Tt/\hbar . Donde T es la amplitud de tuneo, t el tiempo, y hemos considerado $T_s = 0.05$.

La magnetización por sitio es

$$M_n(t) = \langle \psi(t) | (|n\rangle\langle n| \otimes \sigma_z) | \psi(t) \rangle = P_n^\uparrow - P_n^\downarrow \quad (4.102)$$

$$M_n(t) = J_n[2(T - TT_s)t] J_n[2(T + TT_s)t],$$

ya la magnetización total es la suma de las contribuciones de todas las magnetizaciones por sitio

$$M(t) = \sum_n J_n[2(T - TT_s)t] J_n[2(T + TT_s)t]. \quad (4.103)$$

Esta expresión se puede simplificar utilizando la siguiente relación para las funciones Bessel (Gradshteyn y Ryzhik, 1963)

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} J_{v+k}(t) J_k(z) = J_v(t-z) \quad [|z| < |t|], \quad (4.104)$$

y se obtiene

$$M(t) = J_0[4TT_s t]. \quad (4.105)$$

La figura 4.14 muestra la evolución temporal de la magnetización por sitio [Ec. (4.103)]. En el eje vertical se representan los sitios de la red, en el eje horizontal el tiempo, y el color de cada punto representa el valor de la magnetización conforme la escala de la derecha. La magnetización en el sitio n -ésimo es positiva cuando la probabilidad P_n^\uparrow es mayor que la probabilidad P_n^\downarrow y viceversa.

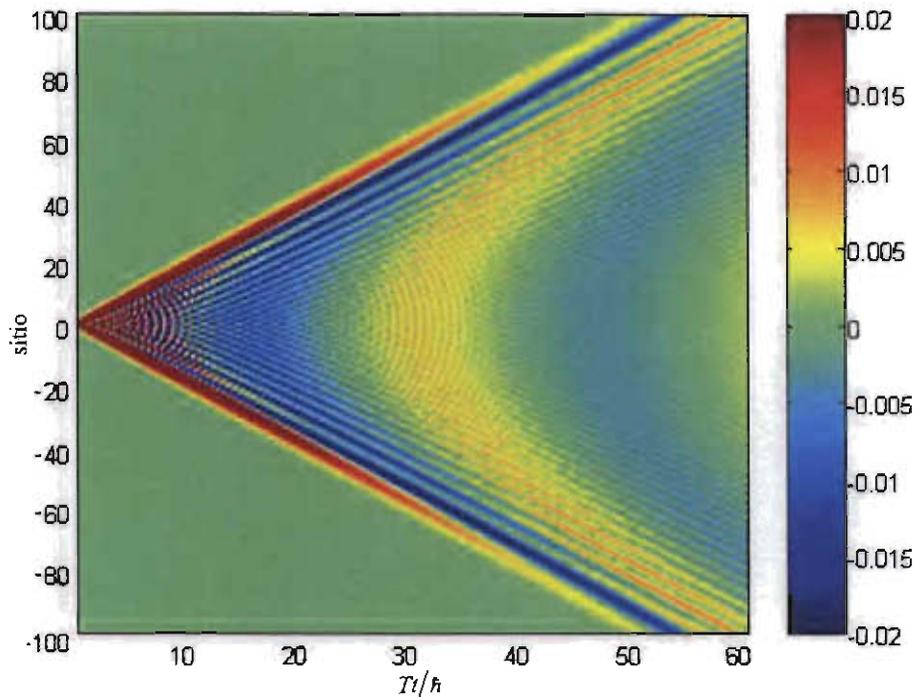


Figura 4.14 Gráfica de la evolución temporal de la magnetización por sitio. Donde T es la amplitud de tuneleo y t el tiempo, y hemos considerado $T_s = 0.05$. El color de cada punto representa el valor de la magnetización en cada sitio a un tiempo dado.

Conforme avanza el tiempo el sistema muestra una relajación en la magnetización. Inicialmente la magnetización está concentrada en un sitio y con magnitud máxima 1, conforme transcurre el tiempo la magnetización se dispersa y disminuye la intensidad en cada punto. De hecho la disminución en la magnetización es evidente si vemos la expresión en Ec. (4.105) para la magnetización total: la función

Bessel de orden 0 oscila pero disminuye en la forma característica de las funciones Bessel conforme se incrementa su argumento, y para tiempos largos decae como $1/t$ y oscila con frecuencia $4TT_s$.

El valor T_s es relativamente pequeño y está dentro del argumento de la función Bessel, así el decaimiento de la amplitud de las oscilaciones se hace mucho más lento que, por ejemplo, la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 0. La figura 4.15 presenta la evolución temporal de la magnetización total.

Para el comportamiento a tiempos largos utilizamos la forma asintótica principal de la función Bessel de la ecuación (4.92) y obtenemos:

$$M(t)_{t \gg 1} = \sqrt{1/2\pi TT_s t} \cdot \cos\left(4TT_s t - \pi/4\right), \quad (4.106)$$

de ésta expresión vemos que para tiempos largos la magnetización total oscila con una frecuencia igual a $4TT_s$ y que la amplitud de dicha oscilación decae como $1/t^{1/2}$.

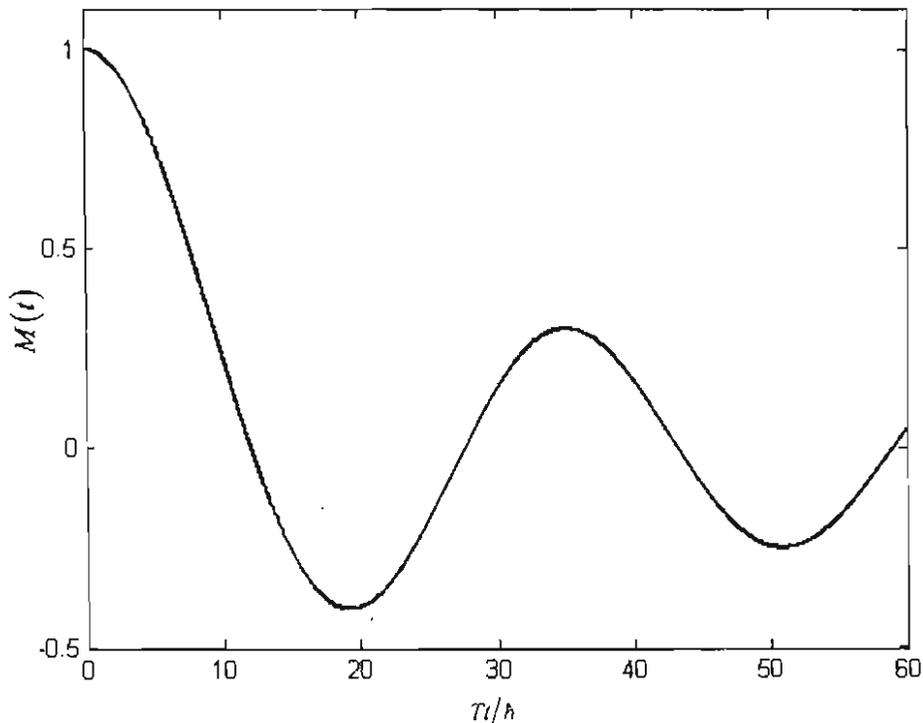


Figura 4.15 Magnetización total como función Tt/h . Donde T es la amplitud de tuncleo y t el tiempo.

4.4 Campo eléctrico constante: Oscilaciones de Bloch.

Ahora consideramos un campo eléctrico constante, esto es $f(t) = \omega$, el hamiltoniano de la ecuación (4.60) se puede expresar de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \sum_n \left\{ -(T - TT_s) [|n+1, +\rangle \langle n, +| + |n-1, +\rangle \langle n, +|] - \omega n |n, +\rangle \langle n, +| \right. \\ \left. - (T + TT_s) [|n+1, -\rangle \langle n, -| + |n-1, -\rangle \langle n, -|] - \omega n |n, -\rangle \langle n, -| \right\}. \quad (4.107)$$

Como en el caso anterior –sin campo eléctrico– el hamiltoniano no depende del tiempo, por lo que solucionamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (4.108)$$

misma que es equivalente a N (infinitos) pares de ecuaciones de la forma:

$$Ea_n^+ = -T(1 - T_s) [a_{n-1}^+ + a_{n+1}^+] - \omega n a_n^+, \quad (4.109)$$

$$Ea_n^- = -T(1 + T_s) [a_{n-1}^- + a_{n+1}^-] - \omega n a_n^-. \quad (4.110)$$

Estas ecuaciones son diferentes a las correspondientes para la sección anterior debido al nuevo término de campo eléctrico, los términos con ω al final de las dos ecuaciones anteriores, ellos crean una asimetría espacial –llamada escalera de Stark– que hace imposible la utilización del teorema de Bloch. Es por esto que para resolver estas ecuaciones haremos uso del teorema de unicidad para ecuaciones diferenciales ordinarias: si existe una expresión que satisface la ecuación y cumple con las condiciones iniciales, entonces dicha expresión es la única solución. Encontraremos por comparación con una ecuación conocida, las soluciones a las ecuaciones (4.109) y (4.110). Primero reescribimos estas ecuaciones como sigue

$$(E + \omega n) a_n^\pm = -T(1 \mp T_s) [a_{n-1}^\pm + a_{n+1}^\pm], \quad (4.111)$$

para notar su similitud con la relación de recurrencia para las funciones Bessel siguiente (Abramowitz y Stegun, 1970)

$$\left(2\nu \frac{}{x} \right) Z_\nu(x) = [Z_{\nu+1}(x) + Z_{\nu-1}(x)], \quad (4.112)$$

donde ν es un entero, Z_ν es una combinación lineal de una función Bessel y una Newman de orden ν , y x el argumento de dichas funciones. Para identificar términos escribimos la ecuación (4.111) de la siguiente manera

$$\frac{-2 \left[\frac{E}{T(1 \mp T_s)} \left(\frac{T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) + n \right]}{2 \left(\frac{T(1 \mp T_s)}{\omega} \right)} a_n^\pm = [a_{n-1}^\pm + a_{n+1}^\pm]. \quad (4.113)$$

Como de la ecuación (4.112) ν es entero, entonces la expresión

$$-2 \left[\frac{E}{T(1 \mp T_s)} \left(\frac{T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) + n \right] \quad (4.114)$$

es un entero, y, por lo tanto, las eigenenergías son

$$E^\pm = -q\omega. \quad (4.115)$$

Notemos que los eigenvalores de energía son idénticos para ambas componentes de espín $+$ y $-$. Los coeficientes tiene la siguiente forma general

$$a_{n,q}^\pm \propto A_n^\pm J_{-n-q} \left(\frac{2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) + B_n^\pm Y_{-n-q} \left(\frac{2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right), \quad (4.116)$$

donde J es una función Bessel, y Y una función Newman. Primero verificamos la normalizando de las funciones a_n^\pm , es decir que sean cuadrado integrables

$$\sum_n |a_n^\pm|^2 < \infty \Rightarrow B_n^\pm = 0 \quad \forall n, \quad (4.117)$$

de esta manera el conjunto completo de soluciones para algún eigenvalor es

$$a_q^\pm = \sum_n J_{-n-q} \left(\frac{2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right). \quad (4.118)$$

Con los resultados anteriores, la función de onda dependiente del tiempo se puede escribir como

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = \sum_q \left\{ C_q^+ \exp(iq\omega t) \sum_n J_{-n-q} \left(\frac{2T(1-T_s)}{\omega} \right) |n, +\rangle \right. \\ \left. + C_q^- \exp(iq\omega t) \sum_n J_{-n-q} \left(\frac{2T(1+T_s)}{\omega} \right) |n, -\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (4.119)$$

intercambiamos sumatorias y llegamos a

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle = \sum_n \left\{ \sum_q C_q^+ \exp(iq\omega t) J_{-n-q} \left(\frac{2T(1-T_s)}{\omega} \right) |n, +\rangle \right. \\ \left. + \sum_q C_q^- \exp(iq\omega t) J_{-n-q} \left(\frac{2T(1+T_s)}{\omega} \right) |n, -\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (4.120)$$

comparando la ecuación anterior (4.120) con la expresión general (4.61) obtenemos el coeficiente de la función de Wannier por sitio y espín,

$$a_n^\pm = \sum_q C_q^\pm \exp(iq\omega t) J_{-n-q} \left(\frac{2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right). \quad (4.121)$$

Con estos coeficientes y la la ecuación (4.61) tenemos la solución general, y para encontrar la solución particular es necesario evaluar la condición de inicial, se requiere que

$$a_n^\pm(t=0) = \sum_q C_q^\pm J_{-n-q} \left(\frac{2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) = \frac{\delta_{n,0}}{\sqrt{2}}, \quad (4.122)$$

multiplicamos esta Ec. (4.122) en ambos lados por $J_{n-m} \left(\frac{-2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right)$, sumamos sobre n y llegamos a que

$$C_m^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} J_m \left(\frac{-2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right), \quad (4.123)$$

y por tanto los coeficientes son:

$$a_n^\pm(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_q J_q \left(\frac{-2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) J_{n+q} \left(\frac{-2T(1 \mp T_s)}{\omega} \right) \exp(iq\omega t). \quad (4.124)$$

Como en la sección anterior, nos interesa una expresión cerrada –sin suma– para los coeficientes, es decir simplificar la Ec. (4.124). Para esto utilizamos el teorema de la suma de las funciones Bessel (Gradshteyn y Ryzhik, 1963):

Sean $r > 0, \rho > 0, \varphi > 0$ lados de un triángulo tal que $R = \sqrt{r^2 + \rho^2 - 2r\rho \cos \varphi}$, (véase Fig. 4.16) entonces:

- 1.- $0 < \Psi < \pi/2$, $e^{2i\Psi} = \frac{r - \rho e^{-i\varphi}}{r - \rho e^{i\varphi}}$.
- 2.- $e^{i\Psi} Z_n(mR) = \sum_{l=-\infty}^{\infty} J_l(m\rho) J_{l+n}(mr) e^{il\varphi}$.

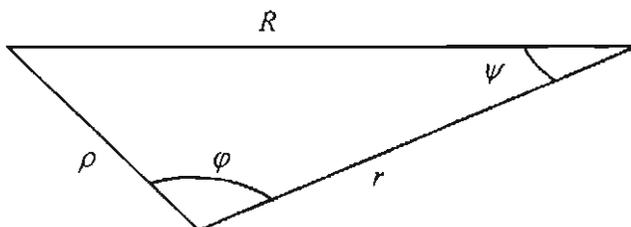


Figura 4.16 Esquema de las cantidades en el teorema de la suma de las funciones Bessel.

Si en el teorema precedente hacemos $m = -1$, $r = 2T(1 \mp T_s)/\omega$, $\rho = 2T(1 \mp T_s)/\omega$, y $\varphi = \omega t$, obtenemos que $R = 2 \frac{T(T \mp T_s)}{\omega} \sqrt{2 - 2 \cos \omega t}$, y con $e^{in\psi} = \left(\frac{1 - e^{-in\varphi}}{1 - e^{in\varphi}} \right)^{n/2}$, entonces la Ec. (4.124) para los coeficientes puede escribirse como

$$a_n^\pm(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1 - e^{-in\omega t}}{1 - e^{in\omega t}} \right)^{n/2} J_n \left(-2 \frac{T(1 \mp T_s)}{\omega} \sqrt{2 - 2 \cos \omega t} \right), \quad (4.125)$$

adicionalmente, utilizando las propiedades de las funciones trigonométricas reescribimos el argumento de la función de Bessel:

$$2 - 2 \cos \omega t = 2(1 - \cos \omega t) = 4(1/2 - 1/2 \cos 2\omega t/2) = 4 \sin^2 \left(\frac{\omega t}{2} \right), \quad (4.126)$$

y los coeficientes se vuelven

$$a_n^\pm(t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1 - e^{-in\omega t}}{1 - e^{in\omega t}} \right)^{n/2} J_n \left(-4 \frac{T(1 \mp T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right). \quad (4.127)$$

Para obtener los coeficientes en términos de la base de espín de σ_z (\uparrow, \downarrow) utilizamos las ecuaciones (4.83) y (4.84), y entonces los coeficientes en esta base de espín son

$$a_n^\uparrow = \frac{1}{2} \left(\frac{1 - e^{-in\omega t}}{1 - e^{in\omega t}} \right)^{n/2} \left[J_n \left(-4 \frac{T(1 - T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) + J_n \left(-4 \frac{T(1 + T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) \right], \quad (4.128)$$

$$a_n^\downarrow = \frac{e^{-i\theta}}{2} \left(\frac{1 - e^{-in\omega t}}{1 - e^{in\omega t}} \right)^{n/2} \left[J_n \left(-4 \frac{T(1 - T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) - J_n \left(-4 \frac{T(1 + T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) \right]. \quad (4.129)$$

Una vez que determinamos los coeficientes de las funciones de Wannier por sitio y espín (en la base conveniente) es posible calcular las propiedades del sistema. Para realizar esta tarea es importante notar que los coeficientes en las ecuaciones (4.128) y (4.129) tienen estructura similar a las correspondientes de la sección anterior (sumas y restas de funciones de Bessel con argumento diferentes) y por tanto se puede utilizar tanto el mismo procedimiento como las mismas identidades para obtener expresiones cerradas de las diferentes propiedades del sistema. Ésta es la razón por la cual sólo presentamos las expresiones resultantes de aquí en adelante.

La primera propiedad a estudiar es la probabilidad por sitio a partir de la cual se calculan todas le demás. En este caso esta propiedad toma la siguiente expresión

$$P_n^\uparrow(t) = \frac{1}{4} \left[J_n \left(-4 \frac{T(1-T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) \pm J_n \left(-4 \frac{T(1+T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right) \right]^2, \quad (4.130)$$

donde la presencia del campo eléctrico constante se manifiesta en el argumento de las funciones Bessel, haciéndolo periódico a través de la función seno. Esto hace periódicas a las probabilidades por sitio y espín, y por tanto a toda la dinámica también, efecto que se conoce como oscilaciones de Bloch.

Si se toma el argumento de las funciones de Bessel de la ecuación (4.130) y se hace el límite $\omega \rightarrow 0$, se obtiene

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \frac{4T(1 \pm T_s)}{\omega} \sin \left(\frac{\omega t}{2} \right) = 2T(1 \pm T_s)t, \quad (4.131)$$

que es el argumento que se obtuvo en la sección anterior (en ausencia de campo eléctrico). De esta manera se muestra que a partir de la expresión (4.130) es posible recuperar los resultados de la sección anterior sin campo eléctrico.

En figura 4.17 se muestra la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio centrado en cero; en ella se observa un comportamiento inicial parecido al del caso anterior (sin campo eléctrico), pero después éste se comporta como en *reversa* por la periodicidad del seno y la paridad de la función Bessel. Este comportamiento se repite de manera oscilatoria con frecuencia dada por $\omega/2$ que en unidades físicas sería del orden de $e\xi a/\hbar$, dentro del rango de los terahertz con parámetros de red de aproximadamente $a = 100 \text{ \AA}$. Es precisamente en este rango de frecuencias en el que Waschke *et al.* (Waschke *et al.*, 1993) midieron las oscilaciones de Bloch.

Este comportamiento oscilatorio se puede observar también en la distribución de probabilidad a lo largo de la red de sitios por espín y total. La figura 4.18 muestra la distribución de la probabilidad de encontrar al electrón con espín \uparrow (izquierda) y \downarrow (derecha). En estas gráficas se observan claramente las oscilaciones Bloch, mismas que confinan al electrón en una región finita de la red. La extensión de esta región es inversamente proporcional a la magnitud del campo.

Ya que la condición inicial es el electrón totalmente localizado en el sitio cero con espín \uparrow , y que el campo es relativamente alto $0.15 \text{ eV}(a/\hbar) \sim 5 \times 10^6 \text{ V/cm}$, el electrón (y por tanto el sistema) tiene prioritariamente espín \uparrow (véanse las escalas en las

gráficas de la figura 4.18). Esta afirmación la confirmaremos después con la magnetización.

Para caracterizar la difusión en el sistema obtenemos la dispersión cuadrática

$$\langle r^2(t) \rangle = 8 \frac{T^2(1+T_s^2)}{\omega^2} \text{sen}^2\left(\frac{\omega t}{2}\right), \quad (4.132)$$

vemos la dependencia temporal de esta expresión es sinusoidal cuadrada, por tanto a t pequeños el comportamiento es superdifusivo, y para tiempo mayores el comportamiento es periódico.

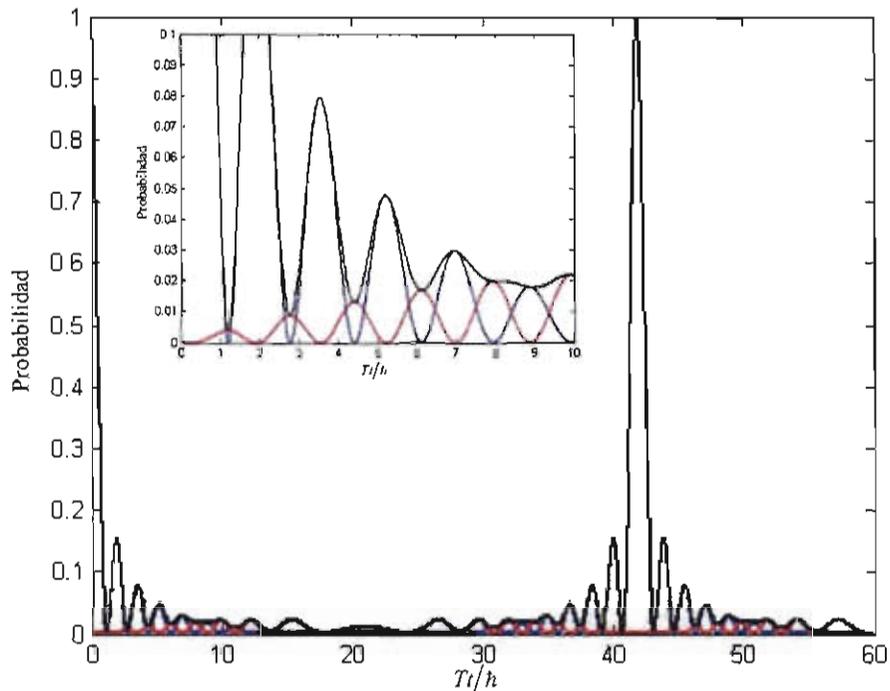


Figura 4.17. Evolución temporal de la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 0 como función de Tt/h (negro) y las probabilidades para cada componente de espín, arriba (azul) y abajo (rojo) como función de Tt/h , en presencia de un campo eléctrico constante ω . Donde T es la amplitud de tuneleo, t el tiempo, y hemos considerado la estructura formada por GaSb ($T_s = 0.05$) y un campo eléctrico de $\omega = 1.5 \times 10^5$ V/cm. Esquina superior izquierda: La misma gráfica para tiempos cortos.

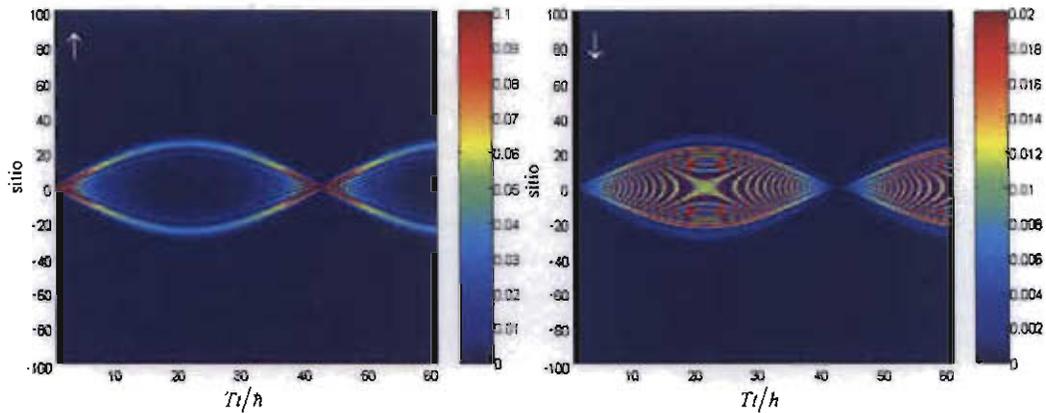


Figura 4.18 Probabilidad de encontrar al electrón por sitio con espín arriba (izquierda) y con espín abajo (derecha) como función de Tt/\hbar , en presencia de un campo eléctrico constante ω . Donde T es la amplitud de tunelco, t el tiempo, y hemos considerado la estructura formada por GaSb ($T_s = 0.05$) y un campo eléctrico de $\omega = 1.5 \times 10^5$ V/cm. El color indica la magnitud de la probabilidad de acuerdo con la escala mostrada a la derecha.

De la misma manera la expresión de la dispersión cuadrática por espín tiene un comportamiento oscilatorio, sin embargo aquí aparece también un término que modula las oscilaciones

$$\langle r_{\uparrow\downarrow}^2(t) \rangle = \frac{4T^2(1+T_s^2)}{\omega^2} \text{sen}^2\left(\frac{\omega t}{2}\right) \pm \frac{1}{2} \sum_n M_n n^2 \quad (4.133)$$

La figura 4.19 muestra la dispersión cuadrática por espín y total para este caso, el comportamiento oscilatorio está presente en las tres curvas.

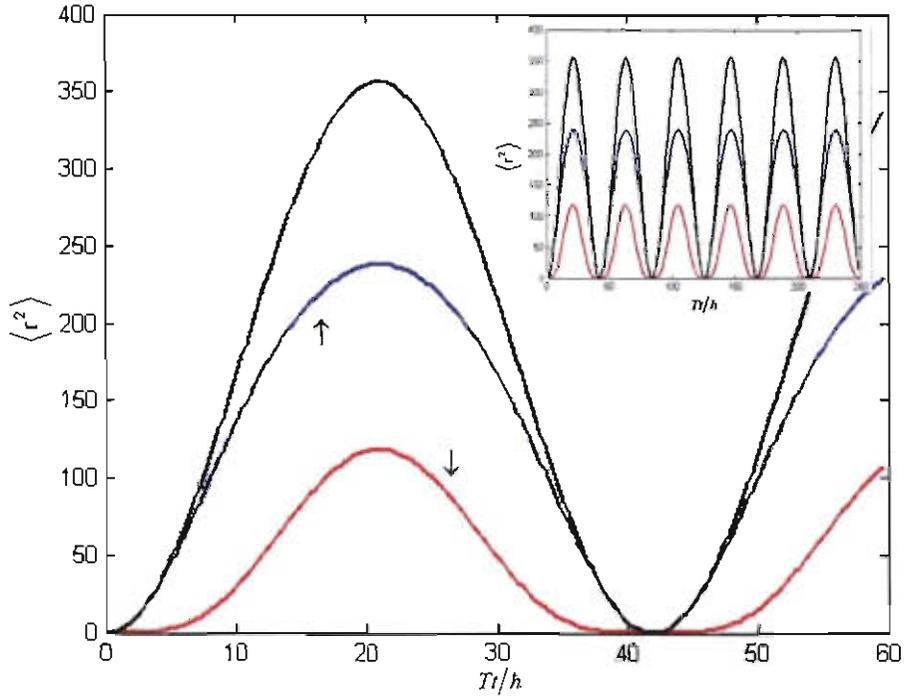


Figura 4.19 Dispersión cuadrática media total (negro) y dispersiones cuadráticas por componentes de espín \uparrow (azul) y \downarrow (rojo) como función de Tt/h , en presencia de un campo eléctrico constante ω (valores como en 4.10). Esquina superior derecha: La misma gráfica para tiempos largos.

Para estudiar la dinámica de espín en el sistema utilizamos la magnetización por sitio

$$M_n(t) = J_n \left[-4 \frac{T(1-T_s)}{\omega} \text{sen} \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right] J_n \left[-4 \frac{T(1+T_s)}{\omega} \text{sen} \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right] \quad (4.134)$$

y la magnetización total

$$M(t) = \sum_n M_n(t) = J_0 \left[8 \frac{TT_s}{\omega} \text{sen} \left(\frac{\omega t}{2} \right) \right] \quad (4.135)$$

La figura 4.20 muestra la distribución de la magnetización a lo largo de la red de sitios. En ella se observa como domina la magnetización positiva (\uparrow) y las oscilaciones de Bloch.

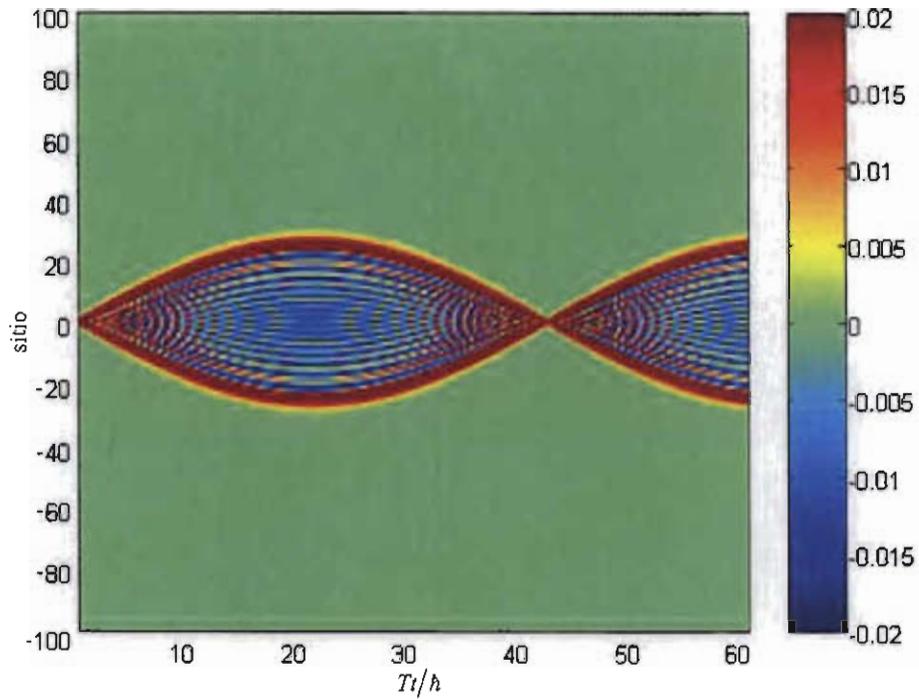


Figura 4.20 Evolución temporal de la magnetización por sitio en presencia de un campo eléctrico constante ω (valores como en 4.10). El color de cada punto representa el valor de la magnetización en cada sitio a un tiempo dado.

En la figura 4.21 se muestra la gráfica de la magnetización total como función de Tt/\hbar . Inicialmente es 1 –cuando el electrón esta localizado en el sitio cero con espín \uparrow – y luego disminuye y se vuelve negativa para luego a ser otra vez 1, y repetir este comportamiento de manera oscilatoria.

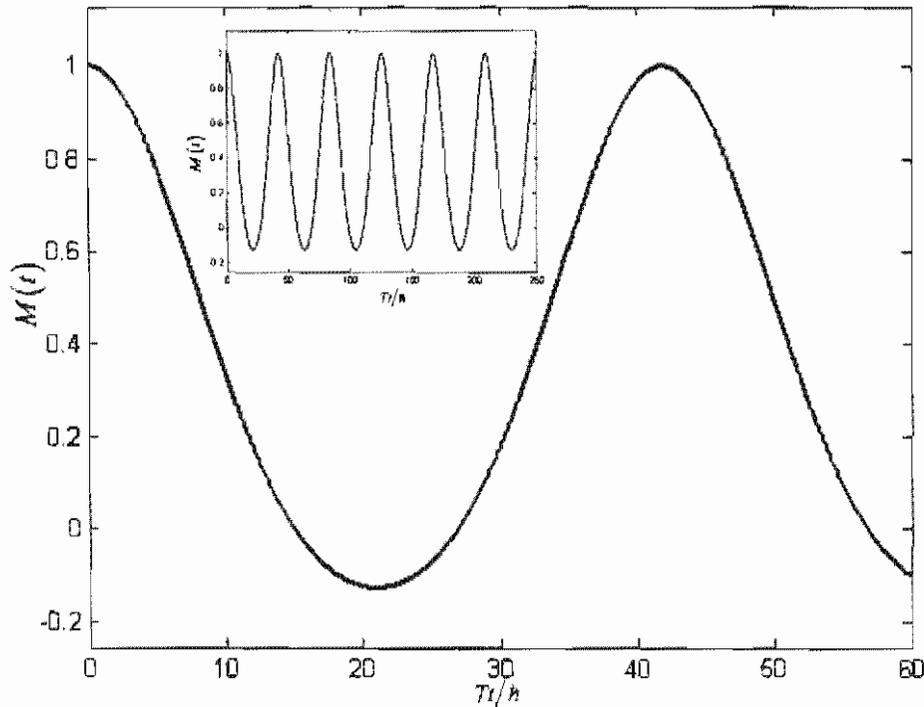


Figura 4.2) Gráfica de la evolución temporal de la magnetización por sitio en presencia de un campo eléctrico constante ω (valores como en 4.10). Esquina superior derecha: La misma gráfica para tiempos largos

4.5 Solución caso dependiente del tiempo

Si en el hamiltoniano de la ecuación (4.60) f es una función del tiempo, es necesario resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Para esto seguiremos un procedimiento esencialmente diferente al de los dos casos anteriores. En vez de resolver la ecuación diferencial de Schrödinger encontrando una solución, construiremos el operador de evolución temporal $U(t)$ y lo aplicaremos a la condición inicial. El operador de evolución temporal lo obtendremos a través del teorema de Wei-Norman que revisamos en la sección 2.5 de esta tesis.

Partimos de definir los siguientes operadores

$$\hat{N} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n(|n, +\rangle\langle n, +| + |n, -\rangle\langle n, -|), \quad (4.136)$$

$$\hat{K} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{(1-T_s)|n-1, +\rangle\langle n, +| + (1+T_s)|n-1, -\rangle\langle n, -|\}, \quad (4.137)$$

$$\hat{K}^\dagger = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{(1-T_s)|n+1, +\rangle\langle n, +| + (1+T_s)|n+1, -\rangle\langle n, -|\}. \quad (4.138)$$

Estos operadores forman un conjunto que será la base generadora del álgebra de Lie.

$$\mathcal{L} = \{\hat{N}, \hat{K}, \hat{K}^\dagger\} \quad (4.139)$$

Utilizando la definición ordinaria de la operación conmutador

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}, \quad \hat{A}, \hat{B} \in \mathcal{L}, \quad (4.140)$$

es fácil ver que los operadores definidos en las ecuaciones (4.136), (4.137) y (4.138) con sus combinaciones lineales y dicha operación forman una álgebra de Lie, ya que el conmutador es una operación cerrada en \mathcal{L} ,

$$[\hat{N}, \hat{K}] = -\hat{K}, \quad [\hat{N}, \hat{K}^\dagger] = \hat{K}^\dagger, \quad [\hat{K}, \hat{K}^\dagger] = 0, \quad (4.141)$$

y además cumplen con las siguientes propiedades de las álgebras de Lie: Sean $\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z} \in \mathcal{L}$ se cumple

$$\text{a) Simetría de inversión } [\hat{X}, \hat{X}] = 0, \text{ y} \quad (4.142)$$

$$\text{b) La identidad de Jacobi } [\hat{X}, [\hat{Y}, \hat{Z}]] + [\hat{Y}, [\hat{Z}, \hat{X}]] + [\hat{Z}, [\hat{X}, \hat{Y}]] = 0. \quad (4.143)$$

Adicionalmente el álgebra \mathcal{L} es soluble. Se dice que un álgebra \mathfrak{A} es soluble cuando existe un $q \in \mathbb{N}$ finito tal que la q -ésima álgebra derivada de \mathfrak{A} es el conjunto vacío. El álgebra derivada de \mathcal{L} es $\mathcal{L}' = \{\hat{K}, \hat{K}^\dagger\}$ y la derivada de esta última es $\mathcal{L}'' = \{\emptyset\}$.

Podemos escribir el hamiltoniano de Ec. en términos de los operadores elementos del álgebra de Lie de la siguiente manera

$$\hat{H} = \sum_{n,l} \left\{ -T\hat{K} - T\hat{K}^\dagger - f(t)\hat{N} \right\}, \quad (4.144)$$

Utilizando el teorema de Wei-Norman, el cual establece que si se tiene un hamiltoniano \hat{H} el cual se puede escribir como una combinación lineal de los elementos de algún álgebra de Lie soluble de dimensión finita q , con q menor que la dimensión r del espacio en el actúa \hat{H} , entonces el operador de evolución temporal se expresa como el producto de exponenciales de los elementos del álgebra de Lie multiplicados por funciones escalares del tiempo. Así la ecuación de Schrödinger

$$\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t) \hat{U}(t), \quad (4.145)$$

con

$$\hat{U}(t=0) = \hat{I}, \quad (4.146)$$

tiene solución

$$\hat{U}(t) = \exp[g_1(t)\mathbf{N}] \exp[g_2(t)\mathbf{K}] \exp[g_3(t)\mathbf{K}^t], \quad (4.147)$$

con $g_n(t)$ funciones escalares que sólo dependen del álgebra de Lie y de los coeficientes que acompañan a los elementos de ésta en el hamiltoniano. Evidentemente \hat{U} cumple con la condición inicial expresada en la Ec.(4.146) si $g_i(t=0) = 0 \forall i$.

Ahora bien, el hamiltoniano de la Ec. (4.144) está escrito en la forma

$$\hat{H}(t) = \sum_{i=1}^n a_i(t) \hat{H}_i, \quad (4.148)$$

derivando la expresión en la Ec.(4.147) obtenemos

$$\frac{\partial \hat{U}(t)}{\partial t} = \sum_{i=1}^n \dot{g}_i(t) \left[\prod_{j=1}^{i-1} \exp(g_j(t) \hat{H}_j) \right] \times \hat{H}_i \left[\prod_{j=i}^n \exp(g_j(t) \hat{H}_j) \right], \quad (4.149)$$

si sustituimos las ecuaciones anteriores (4.148) y (4.149) en la Ec. (4.145) llegamos a que

$$\sum_{i=1}^n \dot{g}_i(t) \left[\prod_{j=1}^{i-1} \exp(g_j(t) \hat{H}_j) \right] \times \hat{H}_i \left[\prod_{j=i}^n \exp(g_j(t) \hat{H}_j) \right] = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n a_i(t) \hat{H}_i \cdot U(t), \quad (4.150)$$

ahora multiplicamos esta ecuación por la izquierda en ambos lados por el operador inverso $U^{-1}(t)$, con lo que resulta,

$$\sum_{i=1}^n \dot{g}_i(t) \left[\prod_{j=1}^{i-1} \exp(g_j(t) \hat{H}_j) \right] \times \hat{H}_i \left[\prod_{j=i}^n \exp(-g_j(t) \hat{H}_j) \right] = -\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n a_i(t) \hat{H}_i. \quad (4.151)$$

En esta última expresión utilizamos la fórmula de Baker-Hausdorff-Campbell

$$e^{\mathbf{X}} \mathbf{Y} e^{-\mathbf{X}} = (e^{ad_{\mathbf{X}}}) \mathbf{Y}, \quad \text{con } (ad_{\mathbf{X}}) \mathbf{Y} = [\mathbf{X}, \mathbf{Y}] \quad (4.152)$$

y llegamos a

$$-\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^n a_i(t) \hat{H}_i = \sum_{i=1}^n \dot{g}_i(t) \left[\prod_{j=1}^{i-1} \exp\{g_j(t) ad_{\hat{H}_j}\} \right] \hat{H}_i; \quad (4.153)$$

en ella sustituimos los elementos de \mathbf{H} , y desarrollamos la suma y el producto obteniendo

$$-\frac{i}{\hbar}[-TK - TK^\dagger - f(t)N] = \dot{g}_1(t)N + \dot{g}_2(t)\exp\{g_1(t)adN\}K + \dot{g}_3(t)\exp\{g_1(t)adN\}\exp\{g_2(t)adK\}K^\dagger. \quad (4.154)$$

En esta última ecuación es necesario desarrollar los términos de la derecha; para esto notamos que

$$\exp\{g_2(t)adK\}K^\dagger = K^\dagger + g_2(t)[K, K^\dagger] + (g_2(t))^2[K, [K, K^\dagger]]/2! + (g_2(t))^3[K, [K, [K, K^\dagger]]]/3! + \dots = K^\dagger, \text{ pues } [K, K^\dagger] = 0,$$

y que el término resultante

$$\begin{aligned} \exp\{g_1(t)adN\}K^\dagger &= K^\dagger + g_1(t)[N, K^\dagger] + (g_1(t))^2[N, [N, K^\dagger]]/2! \\ &\quad + (g_1(t))^3[N, [N, [N, K^\dagger]]]/3! + \dots = K^\dagger + g_1(t)K^\dagger + \frac{1}{2!}(g_1(t))^2K^\dagger + \dots \\ &= \left(1 + g_1(t) + \frac{1}{2!}g_1(t)^2 + \frac{1}{3!}g_1(t)^3 + \dots\right)K^\dagger = \exp[g_1(t)]K^\dagger, \end{aligned}$$

análogamente $\exp\{g_1(t)adN\}K = \exp[-g_1(t)]K$,

y en virtud de estos tres resultados, la Ec. (4.154) se escribe como

$$-\frac{i}{\hbar}[-TK - TK^\dagger - f(t)N] = \dot{g}_1(t)N + \dot{g}_2(t)\exp\{-g_1(t)\}K + \dot{g}_3(t)\exp\{g_1(t)\}K^\dagger. \quad (4.155)$$

Por independencia lineal en tres los elementos de \mathcal{L} , sabemos que

$$g_1(t) = \frac{i}{\hbar} \int_0^t f(t') dt', \quad (4.156)$$

$$g_2(t) = \frac{i}{\hbar} T \int_0^t \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right] dt', \quad (4.157)$$

$$g_3(t) = \frac{i}{\hbar} T \int_0^t \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right] dt'; \quad (4.158)$$

entonces el operador de evolución temporal resulta ser

$$\begin{aligned} U(t) &= \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t f(t') dt' N\right] \\ &\quad \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} T \int_0^t \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right] dt' K\right] \\ &\quad \cdot \exp\left[\frac{i}{\hbar} T \int_0^t \exp\left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right] dt' K^\dagger\right]. \end{aligned} \quad (4.159)$$

A esta forma del operador de la ecuación (4.159) se le conoce como producto de Wei-Norman. Como en los casos anteriores, nos interesa encontrar la función de onda por sitio para una partícula inicialmente localizada en el sitio cero, y para esto es necesario aplicar el operador de evolución temporal a la condición inicial. Escribiremos este operador explícitamente en la base de sitio. Para esto definimos las funciones

$$\eta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t f(t') dt', \quad (4.160)$$

$$\chi(t) = \frac{T}{\hbar} \int_0^t \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt'' \right] dt', \text{ y} \quad (4.161)$$

$$\chi^*(t) = \frac{T}{\hbar} \int_0^t \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt'' \right] dt'; \quad (4.162)$$

y los operadores

$$\hat{\mathbf{K}}_1 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{|n-1, +\rangle \langle n, +|\}, \text{ y} \quad (4.163)$$

$$\hat{\mathbf{K}}_2 = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \{|n-1, -\rangle \langle n, -|\}; \quad (4.164)$$

tal que

$$\hat{\mathbf{K}} = (1-T_s)\hat{\mathbf{K}}_1 + (1+T_s)\hat{\mathbf{K}}_2, \text{ y} \quad (4.165)$$

$$\hat{\mathbf{K}}^\dagger = (1-T_s)\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger + (1+T_s)\hat{\mathbf{K}}_2^\dagger. \quad (4.166)$$

Entonces el operador de evolución temporal en la Ec. (4.159) es

$$\begin{aligned} \mathbf{U}(t) = & \exp[i\eta(t)\mathbf{N}] \exp[i\chi(t)(1-T_s)\hat{\mathbf{K}}_1 + i\chi(t)(1+T_s)\hat{\mathbf{K}}_2] \\ & \cdot \exp[i\chi^*(t)(1-T_s)\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger + i\chi^*(t)(1+T_s)\hat{\mathbf{K}}_2^\dagger]. \end{aligned} \quad (4.167)$$

Es fácil mostrar a partir de las expresiones en (4.141) que

$$\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger \hat{\mathbf{K}}_1 = \mathbf{I}_1, \quad \hat{\mathbf{K}}_2^\dagger \hat{\mathbf{K}}_2 = \mathbf{I}_2, \text{ y que} \quad (4.168)$$

$$[\hat{\mathbf{K}}_1, \hat{\mathbf{K}}_2] = [\hat{\mathbf{K}}_1, \hat{\mathbf{K}}_1^\dagger] = [\hat{\mathbf{K}}_1, \hat{\mathbf{K}}_2^\dagger] = [\hat{\mathbf{K}}_2, \hat{\mathbf{K}}_2^\dagger] = [\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger, \hat{\mathbf{K}}_2^\dagger] = [\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger, \hat{\mathbf{K}}_2] = \mathbf{0}. \quad (4.169)$$

Podemos escribir entonces

$$\chi(t) = |\chi(t)| e^{-i\alpha t}, \quad (4.170)$$

$$\chi^*(t) = |\chi(t)| e^{+i\alpha t} \quad (4.171)$$

con lo que el operador de evolución temporal queda determinado de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} U(t) = & \exp[i\eta(t)\mathbf{N}] \exp\left\{-(1-T_s)|\chi(t)\left[e^{-i\alpha, -i\pi/2}\hat{\mathbf{K}}_1 - e^{i\alpha, +i\pi/2}\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger\right]\right\} \\ & \cdot \exp\left\{-(1+T_s)|\chi(t)\left[e^{-i\alpha, -i\pi/2}\hat{\mathbf{K}}_2 - e^{i\alpha, +i\pi/2}\hat{\mathbf{K}}_2^\dagger\right]\right\}. \end{aligned} \quad (4.172)$$

Definimos los operadores

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{B}}_1 &= e^{-i(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_1, \Rightarrow \hat{\mathbf{B}}_1^{-1} = e^{i(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_1^\dagger, \\ \hat{\mathbf{B}}_2 &= e^{-i(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_2, \Rightarrow \hat{\mathbf{B}}_2^{-1} = e^{i(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_2^\dagger, \end{aligned} \quad (4.173)$$

con ellos podemos reescribir el operador de evolución temporal como

$$\begin{aligned} U(t) = & \exp[i\eta(t)\hat{\mathbf{N}}] \\ & \cdot \exp\left\{-(1-T_s)|\chi(t)\left[\hat{\mathbf{B}}_1 - \hat{\mathbf{B}}_1^{-1}\right]\right\} \\ & \cdot \exp\left\{-(1+T_s)|\chi(t)\left[\hat{\mathbf{B}}_2 - \hat{\mathbf{B}}_2^{-1}\right]\right\}, \end{aligned} \quad (4.174)$$

y utilizando la función generadora de la funciones Bessel

$$e^{\nu(\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}^{-1})} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(2\nu)\hat{\mathbf{B}}^n, \quad (4.175)$$

llegamos a la siguiente expresión para el operador de evolución temporal

$$\begin{aligned} U(t) = & \exp[i\eta(t)\hat{\mathbf{N}}] \\ & \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(-2(1-T_s)|\chi(t))e^{-in(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_1^n \\ & \cdot \sum_{m=-\infty}^{\infty} J_m(-2(1+T_s)|\chi(t))e^{-im(\alpha, +\pi/2)}\hat{\mathbf{K}}_2^m, \end{aligned} \quad (4.176)$$

ahora desarrollamos los operadores para encontrar una forma cerrada de este operador

$$\begin{aligned} U(t) = & \sum_{m,l=-\infty}^{\infty} e^{-im(\alpha, +\pi/2)}e^{i\eta(t)|l-m|} \left[J_m(-2(1-T_s)|\chi(t))|l-m, 1\rangle\langle l, 1| \right. \\ & \left. + J_m(-2(1+T_s)|\chi(t))|l-m, 2\rangle\langle l, 2| \right]. \end{aligned} \quad (4.177)$$

Sabemos que la condición inicial $\Psi(t=0) = |n, \uparrow\rangle$ se traduce para la base $\{+, -\}$

en

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}|0, +\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|0, -\rangle, \quad (4.178)$$

entonces

$$U(t)\Psi(t) = \sum \varphi^+ |r, +\rangle + \varphi^- |r, -\rangle. \quad (4.179)$$

El objetivo es obtener los coeficientes φ_r^+ y φ_r^- , para esto sustituimos las expresiones y hacemos uso de la independencia lineal de los estados de Wannier por espín, obteniendo la expresión

$$\begin{aligned} U(t)|\Psi(t)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\alpha_r + \pi/2)} e^{i(m(t)n)} \left[\frac{1}{\sqrt{2}} J_{-m}(-2(1-T_s)|\chi(t)|) |m, +\rangle \right. \\ \left. + \frac{1}{\sqrt{2}} J_{-m}(-2(1+T_s)|\chi(t)|) |m, -\rangle \right], \end{aligned} \quad (4.180)$$

por lo tanto

$$a_n^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{in(\alpha_r + \pi/2)} e^{i(m(t)n)} J_n(2(1-T_s)|\chi(t)|), \quad y \quad (4.181)$$

$$a_n^- = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{in(\alpha_r + \pi/2)} e^{i(m(t)n)} J_n(2(1+T_s)|\chi(t)|). \quad (4.182)$$

Sustituyendo estos coeficientes en las expresiones de ecuaciones (4.83) y (4.84), obtenemos los coeficientes de los estados de Wannier en la base de espín de σ_z $\{\uparrow, \downarrow\}$

$$a_n^\uparrow = \frac{1}{2} e^{in(\alpha_r + \pi/2)} e^{i(m(t)n)} \left[J_n(2(1-T_s)|\chi(t)|) + J_n(2(1+T_s)|\chi(t)|) \right], \quad (4.183)$$

$$a_n^\downarrow = \frac{1}{2} e^{-i\phi} e^{in(\alpha_r + \pi/2)} e^{i(m(t)n)} \left[J_n(2(1-T_s)|\chi(t)|) - J_n(2(1+T_s)|\chi(t)|) \right]. \quad (4.184)$$

Notemos que la solución tiene una estructura análoga a la de las soluciones anteriores, por lo tanto, las propiedades del sistema en este caso tienen la misma estructura. En el orden usual, la probabilidad por sitio está dada por

$$P_n^\uparrow(t) = \frac{1}{4} \left(J_n[2(1-T_s)|\chi(t)|] \pm J_n[2(1+T_s)|\chi(t)|] \right)^2; \quad (4.185)$$

la dispersión cuadrática media por espín toma la siguiente expresión

$$\langle r^2(t) \rangle = 2(1+T_s^2)|\chi(t)|^2, \quad (4.186)$$

la dispersión cuadrática media por espín es

$$\langle r_\uparrow^2(t) \rangle = [1+T_s^2]|\chi(t)|^2 \pm \frac{1}{2} \sum_n M_n n^2; \quad (4.187)$$

con la M_n como la magnetización por sitio y dada por

$$M_n(t) = J_n[2(1-T_s)|\chi(t)|] J_n[2(1+T_s)|\chi(t)|], \quad (4.188)$$

y por último la magnetización total

$$M(t) = J_0[4T_s|\chi(t)|]. \quad (4.189)$$

Todas las propiedades anteriores dependen de la expresión $|\chi(t)|$ y ésta contiene toda la información sobre el campo eléctrico. Notemos que es posible expresarla de la siguiente manera

$$|\chi(t)| = \sqrt{(\operatorname{Re}\{\chi(t)\})^2 + (\operatorname{Im}\{\chi(t)\})^2}, \quad (4.190)$$

entonces

$$|\chi(t)| = T/\hbar \sqrt{u^2 + v^2}, \quad (4.191)$$

donde

$$u = \int_0^t \operatorname{sen}\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right) dt', \quad (4.192)$$

$$v = \int_0^t \cos\left(\frac{1}{\hbar} \int_0^{t'} f(t'') dt''\right) dt' \quad (4.193)$$

Cuando $f(t) = 0$ ó $f(t) = \omega$ recuperamos los resultados de las secciones anteriores. Para estudiar el comportamiento bajo campos eléctricos dependientes del tiempo, consideramos una dependencia cosenoidal en f , explícitamente

$$f(t) = \omega \cos \Omega t, \quad (4.194)$$

con ω y Ω constantes.

En este caso específico u y v de ecuaciones (4.192) y (4.193) se convierten en

$$u = \int_0^t \operatorname{sen}\left(\frac{\omega}{\Omega \hbar} \operatorname{sen}(\Omega t')\right) dt', \quad (4.195)$$

$$v = \int_0^t \cos\left(\frac{\omega}{\Omega \hbar} \operatorname{sen}(\Omega t')\right) dt'. \quad (4.196)$$

En virtud de las representaciones integrales de la función Bessel (Abramowitz y Stegun, 1970) las ecuaciones (4.195) y (4.196) anteriores pueden simplificarse para tiempos considerablemente largos $t \gg 2\pi/\Omega$ para dar (Grifoni y Hänggi, 1998)

$$|\chi(t)|_{t \gg 2\pi/\Omega} = T J_0(\omega/\Omega). \quad (4.197)$$

Entonces cuando la razón ω/Ω sea una igual a una de las raíces de la función Bessel de orden cero la localización de la partícula será drástica, pues la dispersión cuadrática media quedaría

$$r(t) = 2T^2 (1 + T_s^2) J_0^2(\omega/\Omega), \quad (4.198)$$

éste es el fenómeno de localización dinámica. A consecuencia de la localización dinámica la magnetización para tiempo largos es idénticamente 1, como en la condición inicial.

En el análisis de este caso para tiempo cortos ($t < 2\pi/\Omega$), consideramos valores de frecuencia y magnitud del campo eléctrico externo tales que la razón ω/Ω esta muy cerca del valor del primer cero de la función Bessel, i.e. $\Omega = 2.4 \times 10^{14}$ Hz y $\omega = 1.5 \times 10^5$ V/cm. Si tomáramos un cero superior y conserváramos la magnitud del campo (ω), disminuiría la frecuencia (Ω).

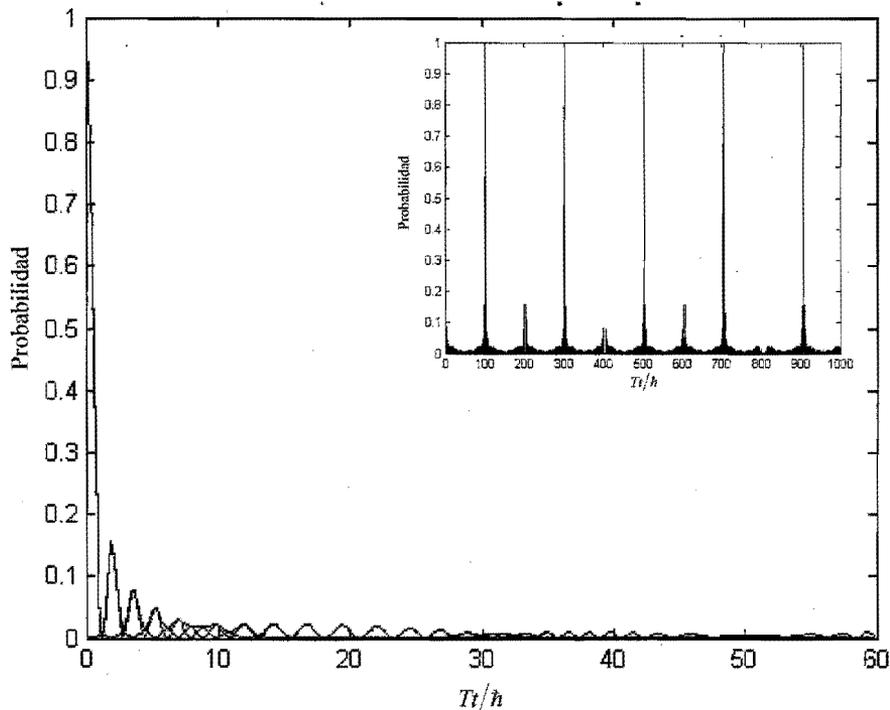


Figura 4.21 Evolución temporal de la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio 0 como función de Tt/\hbar (negro) y las probabilidades para cada componente de espín, arriba (azul) y abajo (rojo) como función de Tt/\hbar , en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $f(t) = \omega \cos \Omega t$. Donde T es la amplitud de tunelaje, t el tiempo, y hemos considerado la estructura formada por GaSb ($T_s = 0.05$), un campo eléctrico de $\omega = 1.5 \times 10^5$ V/cm y $\Omega = 2.4 \times 10^{14}$ Hz. Esquina superior derecha: La misma gráfica para tiempos largos

La primera propiedad que estudiamos es la probabilidad por sitio total y por espín, dadas de la ecuación (4.185) con el campo eléctrico externo dado por la Ec. (4.194). La gráfica 4.14 muestra la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio central cero por espín y total. En negro se muestra la probabilidad de encontrar al electrón en dicho sitio,

en rojo la probabilidad de encontrarlo con espín \downarrow y en azul de encontrarlo con espín \uparrow .

Para tiempos cortos ($0-60 T/\hbar$) esta gráfica se parece a la del caso libre (véase Figura 4.9), sin embargo para tiempos largos se observa una oscilación, en la parte superior derecha de la Figura 4.21 se muestra la evolución de la probabilidad de encontrar al electrón en el sitio cero para un intervalo de tiempo mayor, alrededor de cada $100 T/\hbar$ el sistema parece recuperar la configuración inicial: electrón totalmente localizado en el sitio cero.

En las gráficas de la siguiente figura (Figura 4.22) se puede apreciar la evolución de la función de onda del electrón a través de los sitios de la red; como en los casos de las secciones anteriores predomina el espín \uparrow , y existen regiones donde predomina cierto espín y viceversa.

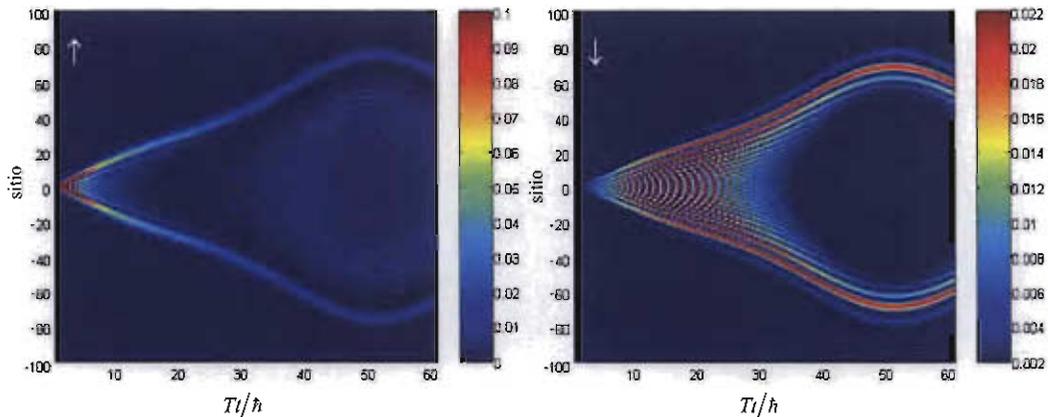


Figura 4.22. Probabilidad de encontrar al electrón por sitio con espín arriba (izquierda) y con espín abajo (derecha) como función de Tt/\hbar , en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $f(t) = \omega \cos \Omega t$. Donde T es la amplitud de tuneo, t el tiempo, y hemos considerado los valores igual que en Fig. 4.14. El color indica la magnitud de la probabilidad de acuerdo con la escala mostrada a la derecha.

La influencia de la variación en el campo externo es evidente en las gráficas de Figura 4.22, la forma en que se difunde la función de onda del electrón en el sistema difiere de la del caso con campo eléctrico constante. La forma en que la forma del campo eléctrico cambia la forma en que se difunde, y la plasticidad o capacidad de

control de sobre esta a través del campo externo es un aspecto muy interesante de estudiar de este sistema.

Las oscilaciones en el sistema son más evidentes en las dispersiones cuadráticas medias por espín y total, en la Figura 4.23 se muestran dichas dispersiones. Como en los casos anteriores las dispersiones por espín oscilan entre ellas siendo a ciertos intervalos de tiempo mayor la dispersión de una componente y a otros intervalos la otra. Las tres dispersiones oscilan y vuelven a cero después de un periodo. Este periodo es mayor que en el caso del campo constante por un poco más del doble. Una diferencia importante es que en este caso las dispersiones por espín son relativamente parecidas, a diferencia del caso anterior (de campo constante) donde la dispersión para el espín \uparrow es siempre mayor.

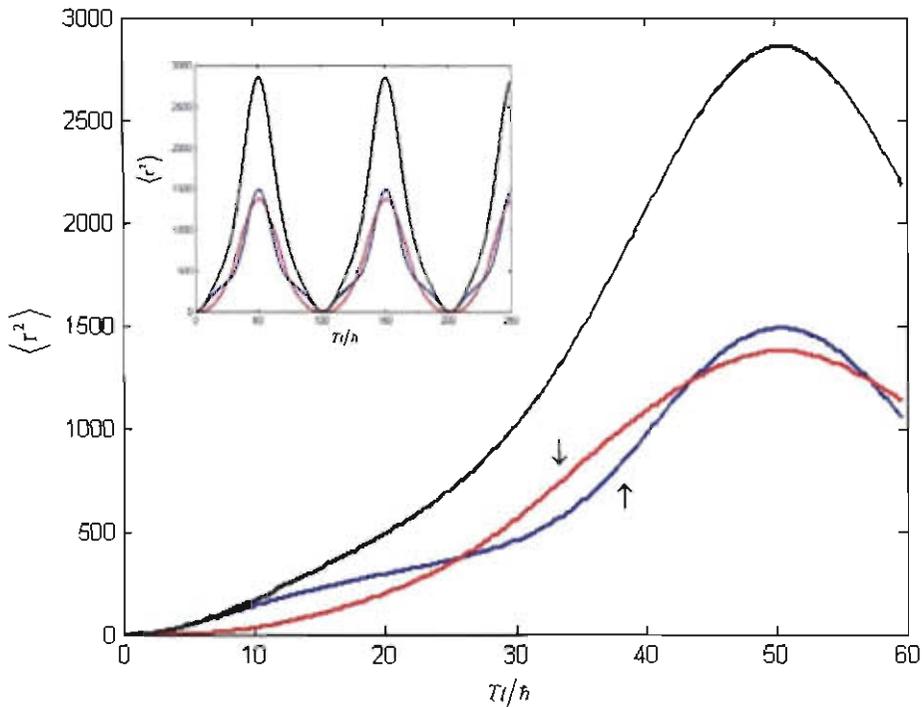


Figura 4.23. Gráfica de la dispersión cuadrática media total (negro) y dispersiones cuadráticas por componentes de espín \uparrow (azul) y \downarrow (rojo) como función de Tt/\hbar , en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $f(t) = \omega \cos \Omega t$. Donde T es la amplitud de tunelamiento, t el tiempo, y hemos considerado los valores igual que en Fig. 4.14. Esquina superior izquierda: La misma gráfica para tiempos largos

Si restamos las gráficas en la Figura 4.22: la de la izquierda menos la de la derecha, obtenemos la magnetización por sitio. En la Figura 4.24 se muestra la evolución temporal de la magnetización por sitio en el sistema, en ella se observa que predomina el espín \uparrow y corrobora la oscilación del sistema.

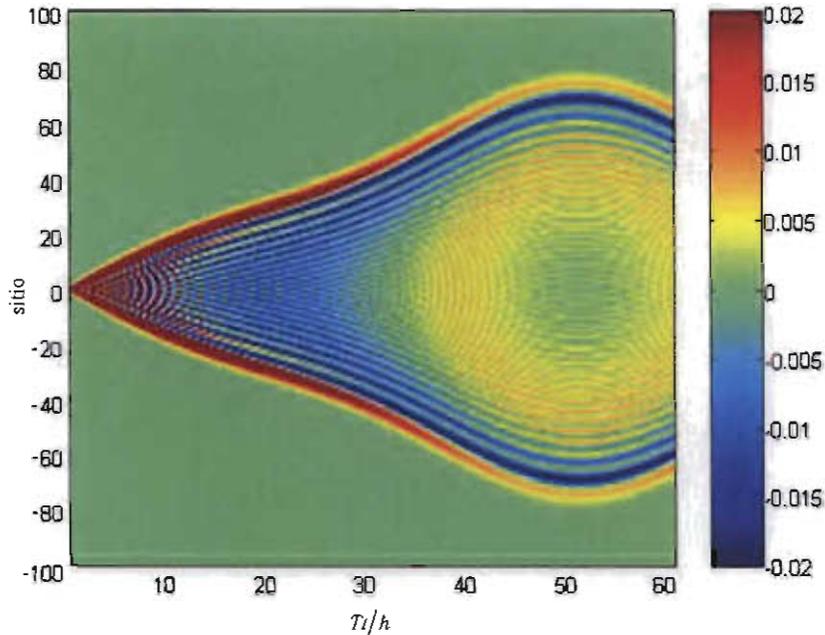


Figura 4.24. Evolución temporal de la magnetización por sitio en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $f(t) = \omega \cos \Omega t$. Donde T es la amplitud de tunelamiento y t el tiempo, y hemos considerado los valores igual que en Fig. 4.14.

La gráfica de Figura 4.26 muestra la evolución temporal de la magnetización total en el sistema. Esta propiedad comienza siendo máxima ($M=1$) para después disminuir hasta hacerse negativa, luego ir a un valor cercano a 0.3 y regresar en “reversa” a la configuración inicial, para repetir en forma de oscilación. En la esquina superior derecha de Figura 4.26 podemos ver la evolución de la magnetización total para un intervalo de tiempo más largo, en esta gráfica es evidente el comportamiento oscilatorio anteriormente descrito.

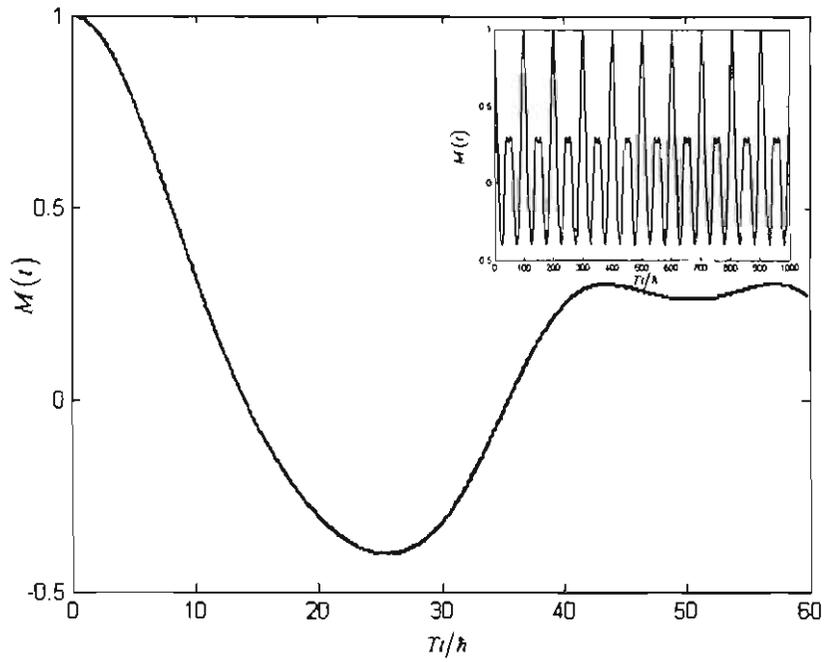


Figura 4.26. Magnetización total como función Tt/h en presencia de un campo eléctrico dependiente del tiempo $f(t) = \omega \cos \Omega t$. Donde T es la amplitud de tunelaje, t el tiempo, y hemos considerado los valores igual que en Fig. 4.14. Esquina superior derecha: La misma gráfica para tiempos largos.

5. Conclusiones y trabajo futuro

En este trabajo de tesis hemos introducido el grado de libertad de espín en la dinámica electrónica en sistemas periódicos infinitos a través de considerar un sistema con interacción espín-órbita con los términos k^3 de Dresselhaus.

Se estudiaron dos sistemas físicos: el doble pozo y el cristal unidimensional, ambos con interacción espín-órbita. El sistema de doble pozo con interacción espín-órbita nos sirvió como base para el entendimiento de los términos que se generan en el hamiltoniano para el cristal unidimensional infinito con interacción espín-órbita, considerando la aproximación de amarre fuerte, en especial aquellos provenientes del hamiltoniano Dresselhaus en la aproximación de Perel'; adicionalmente, en este sistema se estudiaron los efectos físicos como las oscilaciones entre pozos y la polarización de la función de onda.

Resolvimos la ecuación de Schrödinger para la dinámica electrónica en un cristal unidimensional con interacción espín-órbita en presencia de campo eléctrico nulo, constante y dependiente del tiempo. La solución que se utilizó en cada caso, se basó en los resultados sin interacción espín-órbita. De particular importancia es el método para el caso de campo dependiente del tiempo: basado en álgebras de Lie. Los resultados reproducen los otros dos casos –campo constante y nulo, además de mostrar que el procedimiento se puede generalizar para incluir el grado de libertad de espín, abriendo la posibilidad de ser implementado incluso en sistemas donde la interacción espín-órbita depende del tiempo, como podría ser en un sistema con interacción espín-órbita tipo Rashba.

En cada caso de campo eléctrico se encontraron los coeficientes de las funciones de Wannier por sitio y espín y con ellos la función de onda del sistema para cuando el electrón inicialmente localizado en un sitio central, con esta solución se encontró la expresión de la función de onda para una condición inicial arbitraria.

La función de onda del sistema se estudió por medio de cantidades como la probabilidad por sitio, la probabilidad por sitio y espín, la magnetización por sitio y la magnetización total. Estas dos últimas propiedades provienen de la polarización.

Caracterizamos la difusión en el sistema para los diferentes campos eléctricos campos eléctricos con la dependencia temporal de la dispersión cuadrática. En el caso de campo eléctrico nulo, el sistema es superdifusivo: la función de onda del electrón rápidamente se encuentra distribuida en una gran cantidad de sitios y la magnetización

que inicialmente es máxima decae como función del tiempo como la función Bessel de orden cero.

En el caso de campo eléctrico constante el sistema se mantiene confinado en una región finita del espacio a causa de las oscilaciones de Bloch, que son visibles incluso por componente de espín. La magnetización también presenta una oscilación: retorna a ser máximo cada cierto período de tiempo, donde dicho período depende de la magnitud del campo eléctrico constante y la distancia entre los sitios, al igual que la frecuencia de las oscilaciones. La frecuencia de las oscilaciones no cambia con respecto al caso sin interacción espín-órbita, por lo tanto, aunque es posible medir las oscilaciones en superredes para la detección de las oscilaciones de Bloch por espín, es necesario un procedimiento diferente al reportado en la literatura.

En el caso con campo eléctrico dependiente del tiempo, la función de onda y las propiedades del sistema quedan en función de integrales en el tiempo de la expresión para el campo eléctrico. Si el campo eléctrico tiene dependencia cosenoidal a tiempos largos de evolución el sistema es superdifusivo excepto cuando la razón entre la magnitud y la frecuencia del campo es igual a un cero de la función Bessel de orden cero, en cuyo caso no hay difusión y se presenta el fenómeno de localización dinámica. Al considerar la interacción espín-órbita surge el interés por la polarización o magnetización. Al igual que en el caso de campo eléctrico constante, para un campo eléctrico con dependencia cosenoidal, la magnetización es una función periódica, por lo que después de un tiempo el electrón vuelve a encontrarse localizado en el sitio cero con espín \uparrow , sin embargo la forma en que se difunde la probabilidad en el sistema es distinta, y el estudio de la respuesta del sistema a una función cualquiera es un estudio que se podría realizar a futuro.

Adicionalmente al estudio con interacción espín-órbita, los resultados de este trabajo resumen y reproducen los resultados anteriores, además de proporcionar una conexión directa entre las magnitudes medidas en los experimentos y las utilizadas en los trabajos teóricos para explicar los fenómenos.

Algunos problemas interesantes que van más allá de los objetivos de esta tesis y que podrían considerarse trabajo a futuro son: el paso natural al sistema de dos y tres dimensiones; la reproducción de estos resultados en el caso de un sistema con interacción espín-órbita tipo Rashba, en el que esta interacción puede depender del tiempo a través de un campo eléctrico externo.

En el futuro se espera que se realice una gran cantidad de trabajo con tendencia a lograr una descripción más completa de los sistemas con grado de libertad de espín. Nuestro trabajo es una contribución para el entendimiento del comportamiento del espín en un sistema particular.

6. Referencias

- Abramowitz Milton e Irene Stegun . 1970. *Handbook of mathematical Functions*. National Bureau of Standards. Applied Mathematics Series-55.
- Awschalom D.D., D. Loss, N. Smarth (eds.). 2002. *Semiconductor spintronics and quantum computation*. Springer.
- Barnett S. J. 1917. *The magnetization of iron, nickel and cobalt by rotation and the nature of the magnetic molecule*. Phys. Rev. **10**, 7-21.
- Bulgadaev S.A.. 1984. *Phase diagram of a dissipative quantum system*. JETP Lett **39** 315.
- Dahan Maxime Ben, Ekkehard Peik, Jakob Reichel, Yvan Castin and Christophe Salomon. 1996. *Bloch oscillations of atoms in a optical potential*. Phys. Rev. Lett. **76**, 4508-4511.
- Datta, S. y B. Das. 1990. *Electronic analog of the electro-optic modulator*. Appl. Phys. Lett. **56**, 665.
- Davies John H.. 1998. *The physics of low-dimensional semiconductors*. Cambridge University Press, EE. UU. 438 pp.
- De la Peña Luis. 2006. *Introducción a la mecánica cuántica*. Ediciones Científicas Universitarias, UNAM – Fondo de Cultura Económica, Tercera edición, México, 515 pp.
- Dignam M. M., C. Martij de Sterke. 2002. *Conditions for dynamic localization in generalized ac electric fields*. Phys. Rev. Lett. **88**, 046806.
- Domachuk P, C. Martijn de Sterke, J Wan and M. M. Dignam. 2002. *Dynamic localization in continuous ac electric fields*. Phys. Rev. B **66**, 165313.
- Dresselhaus G.. 1955. *Spin-orbit coupling effect in zinc blende structures*. Phys. Rev. **100**, 580-585.
- Dunlap D.H. and V. M. Kenkre. 1986. *Dynamical localization of a charged particle moving under the influence of an electric field*. Phys. Rev. B **34**, 3625-3636.
- Dunlap D.H. and V. M. Kenkre. 1988. *Effect of scattering on the dynamic localization of a particle in a time-dependent electric field*. Phys. Rev. B **37**, 6622-6633.
- F. Bloch. 1928. Z. Phys. **52**
- Fukuyama Hidetoshi, Robert A. Bari, Hans C. Fogedby. 1973. *Tightly bound electrons in a uniform electric field*. Phys. Rev. B **8**, 5579-5586.
- Glazov M.M., P.S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov, V. M. Chistyakov, S. S. Tarasenko. 2005. *Spin-dependent resonant tunnelling in symmetrical double-barrier structures*, Phys. Rev. B **71**, 155313.
- Grifoni Milena, Peter Hänggi. 1998. *Driven quantum tunneling*. Phys. Rep. **304**, 229-354.
- Hanbicki A. T., B. T. Jonker, G. Hskos, G. Kioseoglou y A. Petrou. 2002. *Efficient electrical spin injection from a magnetic metal/tunnel barrier contact into a semiconductor*. Appl. Phys. Lett. **80**, 1240.

- Hartmann T., F. Keck, H. J. Korsch y S. Mossmann. 2004. *Dynamics of Bloch oscillations*. New Journal of Physics **6**, 2.
- Jackson, J. D. 1999. *Classical Electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., Tercera edición, New York, 808 pp.
- Katsanos D.E., S.N. Evangelou, and S.S. Xiong. 1995. *Quantum electron dynamics in periodic and aperiodic sequences*. Phys. Rev. B **51**, 895-904.
- Kirczenow G. 2001. *Ideal spin filters: A theoretical study of electron transmission through ordered and disordered interfaces between ferromagnetic metals and semiconductors*. Phys. Rev. B **63**, 054422.
- Korsh H. J., S. Mossmann. 2003. *An algebraic solution of driven single band tight binding dynamics*. Phys. Lett. A **317**, 54-63.
- Kosevich A. M. . 2001. *Bloch oscillations of magnetic solitons as an example of dynamical localization of quasiparticles in a uniform electric field*. Low Temp. Phys. **76**, 513-540.
- Magrill L. I. y A. V. Chaplik. 2005. *Spin-dependent electron localization in crystals*. JETP Letters **81**, 162-166.
- Méndez E. E., F. Agulló-Rueda, y J. M. Hong. 1988. *Stark localization in GaAs-GaAlAs superlattices under an electric field*. Phys. Rev. Lett. **60**, 2426-2439.
- Mireles F. y Kirczenow G. 2001. *Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*. Phys. Rev. B **64**, 024426.
- Moroz A. V. y Barnes C. H. W. 1999. *Ideal spin filters: A theoretical study of electron transmission through ordered and disordered interfaces between ferromagnetic metals and semiconductors*. Phys. Rev. B **60**, 14272-14285.
- Mossmann S., A. Schulze, D. Witthaut y H. Korsch. 2005. *Two-dimensional bloch oscillations: a lie-algebraic approach*. J. Phys. A: Math. Gen. **38**, 3381-3395.
- Mostnyi V. F., V. I. Safarov, J. De Boeck, J. Das, W. Van Roy, E. Goovaerts y G, Borghs. 2002. *Electrical spin injection in a ferromagnet/tunnel barrier/semiconductor Heterostructure*. Appl. Phys. Lett. **81**, 265.
- Nazareno N. N., C.A. da Silva and P.E. de Brito. 1994. *Dynamical localization in a one-dimensional crystal with an impurity under the action of an electric field*. Phys. Rev. B **50**, 4503-4508.
- Noba Ken-Ichi. 2003. *Dynamic localization of two electrons in a one-dimensional lattice system driven by an oscillating electric field*. Phys. Rev. B **67**, 153102.
- Pareek, T. P. y P. Bruno. 2002. *Spin coherence in a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction*. Phys. Rev. B **65**, 241305(R).
- Perel' V.I., S.A. Tarasenko, y I. N. Yassievich, S. D: Ganichev, V. V. Bel'kov y W. Prettl. 2003. *Spin-dependent tunnelling through a symmetric semiconductor barrier*. Phys. Rev. B **67**, 201304(R).
- Pertsch T., P. Dannberg, W. Elflein, A. Bräuer and F. Lederer. 1999. *Optical Bloch oscillations in Temperature Tuned Waveguide Arrays*. Phys. Rev. Lett. **83**, 23 4752-4755.
- Pronin Kirill A., André D. Bandrauk y Alexander A. Orchinnikov. 1994. *Electric-field-induced localization and non-perturbative response of a one-dimensional conductor*. J. Phys.: Condens. Matt. **6**, 4721-4726.

- Raghavan S., V. M. Kenkre and A. R. Bishop. 2000. *Dynamic localization in spin systems*. Phys. Rev. B **61**, 9 5864-5867.
- Rashba E. I. 2000. *Theory of electrical spin injection: Tunnel contacts as a solution of the conductivity mismatch problem*. Phys. Rev. B **62**, R16267–R16270.
- Romo Roberto y Sergio E. Ulloa. *Dynamic polarization tunnelling: a spin filtering mechanism*. Phys. Rev. B **72**, 121305.
- Sandu T., Athanasios C. y Rada I. 2006. *Spin tunnelling through an indirect barrier: Tight-binding calculations*. Phys. Rev. B **73**, 075613.
- Schmidt G., D. Ferrand, L. W. Molenkamp, A. T. Filip y J. Van Wees. 2000. *Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor*. Phys. Rev. B **62**, R4790–R4793.
- Shankar, R. 1994. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press, Segunda edición, New York, 676 pp.
- Stewart John Q. 1918. *The moment of momentum accompanying magnetic moment in iron and nickel*. Phys. Rev. **11**, 100-120.
- Tan S. G., M. B. A. Jalil, Thomas Liew, K. L. Teo, T. C. Chong. 2005. *Magneto-electronic device utilizing the Dresselhaus spin-orbit coupling*. J. Appl. Phys. **97**, 10D506.
- Tarasenko S. A., V. I. Perel', y I. N. Yassievich. 2004. *In-plane electronic current is induced by tunnelling of spin-polarized carriers*. Phys. Rev. Lett. **93**, 056601.
- Taylor, P. L. y O. Heinonen. 2002. *A quantum approach to condensed matter physics*. Cambridge University Press, New York, 414 pp.
- Voskoboynikov A., Shiue Shin Liu y C. P. Lee. 1998. *Spin-dependent electronic tunneling at zero magnetic field*. Phys. Rev. B **58**, 15397–15400.
- Voskoboynikov, O., C. P. Lee, O. Tretyak. 2001. *Spin-orbit splitting in semiconductor quantum dots with a parabolic confinement potential*. Phys. Rev. B **63**, 165306.
- Wan Li and Yong Guo. 2006. *Dresselhaus spin-orbit coupling effect on dwell time of electrons tunneling through double-barrier structures*. Phys. Rev. B **73**, 205311.
- Wang L. G., Wen Yang, y Kai Chang y K. S. Chan. 2005. *Spin-dependent tunnelling through a symmetric semiconductor barrier: The Dresselhaus effect*. Phys. Rev. B **72**, 153314.
- Wannier Gregory H.. 1962. *Dynamics of band electrons in electric and magnetic fields*. Rev. Mod. Phys. **4**, 645-656.
- Washke Christian, Hartmut G. Roskos, Ralf Schwedler, Karl Leo, y Heinrich Kurz, Klaus Köhler. 1993. *Coherent submillimeter-wave emission from Bloch oscillations in a semiconductor superlattice*. Phys. Rev. Lett. **70**, 3319-3322.
- Wei James y Edward Norman. 1963. *Lie algebraic solution of linear differential equations*. J. Math. Phys. **4**, 4, 575-580.
- Wei James y Edward Norman. 1964. *On the global representation of the solutions of linear differential equations as a product of exponentials*. Proc. Am. Math. Soc. **15**, 2, 327-334.
- Wilhelm Magnus. 1954. *On the exponential solution of differential equations for linear operator*. Comm. Pure Appl. Math. **7**, 4, 649-673.

- Witthaut D., F. Keck, H. J. Korsch, S. Mossmann. 2004. *Bloch oscillations in two dimensional lattices*. New Journal of Physics **6**, 41.
- Wolf F. Y H. J. Korsch. 1988. *Time-evolution operators for (coupled) time-dependent oscillators and Lie algebraic structure theory*. Phys. Rev. A **37**, 1934-1941.
- Wolf S. A., D. D. Awschlom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, y D. M. Treger. 2001. *Nanoscience look to the future*. Science **294**, 1448.
- Wolf S. , Y. Idzerda Hingham M.A. Kluwer. 2002. *Magnetic interactions and spin transport*. Academic/Plenum Publisher.
- Zhang Cun-Xi, Y.-H. Nie y J.-Q. Liang. 2006. *Photon-assisted electron transmission resonance through a quantum well with spin-orbit coupling*. Phys Rev. B **73**, 085307.
- Zhao Xian-Geng. 1994. *The suppression of a Bloch band in a driving laser field*. 2751-2756.
- Zhu H.J., M Ransteiner, H. Kostial, M. Wassermier, H. P. Schönheer, and K.H. Ploog. 2001. *Room-temperature spin injection from Fe into GaAs*. Phys. Rev. Lett. **87**, 016601.
- Zhu Mign Jun, Xian-Gieng Zhao and Qian Niu. 1999. *Manipulation of band electrons with a rectangular-wave electric field*. Condens. Matt. **11**, 4527-4538.
- Zutić Igor, Jaroslav Fabian, S. Das Sarma. 2004. *Spintronics: fundamentals and applications*. Rev. Mod. Phys. **76**, 323-410.