



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO**

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

**“ORIENTACIÓN DE ESPÍN POR UN CAMPO ELÉCTRICO
AC EN HETEROESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS CON
INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA”**

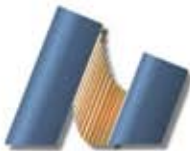
T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES

P R E S E N T A

FÍS. PRISCILLA ELIZABETH IGLESIAS VÁZQUEZ



Tutor: Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Ensenada B.C.

2010



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

Antes que nada quiero expresar mi más sincera y profunda gratitud a mi asesor y maestro Jesús Maytorena por su valiosa e invaluable ayuda para la realización de este proyecto. Sin su apoyo nada de esto hubiera sido posible.

Agradezco a los miembros de mi comité académico Dr. Ernesto Cota y Dr. Roberto Romo por su apoyo durante mis estudios de maestría.

A los miembros del jurado Dr. Armando Reyes, Dr. Francisco Mireles, Dr. Fernando Rojas y Dr. Claudio Valencia, les agradezco por el tiempo dedicado a esta tesis y las acertadas contribuciones hechas a la misma.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología y al proyecto Papiit IN113-807-3 (DGAPA-UNAM) por el apoyo económico brindado para la realización de este proyecto.

A todo el personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología muchas gracias por todas sus atenciones.

Agradezco infinitamente a mi familia por que siempre me han brindado todo el apoyo y el amor que me han impulsado para salir adelante. A todos mis amigos y compañeros de traila agradezco su incondicional amistad. De manera muy especial a Rubén por acompañarme en este recorrido.

Índice general

1. Introducción	1
2. Espintrónica	13
2.1. El Espín	13
2.2. Acoplamiento espín-órbita	15
2.3. Espintrónica	16
2.4. Interacción espín-órbita en semiconductores	18
2.5. Fenómenos espintrónicos	22
2.5.1. Magnetoresistencia gigante	22
2.5.2. Transistor de espín de efecto de campo	24
2.5.3. Efecto Hall de espín	25
2.5.4. Orientación de espín por campos eléctricos	26
2.6. Polarización de espín inducida por un campo eléctrico	26
3. Interacción espín-órbita en heteroestructuras semiconductoras	35
3.1. Semiconductores sin simetría de inversión espacial	36
3.2. Hamiltoniano de interacción espín-órbita	36
3.3. Acoplamiento espín-órbita de Rashba	39
3.4. Acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus	41
3.4.1. Hamiltoniano espín-órbita de Dresselhaus	41
3.4.2. Dresselhaus[001]	42
3.4.3. Dresselhaus[110]	43
3.5. Acoplamiento conjunto: Rashba+Dresselhaus[hkl]	45
3.5.1. Rashba+Dresselhaus[111]	45
3.5.2. Rashba+Dresselhaus[001]	45
3.5.3. Rashba+Dresselhaus[110]	47

3.6. Orientación del espín de los estados electrónicos	47
3.7. Densidad electrónica	51
3.8. Densidad de estados	54
3.9. Resumen de resultados	56
4. Teoría de respuesta lineal de un sistema cuántico a una perturbación externa	61
4.1. Matriz de densidad	62
4.2. Fórmula general de Kubo	63
4.3. Funciones respuesta	68
4.3.1. Polarizabilidad de espín	68
4.3.2. Susceptibilidad de espín	71
4.4. Resumen de resultados	75
5. Transiciones entre sub-bandas de espín: Densidad conjunta de estados	79
5.1. Densidad conjunta de estados	79
5.2. Caso con acoplamiento isotrópico	82
5.3. Caso con acoplamiento R+D[001]	84
5.4. Caso con acoplamiento R+D[110]	87
5.5. Resumen de resultados	90
6. Orientación de espín como respuesta a un campo eléctrico ac	95
6.1. Acoplamiento Rashba+Dresselhaus[001]	95
6.2. Acoplamiento Rashba+Dresselhaus[110]	101
6.3. Resumen de resultados	104
7. Relaciones entre la polarizabilidad de espín con otras funciones respuesta	109
7.1. Conductividad de carga eléctrica	109
7.2. Conductividad Hall de espín	114
8. Conclusiones	119
A. Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[110]	123
B. Tensor de susceptibilidad de espín	131

Índice de figuras

2.1.	(a) Ilustración esquemática de una heteroestructura de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}/\text{InP}$. El gas de electrones bidimensional está localizado en una capa de $\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$ de 10 nm de espesor. La barrera inferior del pozo cuántico está formada por una capa de InP, mientras que para la capa superior se usa una capa de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ de 70 nm.	
	(b) Perfil de la banda de conducción y el pozo cuántico asimétrico donde se forma el gas de electrones [13].	19
2.2.	Representación esquemática de una estructura de tres capas: dos capas ferromagnéticas idénticas F1, F2, y en medio de ellas una capa de metal no-magnético M. (a) Cuando la magnetización de los ferromagnetos F1 y F2 es paralela, los electrones con espín hacia arriba (espín antiparalelo a la magnetización) pueden atravesar la estructura casi sin dispersión lo que produce una resistencia mínima. (b) Al contrario, en el caso antiparalelo, los electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo sufren dispersiones en ambos ferromagnetos F1 y F2, dando a lugar a una resistencia mayor [22].	23
2.3.	Transistor de espín de efecto de campo propuesto por Datta y Das.	24
2.4.	Contornos de Fermi para una distribución de los estados de espín (a) en equilibrio y en (b) respuesta a un campo eléctrico \mathbf{E} aplicado en el plano xy , donde $\delta\mathbf{k} = e\tau_p\mathbf{E}/\hbar$ [49]. Las flechas indican la dirección del espín.	29
3.1.	(a) Esquemas de las sub-bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ de un GE2D con acoplamiento Rashba. (b) Al nivel de Fermi se tienen dos vectores de Fermi característicos k_F^+ y k_F^- , donde $k_F^+ < k_F^-$. El desdoblamiento de los estados de espín está determinado por la cantidad $\Delta_R = 2\alpha k_F$. La profundidad de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ está dada por $\varepsilon_R = \hbar^2 k_\alpha^2 / 2m^*$	40
3.2.	Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento Dresselhaus[110].	44

- 3.3. Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[001], cuando (a) $\alpha \neq \beta_{[001]}$ y (b) $\alpha = \beta_{[001]}$ 46
- 3.4. Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[110]. 48
- 3.5. Distribución de la orientación del espín en el estado $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ para el caso con acoplamiento (a) Rashba, (b) Dresselhaus[001] y (c) R+D[001] [11]. 49
- 3.6. Densidad electrónica n_λ como función del parámetro de Rashba α . El eje x está graficado en escala logarítmica. 54
- 3.7. Densidad de estados $D_\lambda(\varepsilon)$ como función de la energía ε , para el caso con acoplamiento (a) Rashba, (b) R+D[001] y R+D[110], donde $\varepsilon_{so} = \hbar^2 q_{so}^2 / 2m^*$ y $D_T(E) = D_+(E) + D_-(E)$. Los parámetros usados en todos los casos son $\alpha = 1.6 \times 10^{-9}$ eVcm y $m^* = 0.05m_0$ 57
- 5.1. (a) A temperatura cero, los únicos estados permitidos que intervienen en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ , son aquéllos con vectores de onda $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$ para los cuales se cumple que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$. (b) La curva de resonancia $C_r(\omega)$ está definida por los puntos (k_x, k_y) tales que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$; para ω_1 y ω_2 fijas, con $\omega_2 < \omega_1$ y $k_0 = \sqrt{2\pi n}$. Sólo la región sombreada contribuye a la absorción óptica. 80
- 5.2. Densidad conjunta de estados de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl]. Los parámetros usados son $n = 5 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$ 83
- 5.3. La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta_{[001]}|$ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta_{[001]}|$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_a$, (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$, con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6$ eVÅ, $\beta_{[001]} = 0.5\alpha$, $n = 5 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$ 86
- 5.4. (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[001]. (b) Región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/4)$, $\omega_a = \Omega_-(\pi/4)$, $\omega_b = \Omega_+(3\pi/4)$, $\omega_- = \Omega_-(3\pi/4)$ [3]. Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 5.3. 87
- 5.5. La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_a$, (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$, con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6$ eVÅ, $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$, $n = 5 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$ 88

5.6.	(a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[110]. (b) Región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/2)$, $\omega_a = \Omega_-(\pi/2)$, $\omega_b = \Omega_+(\pi)$, $\omega_- = \Omega_-(\pi)$. Los parámetros usados son los mismos que en la Figura 5.5.	89
6.1.	Componente $\gamma_{xy}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín, para el caso con acoplamiento Rashba, donde $\gamma_R = \gamma_{xy}(\omega) $. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV}\text{\AA}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$	97
6.2.	Componentes (a) $\gamma_{xx}(\omega)$ y (b) $\gamma_{xy}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín para el caso con acoplamiento R+D[001], con $\beta_{[001]} = 0.5 \alpha$. El resto de los parámetros usados son los mismos que en la Figura 6.1.	99
6.3.	(a) Magnitud de la polarización de espín $ \mathbf{S} /S_0$ como función de la frecuencia ω y ángulo φ del campo eléctrico aplicado en el plano del GE2D con acoplamiento R+D[001]. (b) Mapa de intensidad de $ \mathbf{S} /S_0$, como función de ω y φ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 6.2.	101
6.4.	Componente (a) $\gamma_{xy}(\omega)$ y (b) $\gamma_{zx}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín con acoplamiento R+D[110], con $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$. El resto de los parámetros usados son los mismos que en la Fig. 6.1.	103
6.5.	(a) Magnitud de la polarización de espín $ \mathbf{S} /S_0$ como función de la frecuencia ω y dirección φ del campo eléctrico aplicado en el plano del GE2D con acoplamiento R+D[110]. (b) Mapa de intensidad de $ \mathbf{S} /S_0$ como función de ω y φ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 6.4.	104
7.1.	Contribución espín-órbita a la conductividad de carga $\text{Re } \sigma_{xx}^s(\omega)$, para el caso con acoplamiento tipo Rashba y tipo R+D[001], donde $\sigma_R = e^2/16\hbar$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV}\text{\AA}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$	111
7.2.	Contribución espín-órbita a la conductividad de carga (a) $\text{Re } \sigma_{xx}^s(\omega)$ y (b) $\text{Re } \sigma_{yy}^s(\omega)$, para el caso con acoplamiento R+D[110], donde $\sigma_R = e^2/16\hbar$. Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 7.1.	112
A.1.	Diagrama de los tres ángulos sucesivos de rotación ϕ , θ y ψ , los cuales determinan la orientación del nuevo sistema $x'y'z'$ relativo al sistema de ejes original xyz	124
A.2.	Transformación del sistema xyz al $x'y'z'$, donde $x' \parallel [\bar{1}10]$, $y' \parallel [001]$ y $z' \parallel [110]$	126
A.3.	Esquema del plano (110).	127

Resumen

La orientación de espines electrónicos inducida por campos eléctricos mediante la interacción espín-órbita en semiconductores, es uno de los fenómenos básicos más importantes en el activo campo de la Espintrónica. Este fenómeno no requiere el uso de materiales magnéticos ni la aplicación de campos magnéticos externos, como sucede usualmente cuando se explora la dinámica de espín, y por ello ofrece una vía alternativa para obtener una polarización de espín, que es uno de los elementos constitutivos básicos de cualquier posible dispositivo espintrónico. Las investigaciones realizadas en este tema se han restringido predominantemente al caso de excitación con campos eléctricos estáticos. En el presente trabajo, utilizamos el formalismo de la teoría de respuesta lineal para analizar la polarización de espín inducida en un gas de electrones cuasi-bidimensional vía interacción espín-órbita como respuesta a un campo eléctrico externo que oscila en el tiempo. Esta clase de sistema se encuentra presente en heteroestructuras semiconductoras con estructura cristalina tipo zincblenda y wurtzita, y es muy investigada teórica y experimentalmente, debido a que la magnitud de dicha interacción es apreciable en ellas y sus estados electrónicos adquieren notables características. En particular, calculamos el tensor de polarizabilidad de espín como función de la frecuencia del campo externo, tomando en cuenta una interacción espín-órbita anisotrópica derivada de la presencia conjunta de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus. Dicha anisotropía da lugar a un comportamiento espectral muy diferente del correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico (Rashba o Dresselhaus). El cálculo revela nuevas resonancias en los espectros de la polarizabilidad de espín, lo que sugiere la posibilidad de lograr un control ‘óptico’ de la polarización de espín mediante la variación de la frecuencia del campo aplicado, y no sólo a través de la conocida modulabilidad del acoplamiento Rashba. Además, se identifica el origen de estas resonancias en términos de la anisotropía del desdoblamiento de los estados electrónicos en el espacio de momentos. Consideramos el caso de pozos cuánticos orientados en las direcciones cristalográficas [001], [110] y [111]. Se obtuvieron relaciones entre el tensor de polarizabilidad de espín con otras funciones respuesta tales como la conductividad de carga o la conductividad Hall de espín, y con ello se verificaron algunas propiedades generales de la respuesta de espín reportadas previamente.

Capítulo 1

Introducción

El rápido progreso en la miniaturización de los dispositivos electrónicos ha llegado al régimen en el que los efectos cuánticos comienzan a ser factores importantes en su funcionamiento. Uno de estos efectos es la propiedad cuántica de los electrones que está íntimamente relacionada con el magnetismo en sólidos, nos referimos al *espín*. En un circuito eléctrico convencional, los espines están orientados aleatoriamente y no tienen influencia sobre el flujo de corriente eléctrica. En una nueva generación de dispositivos lo que se busca es generar corrientes de espines polarizados y utilizar, por ejemplo, el espín para controlar el flujo de corriente. En este contexto, los recientes avances en la manipulación del grado de libertad del espín a escala nanométrica apuntan a una nueva tecnología electrónica cuyo funcionamiento está basado principalmente en el espín de los electrones.

El conocimiento de cómo evoluciona el espín conforme el electrón atraviesa un dispositivo, es un elemento clave para poder utilizarlo, por ejemplo, en mecanismos para transferencia y procesamiento de información. Estos son algunos de los requerimientos que han dado lugar a un nuevo campo de estudio llamado Espintrónica, cuyo principal objetivo es encontrar mecanismos para incorporar el grado de libertad del espín a la electrónica convencional. La habilidad de controlar coherentemente el espín de los portadores de carga en nanoestructuras semiconductoras es uno de los principales objetivos de la espintrónica. Uno de los mecanismos prometedores para manipular el espín es el *acoplamiento o interacción espín-órbita*. Este es un efecto puramente relativista que acopla el momento orbital de los electrones con su espín; inicialmente fue descrito para electrones libres en el vacío donde los efectos de la interacción espín-órbita son muy pequeños.

Por otro lado, siendo el espín un momento magnético intrínseco de los electrones, se acopla naturalmente con campos magnéticos externos. No obstante, recientemente la generación eléctrica o no magnética de una polarización de espín en materiales semiconductores ha despertado un gran interés debido a su potencial aplicación en dispositivos espintrónicos basados en semiconductores, precisamente uno de los mecanismos para lograrlo es la interacción espín-órbita.

Se ha observado que el confinamiento electrónico en ciertas heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad causa un incremento significativo en la magnitud de la interacción espín-órbita [1]. Por esta razón, esta interacción resulta ser una vía alternativa muy importante para tener acceso al espín en materiales semiconductores sin la necesidad de utilizar campos magnéticos o materiales magnéticos, como sucede usualmente cuando se desea explorar la dinámica del espín.

La simetría de inversión espacial y temporal de los semiconductores desempeña un papel muy importante. Esto se debe a que la acción conjunta de las simetrías de inversión espacial y temporal en ciertos semiconductores da como resultado una doble degeneración de los estados de espín de los electrones. Es posible romper esta degeneración aplicando un campo magnético externo. Sin embargo, los semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda y wurtzita son intrínsecamente asimétricos, por lo tanto la degeneración de los estados de espín se rompe incluso en la ausencia de cualquier campo externo.

En las heteroestructuras semiconductoras la falta de simetría de inversión da lugar a distintos mecanismos de interacción espín-órbita. Uno de los sistemas idóneos para estudiar estos mecanismos en sistemas de baja dimensionalidad son los gases de electrones bidimensionales [2]. En la interfaz de las heteroestructuras semiconductoras se forman pozos cuánticos y cuando el ancho del pozo es suficientemente angosto da lugar a un gas de electrones bidimensional donde los electrones se encuentran confinados en un espacio cuasi-bidimensional en el que su movimiento en la dirección de crecimiento de la heteroestructura está cuantizado, mientras que en el plano del gas se mueven de manera libre. La falta de simetría espacial del potencial que confina el gas de electrones, da origen al conocido *acoplamiento espín-órbita de Rashba* [3]. Asimismo, el rompimiento en la simetría de inversión espacial en el bulto da origen al *acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus* [4]. Mientras que el acoplamiento Dresselhaus es una propiedad intrínseca del material, el acoplamiento de Rashba puede modularse externamente con un voltaje de compuerta [5, 6]. En los gases de electrones bidimensionales, una característica importante del acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus es que es sensible a la ori-

entación de crecimiento del pozo cuántico. Por ejemplo, en pozos cuánticos crecidos en la dirección cristalográfica [110], se sabe que el acoplamiento Dresselhaus produce estados con los espines orientados perpendicularmente al plano del gas, a diferencia de lo que pasa en un pozo en una muestra orientada en la dirección [001] donde los espines se encuentran en el plano del gas.

La interacción espín-órbita proporciona, en principio, una vía de acceso para controlar el espín del electrón aplicando un campo eléctrico en lugar de un campo magnético. En particular, en un gas de electrones bidimensional con asimetría de inversión espacial, se sabe que la interacción espín-órbita se traduce a un campo magnético efectivo que depende del momento de los electrones, el cual induce una polarización de espín neta aplicando campos o corrientes eléctricas.

Como se ha mencionado, la generación y manipulación de una densidad de espines es uno de los elementos constitutivos de cualquier posible dispositivo espintrónico. Por tal motivo, el fenómeno de polarización de espines vía campos eléctricos a través de la interacción espín-órbita representa uno de los temas centrales en el activo campo de la Espintrónica.

La posibilidad de inducir eléctricamente una polarización de espines en un semiconductor a través de la interacción espín-órbita fue sugerida teóricamente en 1971 por D'yakonov y Perel' [7]. Otros autores [8] mostraron la importancia de la interacción espín-órbita, en especial del acoplamiento Dresselhaus en semiconductores no centrosimétricos, al dar lugar a un mecanismo intrínseco de relajación de espín alternativo a otros mecanismos, tales como, los asociados al acoplamiento espín-órbita debido a iones o impurezas, o a la interacción hiperfina entre espines electrónicos y nucleares.

Posteriormente, en 1990 Edelstein [13] demostró teóricamente que se puede generar una orientación del espín de los electrones de conducción al aplicar una corriente eléctrica a través de un GE2D con acoplamiento Rashba. Con estos resultados se mostró la posibilidad de un efecto magneto-eléctrico (una corriente eléctrica induce una magnetización de espín) en este tipo de sistemas a través del acoplamiento modulable de Rashba.

No obstante, fue hasta en 2004 cuando se obtuvieron las primeras observaciones experimentales de una polarización de espín generada por una corriente eléctrica en heteroestructuras semiconductoras con interacción espín-órbita [9, 10, 11, 12]. En estos sistemas el campo eléctrico se aplica en el plano de un gas de electrones bidimensional, y actúa sobre portadores de carga en movimiento como un campo magnético intrínseco por medio del cual es posible orientar los espines [13].

En la actualidad, existen diversos trabajos teóricos que han estudiado este fenómeno en gases de electrones bidimensionales con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. En estos sistemas, se ha encontrado que la polarización de espín inducida por un campo eléctrico es anisotrópica, esto quiere decir que depende de la dirección del campo [14]. Además de esta anisotropía debida al campo, se ha mostrado que la contribución del acoplamiento Dresselhaus a la polarización de espín, depende de la dirección de crecimiento del pozo cuántico, mientras que la contribución del acoplamiento Rashba es independiente de dicha dirección [15]. Asimismo, se ha demostrado que es posible controlar la magnitud y dirección de la polarización de espín modulando la intensidad de los acoplamientos de Rashba y Dresselhaus [16].

Sin embargo, las investigaciones realizadas se han restringido principalmente al caso de excitación con campos estáticos. Recientemente algunos modelos teóricos han considerado excitación con campos que oscilan a frecuencia finita. Se han realizado estudios de la dependencia en la frecuencia de la función respuesta de espín, empleando el formalismo de la teoría de respuesta lineal [17, 18, 19]. En este contexto, Erlingsson et al. [17] han hecho cálculos del tensor de susceptibilidad de espín como función de la frecuencia y han encontrado que las resonancias que se observan en la susceptibilidad de espín dependen de los valores relativos de los parámetros de Rashba y Dresselhaus. López-Bastidas et al. [19] reportan que la forma de los espectros de la función respuesta de densidad de espín, es resultado de la anisotropía angular del desdoblamiento de los estados de espín debida a la presencia conjunta del acoplamiento Rashba y Dresselhaus. Ambos trabajos sólo consideran la contribución del acoplamiento Dresselhaus en un pozo cuántico crecido en la dirección cristalográfica [001].

Otro enfoque metodológico que se ha empleado para estudiar este fenómeno es a partir de la ecuación cinética de la función de distribución de los electrones, la cual incorpora los procesos de dispersión por impurezas [20, 21, 22, 23]. En un estudio hecho en el límite de baja frecuencia, Raichev [23] reporta que para pozos cuánticos crecidos en la dirección [001], el tensor de polarizabilidad de espín es cero a cualquier frecuencia cuando los parámetros de Rashba y Dresselhaus son iguales, esto se debe a que en este caso existe una dirección fija de cuantización, esto quiere decir, que el campo espín-órbita no depende del momento de los electrones y por lo tanto los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan. Similarmente, encontró que en pozos cuánticos crecidos en la dirección [110], cuando sólo hay acoplamiento Dresselhaus no se genera una polarización de espín independientemente de la frecuencia.

Objetivo de la tesis

Tomando en cuenta el estado actual de las investigaciones realizadas sobre este fenómeno, el objetivo principal de esta tesis es estudiar el fenómeno de la orientación de espín como respuesta a un campo eléctrico que oscila en el tiempo con una cierta frecuencia dada, debido a que los estudios realizados se han concentrado principalmente en el límite de baja frecuencia. Este campo eléctrico se aplica en el plano de un gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se consideran los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras semiconductoras III-IV con estructura cristalina tipo zincblenda como InAs o GaAs, orientados en las direcciones cristalográficas [001], [110] y [111]. Este estudio se basa en el cálculo de funciones respuesta, en particular, de los tensores de susceptibilidad de espín y polarizabilidad de espín como función de la frecuencia del campo perturbativo. Estos tensores se obtienen utilizando el formalismo de la teoría de la respuesta lineal, cuyo cálculo combina el estudio a frecuencia finita con el efecto de la interacción espín-órbita anisotrópica derivada de la presencia conjunta de los acoplamientos tipo Rashba y tipo Dresselhaus.

En la mayoría de los trabajos realizados, un aspecto que no ha sido estudiado en detalle es el origen de las resonancias observadas en los espectros de la función respuesta de espín. Por este motivo, en esta tesis se calcula la densidad conjunta de estados, la cual nos permite entender el origen de las resonancias en la polarización de espín como función de la frecuencia del campo.

La hipótesis en la que se fundamenta esta investigación es que la interacción espín-órbita anisotrópica modificará los espectros, dando lugar a un comportamiento espectral muy diferente del correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico, es decir, sólo acoplamiento tipo Rashba o tipo Dresselhaus. Esta dependencia en la frecuencia abre la posibilidad de lograr un control tipo ‘óptico’ sobre las densidades de espín en estos sistemas mediante la variación de la frecuencia del campo aplicado, y no sólo a través de la modulabilidad del acoplamiento Rashba vía potenciales electrostáticos.

Una vez planteado el tema de investigación, a continuación se presenta la organización de esta tesis por capítulos. El Capítulo 2 comienza introduciendo dentro de un contexto histórico, el concepto del espín del electrón y del acoplamiento espín-órbita. El principal propósito es resaltar la importancia que tiene en la actualidad el estudio de la dinámica del espín en el nuevo campo de la Espintrónica basada en semiconduc-

tores. En particular, se pone énfasis en la investigación que se desarrolla actualmente en materiales semiconductores con interacción espín-órbita.

En el Capítulo 3 se estudian las propiedades electrónicas de un gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus en ausencia de campos externos. Se analizarán tres casos: primero se describirán las propiedades cuando se tiene sólo acoplamiento Rashba. Posteriormente, cuando se tiene sólo acoplamiento Dresselhaus. Por último, se estudia cómo la presencia de ambos tipos de acoplamiento produce un desdoblamiento anisotrópico.

Una vez que se conocen las propiedades del estado base del sistema, se estudia el efecto que tiene en el sistema la aplicación de un campo eléctrico en el plano del gas de electrones bidimensional. Por lo tanto, en el Capítulo 4 se describen en forma general los fundamentos del formalismo de la teoría de la respuesta lineal que está basada en la teoría cuántica de perturbaciones de la matriz densidad. Este formalismo permite calcular funciones de correlación tipo fórmulas de Kubo, como lo son las funciones de correlación tipo espín-espín y espín-corriente de carga. Esta última es conocida como polarizabilidad de espín y es la función que describe la polarización de espín como respuesta a un campo eléctrico.

Resulta conveniente, antes de estudiar el fenómeno de polarización de espín, analizar la densidad conjunta de estados. La importancia de dicha función es que permite describir y anticipar las propiedades espectrales de las funciones respuesta mencionadas anteriormente. La densidad conjunta de estados contiene información sobre el número de transiciones verticales que son posibles a cierta frecuencia de excitación entre subbandas de espín, las cuales se presentan a causa del desdoblamiento originado por la interacción espín-órbita. Este análisis se muestra en el Capítulo 5.

En el Capítulo 6 se presentan los resultados obtenidos al evaluar numéricamente los tensores de susceptibilidad y polarizabilidad de espín. Los resultados muestran que la presencia conjunta de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, da lugar a que la polarización de espín dependa de la frecuencia. Además de la dependencia en la frecuencia se encontró que la polarización de espín depende también de la dirección en la que se aplica el campo eléctrico, el cual es un hecho que ha sido poco estudiado [22]. La forma de los espectros de la polarizabilidad de espín pone de manifiesto la importancia de la presencia simultánea del acoplamiento tipo Rashba y tipo Dresselhaus, en particular la que está presente en pozos cuánticos crecidos en las direcciones cristalográficas [001] y [110].

En el Capítulo 7 se derivan relaciones entre la polarización de espín con la corriente

de carga eléctrica y la corriente de espín. Este tipo de relaciones ya han sido estudiadas previamente por otros autores [17, 18, 23, 24, 25]. En este contexto, lo que se propone en este capítulo es obtener este tipo de relaciones utilizando el formalismo de la teoría de la respuesta lineal en el límite sin impurezas y considerando un campo eléctrico que oscila en el tiempo a frecuencia finita. La principal importancia de este capítulo radica en que estas relaciones permiten establecer una conexión entre la corriente de espín y la densidad de espín a través de la interacción espín-órbita, lo cual puede ser de utilidad, si se toma en cuenta que en un experimento resulta más fácil detectar una densidad de espín que una corriente de espín.

Finalmente en el Capítulo 8, se presentan las conclusiones generales de este trabajo.

Bibliografía

- [1] R. Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [2] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction* (Cambridge University Press, 1998).
- [3] Y.A. Bychkov y E.I. Rashba, “Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers”, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [4] G. Dresselhaus, “Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures”, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [5] J. Nitta, T. Akazaki y H. Takayanagi, “Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructure”, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [6] Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder y H. Lüth, “Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells for $B \rightarrow 0$ ”, *J. Appl. Phys.* **83**, 4324 (1998).
- [7] M.I. D'yakonov y V.I. Perel', “Possibility of orienting electron spins with current”, *JETP Lett.* **13**, 467 (1971); “Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors”, *Phys. Lett. A* **35**, 459 (1971).
- [8] M.I. D'yakonov y V.Yu Kachorovskii, “Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors”, *Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986).
- [9] V. Sih, R.C. Myers, Y.K. Kato, W.H. Lau, A.C. Gossard y D.D. Awschalom, “Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases”, *Nature Phys.* **1**, 31 (2005).
- [10] Y.K. Kato, R.C. Myers, A. C. Gossard y D.D. Awschalom, “Current-induced spin polarization in strained semiconductors”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 176601 (2004).

- [11] A. Yu Silov, P. A. Blajnov, J. H. Wolter, R. Hey, H. Ploog y N. S. Averkiev, “Current-induced spin polarization at a single heterojunction”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5929 (2004).
- [12] S.D. Ganichev, S.N. Danilov, Petra Schneider, V.V. Bel’kov, L.E. Golub, W. Wegscheider, D. Weiss y W. Prettl, “Can an electric current orient spins in quantum wells?”, *cond-mat/0403641v1* (2004).
- [13] V. M. Edelstein, “Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems”, *Solid State Commun.* **73**, 233 (1990).
- [14] M. Trushin y J. Schliemann, “Anisotropic current-induced spin accumulation in the two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **75**, 155323 (2007).
- [15] A. V. Chaplik, M. V. Entin, L. I. Magarill, “Spin orientation of electrons by electric field in 2D systems without inversion symmetry”, *Physica E* **13**, 744 (2002).
- [16] Z. Huang y L. Hu, “Controllable kinetic magnetoelectric effect in two-dimensional electron gases with both Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **73**, 113312 (2006).
- [17] S. I. Erlingsson, J. Schliemann y D. Loss, “Spin susceptibilities, spin densities, and their connection to spin currents”, *Phys. Rev. B* **71**, 035319 (2005).
- [18] J.A. Maytorena, C. López-Bastidas y F. Mireles, “Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems”, *Phys. Rev. B* **74**, 235313 (2006).
- [19] C. López, J. Maytorena y F. Mireles, “Interplay of the Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling in the optical spin susceptibility of 2D electron systems”, *Phys. Stat. Sol. (c)* **4**, 4229 (2007).
- [20] M. Trushin y J. Schliemann, “Anisotropic current-induced spin accumulation in the two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **75**, 155323 (2007).
- [21] L.I. Magarill, A.V. Chaplik y M.V. Entin, “Spin response of 2D electrons to a lateral electric field”, *Low-Dimensional Systems* **35**, 1081 (2001).
- [22] V.V. Bryksin y P. Kleinert, “Dynamic magnetoelectric and charge-Hall effects in the Rashba-Dresselhaus model”, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 4937 (2006).
- [23] O. E. Raichev, “Frequency dependence of induced spin polarization and spin current in quantum wells”, *Phys. Rev. B* **75**, 205340 (2007).

- [24] O.V. Dimitrova, “Spin-Hall conductivity in a two-dimensional Rashba electron gas”, *Phys. Rev. B* **71**, 245327 (2005).
- [25] A. Shekhter, M. Khodas y A.M. Finkel’stein, “ Chiral spin resonance and spin-Hall conductivity in the presence of the electron-electron interactions”, *Phys. Rev. B* **71**, 165329 (2005).

Capítulo 2

Espintrónica

El principal objetivo de este capítulo es dar una descripción general de algunos de los más importantes temas de estudio del nuevo campo de la Espintrónica. Para ello se presentan los conceptos fundamentales en los que se basa este trabajo: el espín y el acoplamiento espín-órbita. A pesar de que estas propiedades del electrón fueron descubiertas hace más de ocho décadas, no es de sorprender que aún sigan siendo objeto de intensa investigación teórica y experimental. Para entender esto, se comienza el capítulo con una breve reseña histórica sobre el descubrimiento del espín electrónico y del acoplamiento espín-órbita, con el propósito de resaltar la importancia que tiene en la actualidad el estudio de la dinámica del espín de los electrones para agregar nuevas capacidades y funcionalidades a los futuros dispositivos electrónicos. Uno de los mecanismos prometedores para controlar el espín es precisamente la interacción espín-órbita, en particular la que está presente en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad. Esto ha motivado el estudio de distintos fenómenos espintrónicos en estos sistemas, siendo uno de ellos el fenómeno de la polarización de espín o magnetización de espín inducida no por un campo magnético, sino por un campo eléctrico, tema en el cual se enfoca esta tesis. Para finalizar este capítulo se presenta una reseña de las investigaciones realizadas sobre dicho fenómeno hasta la fecha, las cuales principalmente se han restringido al caso de excitación con campos eléctricos estáticos.

2.1. El Espín

Las primeras ideas que sugerían la existencia de una propiedad magnética intrínseca de los electrones se comenzaron a desarrollar en 1921. Esta hipótesis se basaba en el

hecho de que muchos experimentos no podían ser explicados de manera satisfactoria en términos de modelos clásicos. Entre estos fenómenos sin explicación se encontraba el efecto Zeeman anómalo [1], en el cual se observó que las líneas espectrales de átomos como el Hidrógeno en presencia de un campo magnético intenso, se descomponían en conjuntos llamados multipletes característicos del elemento y dependientes del campo externo. Posteriormente Einstein y de Haas realizaron un experimento en el cual suspendieron un cilindro magnetizable de un hilo de cuarzo y le indujeron una corriente alterna mediante una bobina, procurando que la frecuencia de las corrientes inducidas coincidiera con la frecuencia de oscilación torsional para lograr que se produjera resonancia. Con este experimento Einstein y de Haas pudieron comprobar que la variación de la magnetización genera una variación similar en el momento angular [2].

No obstante, el experimento crucial que puso en evidencia esta propiedad magnética intrínseca de los electrones fue realizado por Stern y Gerlach en 1921 [1]. En sus experimentos hacían pasar un haz de átomos de plata por un campo magnético fuertemente inhomogéneo. Se esperaba que en el estado base el haz no debía descomponerse, sin embargo se encontró que el haz se dividía en dos componentes, poniendo de manifiesto que los electrones utilizados poseían un momento magnético diferente de cero aún en el estado base. Sin embargo, en ese momento no existía una teoría que explicara de manera satisfactoria el origen de estos fenómenos.

En 1924, Wolfgang Pauli investigó el problema de porqué las líneas espectrales de los metales alcalinos no eran singletes como lo predecía la teoría de Bohr sino un doblete, es decir, había dos líneas espectrales en lugar de una. Esto podía ser explicado si se suponía que el electrón podía existir en dos estados, lo que lo llevó a proponer que cada estado electrónico orbital en un átomo es caracterizado por cuatro números cuánticos, en lugar de tres y que además cada estado puede estar ocupado sólo por un electrón, resultado conocido como *Principio de exclusión de Pauli*. Para explicar estos resultados, en 1925, Samuel Goudsmit y George Uhlenbeck tuvieron la idea de atribuirle al electrón su propio momento magnético intrínseco o *espín*, como interpretación física del nuevo número cuántico propuesto por Pauli. Probaron que el espín de los electrones podía tener sólo dos valores $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$, asignándole el doble del valor que se suponía debía tener una partícula cargada girando, donde \hbar es la constante de Planck [3].

El concepto del espín electrónico apareció al principio como una hipótesis adicional que debía introducirse al resto de la Teoría Cuántica. Landé, al estudiar el efecto Zeeman anómalo, introdujo el famoso factor g y Goudsmit y Uhlenbeck le asignaron un factor de $g = 2$ al espín del electrón para que concordaran los resultados. Este factor de 2 sólo

pudo entenderse claramente algunos años más tarde cuando, en 1928, Dirac [4] estableció una ecuación de onda relativista similar a la ecuación no relativista de Schrödinger para describir al electrón en el vacío. En su tratamiento, el espín del electrón aparece de forma natural y demostró que las soluciones de su ecuación para el átomo de hidrógeno daban al espín como un cuarto número cuántico. Por lo tanto, la Mecánica Cuántica Relativista puso al espín sobre fundamentos teóricos muy firmes, estableciendo que no es una propiedad clásica.

El número cuántico del espín es análogo al número cuántico orbital, sin embargo, a diferencia de este último, el valor del espín no cambia con el estado de movimiento del electrón. Todos los electrones independientemente de cuál sea su estado de movimiento, si se mide la proyección del espín a lo largo de cualquier eje, pueden tener cualquiera de los valores $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$. De modo que pensar en el espín en términos de un modelo clásico e imaginar al electrón como una esfera de carga que gira alrededor de uno de sus ejes *no* corresponde a la realidad física. La razón por la cual se utiliza hasta la fecha este modelo clásico en la literatura para tratar de visualizar y entender el espín del electrón, se debe a que se sigue considerando al electrón como una partícula puntual; sin embargo no resulta claro cómo puede asociarse un momento magnético o una rotación intrínseca a un punto. Es importante tener claro que el espín es una propiedad magnética fundamental del electrón junto con su masa y carga eléctrica. No obstante, cabe mencionar que el espín es una propiedad cuántica de los electrones y muchas otras partículas, como los núcleos y los átomos. En este trabajo cuando mencionemos “espín” nos referiremos al espín del electrón.

2.2. Acoplamiento espín-órbita

Una vez descubierto el espín del electrón, se comenzó a estudiar la forma en cómo interactúa con los campos eléctricos producidos dentro de los átomos. Para ilustrar esta interacción, imaginemos el movimiento orbital del electrón alrededor del núcleo atómico. El campo eléctrico producido por el núcleo se transforma a un campo magnético efectivo, visto desde el marco de referencia del electrón. Este campo magnético efectivo interactúa con el momento magnético asociado al espín del electrón, y como consecuencia, esta interacción produce la precesión del espín alrededor de este campo. A este fenómeno se le conoce como *acoplamiento* o *interacción espín-órbita*, es un efecto puramente relativista y da lugar a un rompimiento de la degeneración de los estados electrónicos

aún en la ausencia de un campo magnético externo.

La descripción del acoplamiento entre el movimiento orbital del electrón y su espín, surge naturalmente al hacer una aproximación no relativista de la ecuación de Dirac. Esta aproximación consiste en hacer un desarrollo hasta segundo orden del término $v/c \ll 1$, donde v es la velocidad del electrón y c es la velocidad de la luz. De modo que se obtienen tres correcciones relativistas; la primera es la corrección relativista a la energía cinética, la segunda es el término de Darwin y el último término es el Hamiltoniano que describe la interacción espín-órbita como

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V \times \mathbf{k}) , \quad (2.1)$$

donde m_0 es la masa en reposo del electrón, $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ es el vector de onda del electrón con momento \mathbf{p} , $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli y V es algún potencial en el que se mueve el electrón. De esta forma, la teoría de Dirac incorpora tres términos de corrección a la teoría de Schrödinger, que incorporan los efectos de la relatividad, el espín del electrón y en los cuales acopla el momento del electrón con su espín. Cuando $V = 0$, de la ecuación de Dirac se obtienen dos bandas de energía

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k^2} , \quad (2.2)$$

las cuales están separadas por una brecha energética de $2m_0 c^2 \sim 1 \text{ MeV}$, conocida como brecha de Dirac. Esta enorme brecha de energía aparece en el denominador de (2.1), por lo tanto los efectos del acoplamiento espín-órbita para electrones débilmente enlazados son muy pequeños.

2.3. Espintrónica

Si bien es cierto que la existencia del espín electrónico y del acoplamiento espín-órbita logró descubrirse desde principios del siglo XX, un hecho novedoso es el gran interés que ha despertado en las últimas dos décadas la posibilidad de manipular la dinámica del espín del electrón en sistemas de estado sólido. Tal interés ha surgido por la gradual disminución en la escala de los dispositivos electrónicos, en este régimen las propiedades cuánticas comienzan a ser factores importantes en su funcionamiento. El espín del electrón es una de estas propiedades, lo que ha dado lugar a un nuevo campo de estudio llamado Espintrónica. El principal objetivo de la Espintrónica es encontrar

mecanismos para manipular el espín del electrón y poder incorporarlo en la electrónica convencional. Su enfoque es muy amplio e incluye la investigación de procesos que dependen del espín en distintos sistemas que van de multicapas metálicas ferromagnéticas a semiconductores. Mientras que los dispositivos electrónicos convencionales están basados en el transporte de carga, los posibles dispositivos espintrónicos utilizan la dirección y acoplamiento del espín del electrón en adición a la carga [5]. Debido a que el espín es una propiedad magnética del electrón, es posible controlarlo aplicando campos magnéticos o utilizando materiales magnéticos, motivo por el cual en un principio a este nuevo campo se le denominó Magnetoelectrónica [6].

La palabra Espintrónica fue propuesta por Stuart A. Wolf en 1994 [7], cuando la DARPA (*Defense Advanced Research Projects Agency*) empezó un nuevo programa, llamado *Spintronics*, acrónimo en inglés de SPIN TRansport electRONICS (electrónica de transporte de espín), para crear una nueva generación de dispositivos electrónicos donde el espín de los portadores pudiera desempeñar un papel fundamental además o en lugar de la carga. El principal logro del programa fue crear nuevos sensores de campo magnético y memorias de acceso magnético aleatorio (MRAM) basados en el efecto de magnetoresistencia gigante y tunelamiento que depende del espín [8].

Sin embargo, para ser comercialmente útil, un dispositivo espintrónico debe trabajar a temperatura ambiente y ser compatible con la electrónica existente. Casi cualquier dispositivo espintrónico imaginable debe tener medios de inyección, manipulación y detección del espín. Para agregar el grado de libertad del espín a un dispositivo del cual se extrae información, se debe crear una población de espín, transportarla a través del dispositivo, además de crear mecanismos para manipularla y finalmente poder detectarla. Los electrones primero deben estar polarizados a fin de que todos sus espines apunten en la misma dirección. También es importante que la polarización de espín se conserve en gran medida conforme los electrones se propaguen a través del material [9]. Estos requerimientos han planteado un gran número de cuestiones importantes, tales como, ¿cuál es la manera más efectiva para orientar los espines en un sistema?, ¿qué mecanismos proporcionan una vía de acceso para el control de los espines?, de encontrar estos mecanismos, la pregunta que sigue es ¿cuánto tiempo es capaz el sistema de mantener la orientación de sus espines?, y muy importante ¿cómo se puede detectar un espín? [5].

La complejidad de estos y muchos otros problemas han motivado una intensa investigación en la comunidad científica internacional. En este contexto, es válido e incluso necesario plantear la pregunta de ¿cómo se ubica México en la producción científica en el campo de la Espintrónica de semiconductores? Se debe reconocer que en México la

investigación en el campo de la Espintrónica comienza a despertar interés y a producir algunos resultados importantes, en particular en la investigación teórica de fenómenos espintrónicos. Sin embargo, para que este campo despierte un interés generalizado, es fundamental reconocer la importancia del estudio de la electrónica del espín y el potencial impacto de esta nueva tecnología en los futuros dispositivos espintrónicos; de aquí la importancia de sumarse a esta investigación.

2.4. Interacción espín-órbita en semiconductores

Como se mencionó anteriormente, el estudio de la Espintrónica se ha centrado principalmente en los sistemas de estado sólido, tal es el caso de las estructuras cristalinas. En estos sistemas el comportamiento de los electrones es distinto al descrito por Dirac para electrones libres en el vacío (2.1). Entre las diferencias se encuentra el hecho de que los electrones se mueven en presencia de campos eléctricos producidos por los átomos de la red cristalina que forman el sólido. Además en un sólido el movimiento de los electrones está descrito por bandas de energía y tienen una masa efectiva m^* , que corresponde a la masa que el electrón posee en el sólido, normalmente mucho menor que su masa propia en reposo m_0 , esto es, $m^*/m_0 \ll 1$. No obstante, se ha encontrado que la estructura de bandas de algunos semiconductores presenta características similares a la teoría de Dirac. Para un electrón en un cristal hay diversas fuentes de gradiente de potencial, como lo pueden ser impurezas, confinamiento cuántico, fronteras o campos externos; cualquiera de estos factores puede ocasionar un incremento en la interacción espín-órbita en los sólidos. De tal forma que las ecuaciones de la teoría de bandas de semiconductores de brecha estrecha son similares a la ecuación (2.1), pero con una diferencia significativa, la brecha energética E_g entre la banda de conducción y la banda de valencia en los semiconductores es $E_g \sim 1$ eV, mientras que la brecha de Dirac es $2m_0c^2 \sim 1$ MeV [10]. Esta diferencia refleja un enorme incremento en la interacción espín-órbita en semiconductores con brecha estrecha, por ello el acoplamiento espín-órbita resulta ser un efecto muy importante en estos sistemas.

Además de este incremento significativo del acoplamiento espín-órbita, la Espintrónica en materiales semiconductores resulta de natural importancia dada la enorme experiencia en tecnología de sistemas semiconductores adquirida desde hace tiempo y a la existencia de técnicas altamente sofisticadas de crecimiento de cristales. Técnicas de crecimiento como epitaxia de haces moleculares (*molecular beam epitaxy*, MBE) y

deposición química de vapores metal-orgánicos (*metal organic chemical vapor deposition*, MOCVD) permiten depositar sobre un sustrato una monocapa de cristal con gran precisión. Estas técnicas empleadas en la fabricación de semiconductores han hecho posible fabricar dispositivos de estado sólido que se comportan como sistemas de dos, una o cero dimensiones [11].

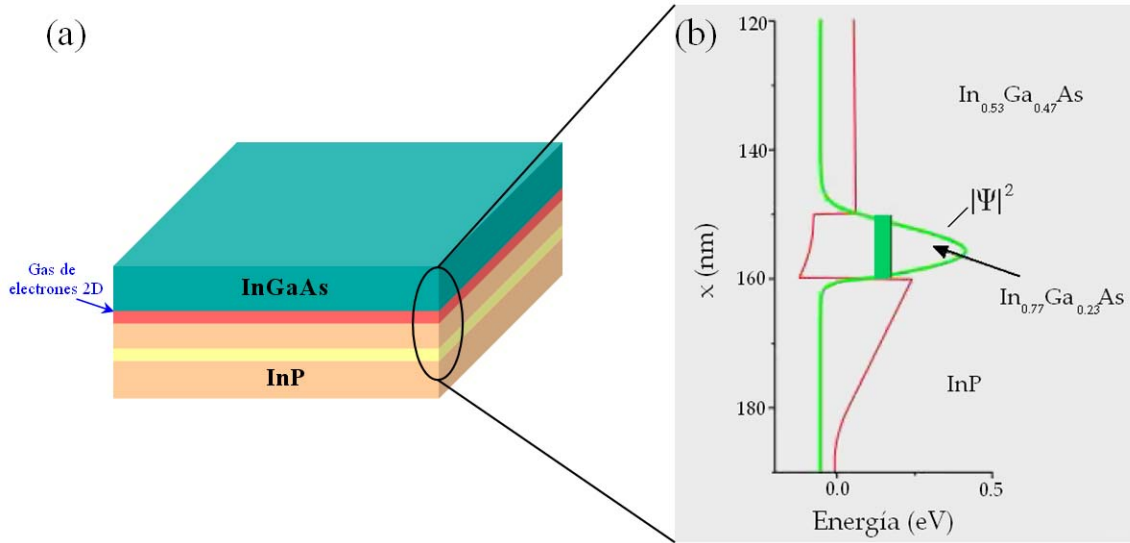


Figura 2.1: (a) Ilustración esquemática de una heteroestructura de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}/\text{InP}$. El gas de electrones bidimensional está localizado en una capa de $\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$ de 10 nm de espesor. La barrera inferior del pozo cuántico está formada por una capa de InP, mientras que para la capa superior se usa una capa de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ de 70 nm. (b) Perfil de la banda de conducción y el pozo cuántico asimétrico donde se forma el gas de electrones [13].

Las aplicaciones de los sistemas de baja dimensionalidad en la fabricación de dispositivos semiconductores son múltiples. Un ejemplo notable son las estructuras cristalinas artificiales como las heteroestructuras semiconductoras (Figura 2.1a). Otros sistemas emplean interfaces ferromagnéticas/semiconductoras. Estas heteroestructuras son ampliamente usadas para investigar los fenómenos que dependen del espín en semiconductores [12]. En dichos sistemas se forman de manera controlada pozos cuánticos, los cuales albergan una densidad de electrones del orden de 10^{12} cm^{-2} , cuyo movimiento en la dirección de crecimiento de la heteroestructura está cuantizado, mientras que en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento se mueven de manera libre. Cuando el ancho del pozo es suficientemente angosto se dice que el pozo da lugar a un *gas de electrones bidimensional* (GE2D). En este gas los electrones se encuentran confinados a un espacio cuasi-bidimensional y sólo pueden moverse libremente en el plano del gas.

Otra forma de crear un GE2D es por dopaje modulado. Esta técnica consiste en dopar uno de los materiales de una heteroestructura semiconductor conformada, por ejemplo, por una capa dopada de n-AlGaAs y una sin dopar de GaAs. Los portadores de la capa de n-AlGaAs migran a la capa de GaAs, de esta manera los electrones se separan de sus donores lo que genera un campo eléctrico en la interfaz, esto da lugar a que se forme un pozo de potencial asimétrico que confina a los portadores de carga en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, creándose de esta manera un gas de electrones bidimensional [11].

Las heteroestructuras semiconductoras están formadas principalmente de materiales con componentes del grupo III-V como GaAs, InGaAs y AlGaAs, así como del grupo II-VI como el ZnSe y CdTe. Todos estos semiconductores tienen una estructura cristalina tipo zincblenda. Este tipo de estructura tiene la característica de que es intrínsecamente asimétrica, es decir, no tiene un centro de inversión espacial. Es precisamente esta característica la cual hace que estos semiconductores sean buenos candidatos para el desarrollo de dispositivos espintrónicos. Esto se debe a que en un GE2D, los estados electrónicos están doblemente degenerados en ausencia de un campo magnético externo \mathbf{B} . Al aplicar un campo $\mathbf{B} \neq 0$, esta degeneración se rompe [10]. Sin embargo, se ha encontrado que en ciertos semiconductores con estructura zincblenda, donde los electrones se mueven a través de potenciales que no tienen simetría de inversión espacial, ocurre un rompimiento en la degeneración de los estados de espín incluso en la ausencia de campos magnéticos externos [14], esto es a $\mathbf{B} = 0$. En las heteroestructuras semiconductoras la falta de simetría de inversión se debe esencialmente a dos razones: una es la falta de simetría del potencial de confinamiento y la otra es el rompimiento en la simetría de inversión en el bulto.

La falta de simetría de inversión en los semiconductores da origen a distintos mecanismos de interacción espín-órbita. Un mecanismo importante se origina cuando el potencial que confina al GE2D a un plano no es simétrico a lo largo de la dirección de crecimiento, efecto conocido como asimetría de inversión estructural del potencial de confinamiento (Figura 2.2). Esta asimetría produce un campo eléctrico superficial perpendicular al plano del gas. Rashba estudió cómo el campo eléctrico que sienten los electrones confinados a moverse en un pozo cuántico asimétrico se transforma relativísticamente en un campo magnético efectivo, llamado ahora campo de Rashba, el cual puede inducir una precesión del espín. Este efecto es conocido como *acoplamiento espín-órbita de Rashba* [15] y está descrito por el Hamiltoniano

$$H_R = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) , \quad (2.3)$$

donde α es un parámetro de interacción espín-órbita, llamado parámetro de Rashba, $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda bidimensional del electrón y $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli. Una característica notable del acoplamiento Rashba, es que es posible modular experimentalmente su magnitud, es decir, la constante α , con un voltaje externo de compuerta, el cual puede servir para cambiar el potencial preexistente de confinamiento [16, 17]. Por ejemplo, en distintos materiales con densidades electrónicas de $n = 0.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se han estimado experimentalmente valores de $\alpha = 0.6 \times 10^{-11} \text{ eVm}$, en cambio cuando $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ se tiene que $\alpha = 4 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ [16]. Recientemente Nitta et al. [18] reportan un valor de $\alpha = 3 \times 10^{-12} \text{ eVm}$ para densidades electrónicas de $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$.

Otro mecanismo importante de interacción espín-órbita aparece como resultado de la asimetría de inversión en el bulto de ciertas estructuras cristalinas tipo zincblenda. Este efecto es conocido como *acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus* [14], el cual está descrito por el Hamiltoniano

$$H_D^{3d} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)] , \quad (2.4)$$

donde γ es un parámetro efectivo de acoplamiento. Por ejemplo, tanto trabajos teóricos como experimentales han determinado un valor de $\gamma = 24 \text{ eV\AA}^3$ en GaAs [19]. Este acoplamiento produce un desdoblamiento de los estados de espín proporcional a k^3 para valores pequeños de k en el bulto, mientras que el desdoblamiento de los estados de espín del acoplamiento Rashba es lineal en k . Sin embargo, en pozos cuánticos suficientemente angostos, se obtiene un término de acoplamiento Dresselhaus lineal en k . En un GE2D este acoplamiento lineal es sensible a la orientación del pozo cuántico con respecto a los ejes cristalográficos. Además, a diferencia del acoplamiento Rashba que se puede modular externamente mediante voltajes de compuerta, el acoplamiento Dresselhaus es intrínseco a cada material por lo que no se puede modificar por campos externos. La intensidad de esta interacción puede ser del orden o menor que la del acoplamiento tipo Rashba dependiendo del material. Pero lo más importante es que ambos tipos de interacción espín-órbita representan un mecanismo fundamental por el cual se puede acceder al control del estado de espín de los electrones. Un estudio más detallado de las propiedades espectrales de estos hamiltonianos se llevará a cabo en el Capítulo 3.

2.5. Fenómenos espintrónicos

Existen diversas formas en que el espín del electrón y la interacción espín-órbita pueden ser utilizados para agregar nuevas capacidades y funcionalidades. Sin duda alguna el descubrimiento del efecto de la Magnetoresistencia Gigante marcó la primera pauta para que se comenzaran a desarrollar y comercializar los primeros dispositivos basados en la manipulación del espín de los electrones para llevar a cabo operaciones de procesamiento de información en materiales ferromagnéticos. De igual forma se han realizado novedosas propuestas como el transistor de espín de Datta y Das [23], el cual fue una de las primeras propuestas espintrónicas basadas en la modulabilidad del acoplamiento Rashba mediante voltajes de compuerta para conmutar la dirección de los espines en heteroestructuras semiconductoras. Un fenómeno muy interesante y reciente, fue la predicción teórica y posteriormente la comprobación experimental del efecto Hall de espín en estructuras semiconductoras. En el efecto Hall de espín se puede generar una corriente transversal de espín y una polarización de espín vía una corriente eléctrica, sin que se requieran campos magnéticos externos o materiales magnéticos. Similarmente, de central importancia resulta el fenómeno de orientación de espines vía campos eléctricos a través de la interacción espín-órbita, la cual produce una polarización neta de espín, vista como una magnetización inducida y no una corriente de espín como en el efecto Hall de espín. A continuación se presentan la descripción general y los aspectos más importantes de algunos de los principales fenómenos espintrónicos.

2.5.1. Magnetoresistencia gigante

En 1988 se llevó a cabo el descubrimiento del efecto de la Magnetoresistencia Gigante (*giant magnetoresistance*, GMR) [20] y con él se dio inicio al nuevo campo de la Espintrónica. Poco tiempo después, en 1994, se comenzaron a desarrollar y comercializar los primeros dispositivos cuyo funcionamiento está basado principalmente en este fenómeno, como los sensores de campo magnético y las memorias magnéticas de acceso aleatorio (MRAM), aunque su mayor aplicación hoy en día es en cabezas lectoras de grabación magnética de datos de alta densidad. Debido a la trascendencia de este descubrimiento, en 2007 se les otorgó el Premio Nobel de Física [21] a Albert Fert y Peter Grünberg por su descubrimiento. En sus experimentos realizados en multicapas de Fe/Co en presencia de campos magnéticos intensos, observaron un cambio en la resistencia mucho mayor que los cambios en la resistencia observados anteriormente, motivo por el cual a este

fenómeno se le nombró Magnetoresistencia Gigante (Figura 2.2).

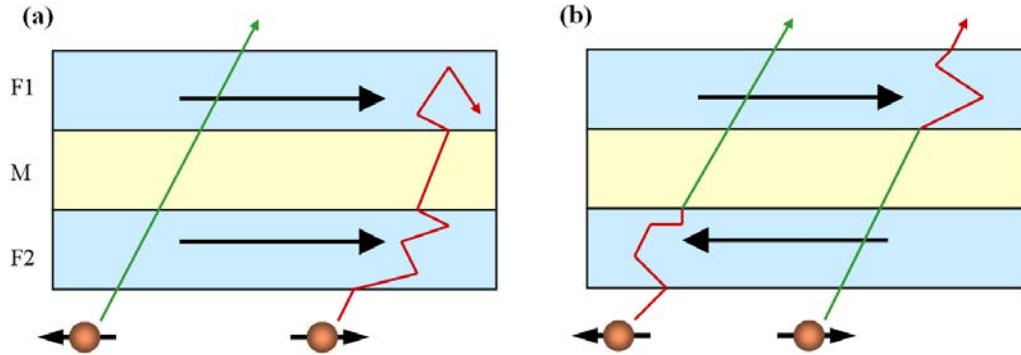


Figura 2.2: Representación esquemática de una estructura de tres capas: dos capas ferromagnéticas idénticas F1, F2, y en medio de ellas una capa de metal no-magnético M. (a) Cuando la magnetización de los ferromagnetos F1 y F2 es paralela, los electrones con espín hacia arriba (espín antiparalelo a la magnetización) pueden atravesar la estructura casi sin dispersión lo que produce una resistencia mínima. (b) Al contrario, en el caso antiparalelo, los electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo sufren dispersiones en ambos ferromagnetos F1 y F2, dando a lugar a una resistencia mayor [22].

Este efecto se observa en estructuras de películas delgadas formadas por capas alternadas de materiales ferromagnéticos y no magnéticos. Si la capa de un material no magnético separa dos capas ferromagnéticas, al hacer pasar una corriente eléctrica a través de la estructura, se puede cambiar la resistencia del material simplemente cambiando la dirección de magnetización de las capas ferromagnéticas. En materiales ferromagnéticos los electrones de conducción pueden tener espín hacia arriba si su espín es paralelo al momento magnético del ferromagneto o espín hacia abajo si es antiparalelo. En conductores no magnéticos hay un número igual de espines hacia arriba y espines hacia abajo en todas las bandas de energía. Por lo tanto, la probabilidad de que un electrón sufra procesos de dispersión cuando pasa a un conductor ferromagnético depende de la dirección de su espín. Para que los procesos de dispersión, que dependen del espín, sean una parte significativa de la resistencia total, las capas deben ser menores que la trayectoria libre de los electrones en el material en bulto. Cuando las capas ferromagnéticas tienen la misma dirección de magnetización (Figura 2.2a), los procesos de dispersión que dependen del espín se minimizan por lo tanto la resistencia del material es mínima. El caso contrario se presenta cuando la dirección de magnetización de las capas ferromagnéticas es antiparalela (Figura 2.2b), al hacer pasar una corriente a través de la estructura se produce un cambio en la resistencia eléctrica longitudinal y la resistencia del material es máxima.

2.5.2. Transistor de espín de efecto de campo

Poco tiempo después del descubrimiento de la GMR, en 1990 S. Datta y B. Das propusieron un novedoso transistor de efecto de campo [23]. El dispositivo propuesto por Datta y Das está constituido por una heteroestructura semiconductor, por ejemplo de InGaAl/InGaAs (Figura 2.3). En la interfaz se forma un GE2D, de tal forma que el movimiento de los electrones se encuentra confinado en la dirección de crecimiento, el eje \hat{z} , mientras que en el plano xy se mueven libremente. Este canal une a dos contactos ferromagnéticos que hacen la función de fuente y colector. La fuente actúa como inyector de espines y el colector como detector de espines. La fuente inyecta electrones con el espín polarizado, los cuales se mueven balísticamente a través del gas de electrones. En un canal pequeño el espín se conservaría hasta que el electrón llega al sumidero, pero si el espín se invierte durante su trayecto entonces tendría una probabilidad mayor de ser rechazado por el colector, contribuyendo de esta manera a que se incremente la resistencia. Sin embargo, en lugar de invertir el espín, lo que se desea es rotar de manera controlada el espín con un campo magnético. Más aún, si este campo magnético se pudiera controlar eléctricamente, se tendría un control eléctrico total sobre la conductancia. La idea principal del dispositivo consiste en controlar la precesión del espín vía el acoplamiento espín-órbita que se genera por la asimetría de inversión estructural, es decir el acoplamiento tipo Rashba [24]. El parámetro más importante que gobierna la precesión del espín es la constante de acoplamiento de Rashba α , la cual se puede modular mediante voltajes externos como se mencionó en la Sección 2.4.

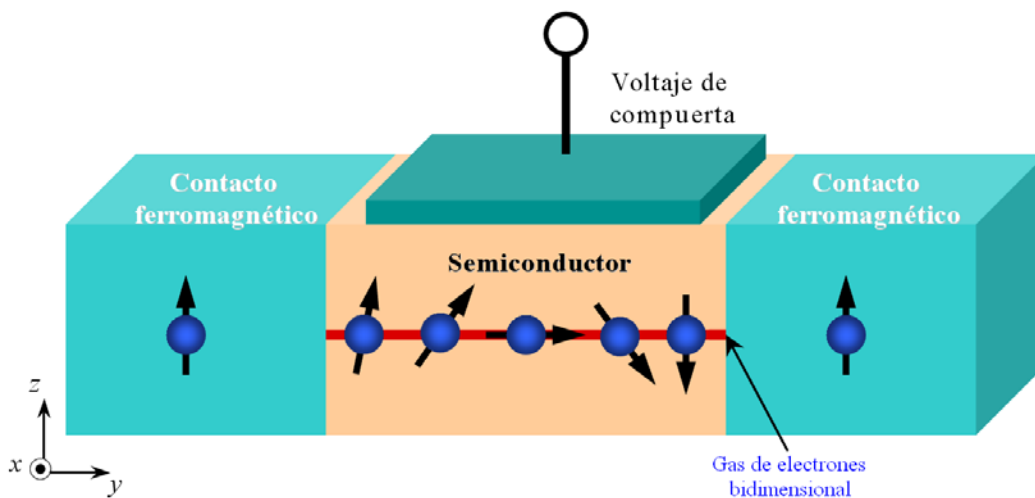


Figura 2.3: Transistor de espín de efecto de campo propuesto por Datta y Das.

Sin embargo, para que el transistor de espín sea una realidad, se deben cumplir cuatro requerimientos fundamentales: (1) lograr una *inyección* eficiente de espines polarizados sin pérdida de la polarización, (2) la *propagación* coherente del espín a través del dispositivo, (3) inducir de manera controlada la *precesión* del espín y (4) una *coleccion* selecta de espines. En este contexto, se han logrado algunos avances, ya que se ha probado experimentalmente que en semiconductores dopados la coherencia del espín se puede mantener durante periodos de tiempo del orden de 100 ns a bajas temperaturas, en escalas espaciales mayores a 100 μm [25]. Recientemente, Cheol et al. [24] han logrado integrar estos cuatro requerimientos en un sólo experimento; para ello realizaron mediciones no locales en una heteroestructura de InAs donde observaron la modulación periódica de la conductancia, controlada por la precesión (inducida por el voltaje de compuerta) de los espines inyectados. En una medición no local se utiliza un detector fuera de la trayectoria de la corriente de carga.

2.5.3. Efecto Hall de espín

Otro fenómeno de interés en presencia de la interacción espín-órbita es el llamado efecto Hall de espín. En 1971 M. D'yakonov y V. Perel' propusieron que el espín de los electrones puede generar una nueva versión del efecto Hall, con la diferencia de que ahora se considera el acoplamiento espín-órbita asociado al potencial de impurezas para que se lleve a cabo. En la corriente de espín propuesta por D'yakonov y Perel' los electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo se acumulan en los bordes opuestos de un canal conductor, análogo a la acumulación de carga que ocurre en el efecto Hall clásico. El término *efecto Hall de espín* fue realmente propuesto por J. Hirsch en 1999. Por otro lado, debido a que el proceso requiere impurezas para que se lleven a cabo procesos de dispersión, actualmente es denominado efecto Hall de espín *extrínseco* [26].

Sin embargo, en 2003, S. Murakami y un año después J. Sinova [15], predijeron que un fenómeno llamado efecto Hall de espín *intrínseco* puede ocurrir además del mecanismo extrínseco. La idea es que cuando se aplica un campo eléctrico, el campo magnético efectivo debido a la interacción espín-órbita produce una torca sobre el espín de los electrones que también puede producir una corriente de espín. La diferencia más importante entre el mecanismo extrínseco e intrínseco, es que el efecto Hall de espín intrínseco surge como resultado de la estructura cristalina del material, en ausencia de impurezas, mientras que el efecto Hall de espín extrínseco sólo ocurre en presencia de impurezas las cuales producen procesos de dispersión selectivos de espín.

Las primeras pruebas experimentales del efecto Hall de espín fueron realizadas por Kato et al. [28, 29] y Wunderlich et al. [30]. En el experimento de Kato et al. [29] reportaron por primera vez la observación del efecto Hall de espín en películas delgadas de GaAs y InGaAs. El experimento se basó en un efecto llamado rotación de Kerr, mediante el cual la polarización de un haz de luz linealmente polarizado rota cuando el haz se refleja sobre un material magnetizado. El ángulo de rotación es proporcional a la magnetización del material a lo largo de la dirección de propagación, de tal forma que al medir el ángulo de rotación de Kerr se puede determinar el número relativo de electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo presentes en los bordes de la muestra.

2.5.4. Orientación de espín por campos eléctricos

Resulta natural pensar en la aplicación de campos magnéticos como un posible medio para controlar el espín de los electrones. Producir campos magnéticos generalmente requiere materiales magnéticos. Si en lugar de eso, se usan campos eléctricos se podrían desarrollar dispositivos espintrónicos más pequeños y rápidos, los cuales serían más sencillos de fabricar por que los campos eléctricos se pueden confinar más fácilmente en regiones pequeñas. Sin embargo, los espines no responden a campos eléctricos bajo condiciones normales, es decir, que desde el punto de vista clásico, un momento magnético no se acopla con un campo eléctrico. En este contexto, como hemos venido diciendo, la interacción espín-órbita ofrece, en principio, una vía de acceso para el control eléctrico de los estados de espín. Esto se ve reflejado en el fenómeno de la orientación de espines electrónicos inducida por campos eléctricos (*current-induced spin polarization*, CISP), vía la interacción espín-órbita.

2.6. Polarización de espín inducida por un campo eléctrico

Este fenómeno, en el que se induce una orientación de momentos magnéticos (espines) como respuesta a un campo eléctrico vía el acoplamiento espín-órbita, es uno de los más estudiados en el activo campo de la Espintrónica. Sugerido hace tiempo, ha sido observado sólo recientemente [29, 31, 32, 33, 30] y es estudiado actualmente en una variedad de sistemas y condiciones. El campo eléctrico que se aplica en el plano de

un GE2D, actúa sobre portadores de carga en movimiento como un campo magnético intrínseco por medio del cual es posible orientar los espines [34].

En 1971 D'yakonov y Perel' [35] propusieron teóricamente, la posibilidad de inducir eléctricamente una polarización de espines en un semiconductor a través de la interacción espín-órbita. Posteriormente, D'yakonov y Kachorovskii [36] mostraron la importancia de la interacción espín-órbita en especial del acoplamiento Dresselhaus en semiconductores no centrosimétricos, al dar lugar a un mecanismo intrínseco de relajación de espín alternativo a otros mecanismos, como por ejemplo, los asociados al acoplamiento espín-órbita debido a iones o impurezas, o a la interacción hiperfina entre espines electrónicos y nucleares.

En 1990 Edelstein [34] demostró teóricamente que se puede generar una orientación del espín de los electrones de conducción al aplicar una corriente eléctrica a través de un GE2D con acoplamiento Rashba. De esta manera, se mostró la posibilidad de un efecto magneto-eléctrico en este tipo de sistemas a través del acoplamiento modulable de Rashba.

Recientemente, diversos trabajos teóricos han estudiado este fenómeno en gases de electrones bidimensionales con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se ha encontrado que la polarización de espín inducida por un campo eléctrico es anisotrópica, es decir, depende de la dirección del campo [37]. Asimismo, Chaplik et al. [38] mostraron que la contribución del acoplamiento Dresselhaus a la polarización de espín, depende de la dirección de crecimiento del pozo cuántico, mientras que la contribución del acoplamiento Rashba es independiente de dicha dirección. De igual forma se ha mostrado que es posible controlar la magnitud y dirección de la polarización de espín modulando la intensidad de los acoplamientos de Rashba y Dresselhaus [39].

Pese a que desde hace tres décadas trabajos teóricos mostraban la existencia de este fenómeno, no fue hasta hace algunos años que las primeras pruebas experimentales de este efecto fueron obtenidas en 2004 [32, 33]. En los experimentos realizados, se observó por primera vez la polarización de espín generada por una corriente eléctrica en heteroestructuras semiconductoras con interacción espín-órbita, utilizando métodos como fotoluminiscencia. De igual forma, este fenómeno fue observado por Kato et al [31] en semiconductores de InGaAs sometidos a esfuerzos. Recientemente, en 2006, Stern et al. [40] lograron observar este efecto a temperatura ambiente en capas de ZnSe, utilizando la técnica experimental de microscopía de rotación de Kerr.

No obstante, las investigaciones realizadas en este tema se han restringido predominantemente al caso de excitación con campos eléctricos estáticos. Sólo recientemente

algunos trabajos han considerado excitación con campos que oscilan a frecuencia finita [37, 41, 42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49]. Utilizando el formalismo de la teoría de la respuesta lineal, Erlingsson et al. [42] han estudiado el tensor de susceptibilidad de espín como función de la frecuencia, para un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. En su trabajo encontraron resonancias en la susceptibilidad de espín cuya posición depende de los valores relativos de las constantes de acoplamiento. En el mismo sistema, López-Bastidas et al. [41] reportan que la forma de los espectros de la función respuesta de densidad de espín, es resultado de la anisotropía angular del desdoblamiento de los estados de espín.

En un estudio hecho por Raichev [43] utiliza la ecuación cinética cuántica de la función de distribución de los electrones, que incorpora los procesos de dispersión por impurezas, para calcular el tensor de polarizabilidad de espín, en el límite de baja frecuencia. Reporta que para pozos cuánticos crecidos en la dirección [001], el tensor de polarizabilidad de espín es cero a cualquier frecuencia cuando los parámetros de Rashba y Dresselhaus son iguales, esto se debe a que en este caso existe una dirección fija de cuantización, esto quiere decir, que el campo espín-órbita no depende del momento de los electrones y por lo tanto los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan. También reporta que en pozos cuánticos crecidos en la dirección [110], cuando sólo hay acoplamiento Dresselhaus no se genera una polarización de espín para cualquier valor de la frecuencia. Además deriva relaciones entre la densidad de espín con otros fenómenos espintrónicos, tales como la conductividad de carga y la conductividad Hall de espín.

Por último, para ilustrar desde un punto de vista fenomenológico, cómo la aplicación de un campo eléctrico puede generar una polarización de espín, considere el desdoblamiento isotrópico de los estados de espín debido al acoplamiento Rashba. En equilibrio, los estados de espín están simétricamente distribuidos a la energía de Fermi (Figura 2.4a), de tal forma que no hay una polarización neta de espín. Si se aplica un campo eléctrico \mathbf{E} en el plano xy , la carga de los portadores fluye en la dirección del campo (Figura 2.4b) y los electrones adquieren un cuasi-momento promedio $\delta\mathbf{k}$, lo que da lugar a un desplazamiento de los contornos de Fermi dado por

$$\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \delta\mathbf{k} \quad \text{con} \quad \delta\mathbf{k} = \frac{e\tau_p}{\hbar} \mathbf{E}, \quad (2.5)$$

donde τ_p es el tiempo de relajación del momento y e la carga del electrón ($e < 0$). En la sub-banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ el campo eléctrico genera transferencia de cargas de $-k_x$ a k_x y de espín hacia arriba a espín hacia abajo, dando lugar a una corriente de carga y

una polarización de espín. La sub-banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ contribuye a la corriente de carga pero parcialmente cancela la polarización de espín [49]. De tal forma que un número diferente de espines hacia arriba y espines hacia abajo de portadores contribuyen a la corriente de espín, generando una polarización neta de espín [33].

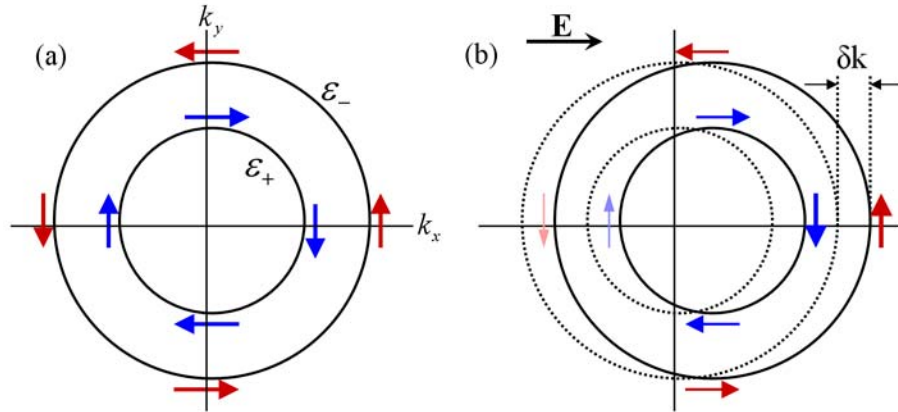


Figura 2.4: Contornos de Fermi para una distribución de los estados de espín (a) en equilibrio y en (b) respuesta a un campo eléctrico \mathbf{E} aplicado en el plano xy , donde $\delta\mathbf{k} = e\tau_p\mathbf{E}/\hbar$ [49]. Las flechas indican la dirección del espín.

Bibliografía

- [1] Nature Physics: *Milestones in Spin*, Marzo 2008. Editores: A. Trabesinger, A. Wright, S. Cantrill y A. Doerr.
- [2] L. De la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica* (UNAM-FCE, México, 2006).
- [3] Jean-Louis Basdevant, *Lectures on Quantum Mechanics* (Springer, New York, 2007).
- [4] P.A.M. Dirac, “The quantum theory of the electron”, Proc. Roy. Soc. A **117**, 610 (1928).
- [5] I. Zutic, J. Fabian y S. Das Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications”, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [6] G. A. Prinz, “Magnetoelectronics”, Science **282**, 1660 (1998).
- [7] S. A. Wolf, A. Y. Chtchelkanova y D. M. Treger, “Spintronics- A retrospective and perspective”, IBM J. Res. & Dev. **50**, 101 (2006).
- [8] A. Chtchelkanova, S. Wolf y Y. Idzerda, *Magnetic Interactions and Spin Transport* (Kluwer Academic, New York, 2003).
- [9] D. Grundler, “Spintronics”, Physics World, 39 (2002).
- [10] R. Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [11] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction* (Cambridge University, Cambridge, 1998).
- [12] F. Mireles y G. Kirczenow, “Coherent spin-valve phenomena and electrical spin injection in ferromagnetic/semiconductor/ferromagnetic junctions”, Phys. Rev. **66**, 214415 (2002).
- [13] M. Heide, G. Bihlmayer, Ph. Mavropoulos, A. Bringer y S. Blügel, “Spin-orbit driven physics at surfaces”, Psi-k Newsletter No.78: Scientific Highlight of the Month (2006).

- [14] G. Dresselhaus, “Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures”, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [15] Y.A. Bychkov y E.I. Rashba, “Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers”, *J. Phys. C* **17**, 6039 (1984).
- [16] J. Nitta, T. Akazaki y H. Takayanagi, “Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructure”, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
- [17] Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder y H. Lüth, “Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells for $B \rightarrow 0$ ”, *J. Appl. Phys.* **83**, 4324 (1998).
- [18] J. Nitta, T. Bergsten, Y. Kunihashi y M. Kohda, “Electrical manipulation of spins in the Rashba two dimensional electron gas systems”, *J. Appl. Phys.* **105**, 122402 (2009).
- [19] V.I. Perel’, S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel’kov y W. Prettl, “Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier”, *Phys. Rev. B* **67**, 201304 (2003).
- [20] M.N. Baibich, J.M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, F. Petroff, P. Eitenne, G. Creuzet, A. Friederich y J. Chazelas, “Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices”, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).
- [21] http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2007/
- [22] C. Chappert, A. Fert y F. Nguyen van Dau, “The emergence of spin electronics in data storage”, *Nature* **6**, 813 (2007).
- [23] S. Datta y B. Das, “Electronic analog of the electro-optic modulator”, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
- [24] H. Cheol, J. Hyun, J. Eom, J. Chang, S. Hee y M. Johnson, “Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor”, *Science* **325**, 1515 (2009).
- [25] D.D. Awschalom, D. Loss y N. Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Springer, Nueva York, 2002).
- [26] Hans-Andreas Engel, B.I. Halperin y E.I. Rashba, “ Theory of spin Hall conductivity in n -doped GaAs”, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 166605 (2005).
- [27] J. Sinova, D. Culcer, Q. Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth y A. H. MacDonald, “Universal intrinsic spin Hall effect”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126603 (2004).

- [28] Y.K. Kato, R.C. Myers, A. C. Gossard y D.D. Awschalom, “Observation of the spin Hall effect in semiconductors”, *Science* **306**, 1910 (2004).
- [29] V. Sih, R.C. Myers, Y.K. Kato, W.H. Lau, A.C. Gossard y D.D. Awschalom, “Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases”, *Nature Phys.* **1**, 31 (2005).
- [30] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova y T. Jungwirth, “ Experimental observation of the spin-Hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047204 (2005).
- [31] Y.K. Kato, R.C. Myers, A. C. Gossard y D.D. Awschalom, “Current-induced spin polarization in strained semiconductors”, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 176601 (2004).
- [32] A. Yu Silov, P. A. Blajnov, J. H. Wolter, R. Hey, H. Ploog y N. S. Averkiev, “Current-induced spin polarization at a single heterojunction”, *Appl. Phys. Lett.* **85**, 5929 (2004).
- [33] S.D. Ganichev, S.N. Danilov, Petra Schneider, V.V. Bel’kov, L.E. Golub, W. Wegscheider, D. Weiss y W. Prettl, “Can an electric current orient spins in quantum wells?”, *cond-mat/0403641v1* (2004).
- [34] V. M. Edelstein, “Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems”, *Solid State Commun.* **73**, 233 (1990).
- [35] M.I. D’yakonov y V.I. Perel’, “Possibility of orienting electron spins with current”, *JETP Lett.* **13**, 467 (1971); “Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors”, *Phys. Lett. A* **35**, 459 (1971).
- [36] M.I. D’yakonov y V.Yu Kachorovskii, “Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors”, *Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986).
- [37] M. Trushin y J. Schliemann, “Anisotropic current-induced spin accumulation in the two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **75**, 155323 (2007).
- [38] A. V. Chaplik, M. V. Entin, L. I. Magarill, “Spin orientation of electrons by electric field in 2D systems without inversion symmetry”, *Physica E* **13**, 744 (2002).
- [39] Z. Huang y L. Hu, “Controllable kinetic magnetoelectric effect in two-dimensional electron gases with both Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **73**, 113312 (2006).

- [40] N.P. Stern, S. Ghosh, G. Xiang, M. Zhu, N. Samarth y D.D. Awschalom, “Current-induced polarization and the spin Hall effect at room temperature”, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 126603 (2006).
- [41] C. López, J. Maytorena y F. Mireles, “Interplay of the Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling in the optical spin susceptibility of 2D electron systems”, *Phys. Stat. Sol. (c)* **4**, 4229 (2007).
- [42] S. I. Erlingsson, J. Schliemann y D. Loss, “Spin susceptibilities, spin densities, and their connection to spin currents”, *Phys. Rev. B* **71**, 035319 (2005).
- [43] O. E. Raichev, “Frequency dependence of induced spin polarization and spin current in quantum wells”, *Phys. Rev. B* **75**, 205340 (2007).
- [44] L.I. Magarill, A.V. Chaplik y M.V. Entin, “Spin response of 2D electrons to a lateral electric field”, *Low-Dimensional Systems* **35**, 1081 (2001).
- [45] E.I. Rashba, “Spin dynamics and spin transport”, *J. Supercond.* **18**, 137 (2005).
- [46] J.A. Maytorena, C. López-Bastidas y F. Mireles, “Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems”, *Phys. Rev. B* **74**, 235313 (2006).
- [47] V.V. Bryksin y P. Kleinert, “Dynamic magnetoelectric and charge-Hall effects in the Rashba-Dresselhaus model”, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 4937 (2006).
- [48] M. Pletyukhov y A. Shnirman, “Spin density induced by electromagnetic waves in a two-dimensional electron gas with both Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **79**, 033303 (2009).
- [49] R. H Silsbee, “Spin-orbit induced coupling of charge current and spin polarization”, *J. Phys.: Condens. Matter* **16**, R179-R207 (2004).

Capítulo 3

Interacción espín-órbita en heteroestructuras semiconductoras

En la Sección 2.4 se dió una breve descripción de la interacción espín-órbita presente en los gases de electrones bidimensionales que se forman en la interfaz de ciertas heteroestructuras semiconductoras. En este capítulo se presentan las propiedades del estado base de tal gas en presencia de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se muestran los Hamiltonianos del sistema y se realizan los cálculos para obtener las energías, espinores, contornos de Fermi, valor esperado del espín, densidad electrónica y densidad de estados. Se analizarán los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras crecidas en las principales direcciones cristalográficas: [001], [111] y [110].

En todos los casos se estudian las mismas propiedades físicas, por lo tanto el desarrollo de los cálculos es semejante y en muchas ocasiones sólo difieren por algunos parámetros. En particular, existen ciertas propiedades en las cuales no hay un cambio significativo cuando se considera uno u otro tipo de acoplamiento espín-órbita, tal es el caso de la densidad electrónica y la densidad de estados que en esencia presentan el mismo comportamiento físico. Por tal motivo, cuando así se requiera, se usarán como guía los resultados obtenidos en la Sección 3.3, para evitar ser repetitivos. Se trata así de realizar un estudio donde se presenten las principales diferencias, similitudes y cualidades de las propiedades electrónicas de los distintos casos.

3.1. Semiconductores sin simetría de inversión espacial

En la Sección 2.4 se comenzó a discutir la idea de asimetría de inversión espacial y cómo puede dar origen a distintos mecanismos de interacción espín-órbita, en especial, en semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda en ausencia de campos magnéticos externos, $\mathbf{B} = 0$.

La presencia conjunta de las simetrías de inversión espacial y temporal en semiconductores, en ausencia de un campo magnético, da como resultado una doble degeneración en el espín de los estados electrónicos. La simetría de inversión espacial invierte el vector de onda electrónico \mathbf{k} en $-\mathbf{k}$, y no altera el espín, de modo que para cada dirección de éste (espín hacia arriba \uparrow o espín hacia abajo \downarrow) la energía está degenerada; esto significa que para dos sub-bandas de energía denotadas por $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow)$ y $\varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$, se tiene que $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(-\mathbf{k}, \uparrow)$. Asimismo, la simetría de inversión temporal se manifiesta en la condición $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(-\mathbf{k}, \downarrow)$, esto es, impone que un estado con espín \uparrow y vector de onda \mathbf{k} está degenerado con el estado con espín \downarrow y vector de onda $-\mathbf{k}$, conocida como la degeneración de Kramers del estado de una sola partícula [1]. Por lo tanto, cuando ambas operaciones de simetría se combinan se obtiene la degeneración doble de la energía de una sola partícula, $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$, la cual establece que para cada \mathbf{k} la energía no depende del estado de espín. Existen dos formas de romper esta degeneración en el espín. Una de ellas es anular sólo la simetría de inversión temporal aplicando un campo magnético externo. La otra es cancelar la simetría de inversión espacial aplicando un campo eléctrico externo. La ausencia de simetría de inversión genera que $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) \neq \varepsilon(-\mathbf{k}, \uparrow)$, y por la simetría de inversión temporal se tiene que $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) \neq \varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$ [1]. Sin embargo, los semiconductores con estructura zincblenda son no centrosimétricos. Por lo tanto, en estos materiales se rompe la degeneración de los estados de espín incluso en la ausencia de cualquier campo externo.

3.2. Hamiltoniano de interacción espín-órbita

En un GE2D los electrones se encuentran confinados en un plano perpendicular a la dirección de crecimiento de la heteroestructura y sólo pueden moverse de manera libre en el plano del gas (Figura 2.1b). La interacción espín-órbita en estos materiales es mucho mayor que la que sienten los electrones libres en el vacío. De tal forma que el

Hamiltoniano H de un electrón que se encuentra en el gas se puede escribir como

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + H_{so} . \quad (3.1)$$

El término de la energía cinética es el resultado del movimiento libre de los electrones en el plano xy del gas, suponiendo que $\hat{\mathbf{z}}$ es la dirección de crecimiento. H_{so} es el término que describe la interacción espín-órbita en el GE2D. El vector $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda bidimensional del electrón. El acoplamiento espín-órbita actúa sobre el espín de los electrones como un campo magnético efectivo $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ que depende del vector de onda \mathbf{k} y alrededor del cual el espín del electrón precesa. Usualmente este campo efectivo recibe el nombre de *campo espín-órbita*. La interacción del espín con el campo $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ da como resultado un Hamiltoniano que se puede representar como uno de tipo Zeeman

$$H_{so} = \frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (3.2)$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli¹. Escrito así, el Hamiltoniano (3.2) representa el acoplamiento entre el momento magnético $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ asociado al espín del electrón y un campo magnético efectivo $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$. El Hamiltoniano (3.1) se puede escribir en forma matricial como

$$H = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar}{2} \Omega_z & \frac{\hbar}{2} (\Omega_x - i\Omega_y) \\ \frac{\hbar}{2} (\Omega_x + i\Omega_y) & \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{\hbar}{2} \Omega_z \end{pmatrix} . \quad (3.3)$$

Al resolver la ecuación de eigenvalores

$$\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right] \psi_\lambda(\mathbf{k}) = \varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) \psi_\lambda(\mathbf{k}) \quad (3.4)$$

se obtienen los valores propios de la energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$, dados por

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \frac{\hbar}{2} |\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})| , \quad \lambda = \pm 1 \quad (3.5)$$

donde $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$. Este espectro de energía tiene la forma de sub-bandas determinadas por el índice $\lambda = \pm 1$. El doble signo de las soluciones muestra que la presencia del campo espín-órbita rompe la degeneración de los estados de espín para vectores de onda finitos ($\mathbf{k} \neq 0$). De (3.5) se puede ver que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar |\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})|$.

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

Los eigenestados $\psi_\lambda(\mathbf{k})$ obtenidos al resolver la ecuación (3.4) están dados por

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = |\lambda\mathbf{k}\rangle = \sqrt{\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{\Omega_x + i\Omega_y}{\Omega + \lambda\Omega_z} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

donde $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$. Nótese que $\psi_\lambda(\mathbf{k})$ es un espinor de dos componentes.

Por otro lado, si $\Omega_x = \Omega_y = 0$, H se vuelve diagonal y los eigenestados están determinados por $|\Omega_z|$,

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = \Theta(\Omega_z) u_\lambda + \Theta(-\Omega_z) u_{-\lambda}, \quad (3.7)$$

donde $\Theta(\Omega_z)$ es la función escalón unitaria y u_λ están dados por

$$u_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad u_- = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.8)$$

de modo que (3.7) también se puede escribir como²

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + \lambda \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \text{sgn}(\Omega_z). \quad (3.9)$$

La orientación del espín en el estado $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ depende del vector de onda \mathbf{k} y está dada por el valor esperado del vector $\boldsymbol{\sigma}$ de las matrices de espín de Pauli, esto es,

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda &\equiv \frac{\hbar}{2} \langle \lambda\mathbf{k} | \boldsymbol{\sigma} | \lambda\mathbf{k} \rangle \\ &= \lambda \frac{\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})}{|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Este resultado indica que para una energía constante E , $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda \parallel \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ con \mathbf{k} tales que $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = E$. Por esta razón es posible interpretar la interacción espín-órbita como un campo magnético efectivo $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ al que se alinean los espines y que causa un desdoblamiento de los estados de espín tipo Zeeman pero en el espacio \mathbf{k} .

Si existiera una dirección de cuantización fija para todos los valores de \mathbf{k} , en consecuencia habría una magnetización macroscópica orientada a lo largo de esa dirección. Sin embargo, esto no es posible debido a que la magnitud y dirección de $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ varían con \mathbf{k} , esto significa que para un vector de onda dado es posible encontrar una direc-

²La función sgn vale 1 si $k_x > 0$ y -1 si $k_x < 0$.

ción *local* en el espacio \mathbf{k} para la orientación del espín. Al promediar sobre todas las contribuciones de $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda$ se obtiene

$$\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = 0 . \quad (3.11)$$

Este resultado refleja el hecho de que el campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ produce un número igual de estados con espín hacia ‘arriba’ y espín hacia ‘abajo’, por lo tanto la interacción espín-órbita no genera una polarización espontánea de espín. Por el contrario, si se aplica un campo magnético externo al sistema, en este caso, efectivamente, se induce una magnetización y una polarización de espín.

El campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ está determinado por el tipo de acoplamiento espín-órbita, y en presencia del acoplamiento lineal de Dresselhaus también dependerá de la dirección de crecimiento del pozo cuántico (para pozos muy angostos). Por tal motivo, en las siguientes secciones se estudian en detalle las propiedades electrónicas de un gas de electrones bidimensional en presencia del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus para las principales direcciones cristalográficas de crecimiento $[hkl]$. Se analizan primero cada uno de los tipos de acoplamiento por separado y posteriormente la presencia simultánea de ambos.

3.3. Acoplamiento espín-órbita de Rashba

De acuerdo a (2.3), el Hamiltoniano con acoplamiento Rashba para un electrón está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) , \quad (3.12)$$

de este Hamiltoniano se obtiene que el campo espín-órbita es de la forma

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k}) = \alpha \left(\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}} \right) . \quad (3.13)$$

Este resultado indica que $\mathbf{k} \perp \boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k})$. Además, ambos vectores se encuentran en el plano xy del GE2D. Este hecho será importante cuando se analice la orientación del espín en la Sección 3.6.

Espectro de energía

Los valores propios de la energía (3.5) obtenidos al calcular la magnitud de (3.13) son

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \alpha k, \quad (3.14)$$

los cuales sólo dependen del parámetro α y de $k = |\mathbf{k}|$. La forma de las sub-bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ se puede ver con mayor claridad si (3.14) se escribe como

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k + \lambda k_\alpha)^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} k_\alpha^2, \quad (3.15)$$

aquí se ha introducido el vector de onda de Rashba k_α , definido como $k_\alpha = m^* \alpha / \hbar^2$. De esta manera, la expresión (3.15) representa la ecuación de dos superficies que se parecen dos paraboloides desplazados, que están igualmente separados en las distintas direcciones en el espacio \mathbf{k} , es decir, dispersiones isotrópicas en tanto que sólo dependen de la magnitud de \mathbf{k} y no de su dirección (Figura 3.1a). La energía característica $\varepsilon_R \equiv \hbar^2 k_\alpha^2 / 2m^*$ determina la profundidad de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (Figura 3.1b). Esta energía toma típicamente valores entre $\varepsilon_R = 0.1-1.0$ meV, para valores de α del orden de 10^{-11} eVm [2].

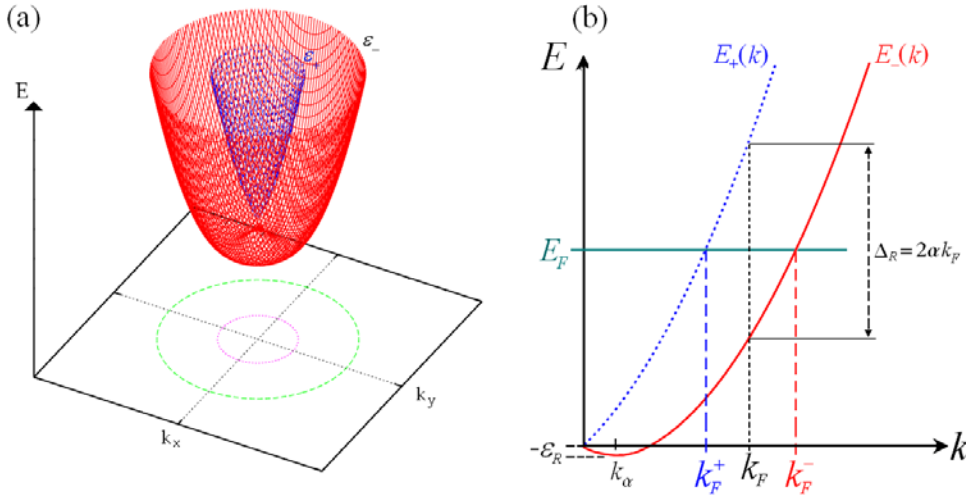


Figura 3.1: (a) Esquemas de las sub-bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ de un GE2D con acoplamiento Rashba. (b) Al nivel de Fermi se tienen dos vectores de Fermi característicos k_F^+ y k_F^- , donde $k_F^+ < k_F^-$. El desdoblamiento de los estados de espín está determinado por la cantidad $\Delta_R = 2\alpha k_F$. La profundidad de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ está dada por $\varepsilon_R = \hbar^2 k_\alpha^2 / 2m^*$.

Vectores de Fermi

En el estado base, es decir a temperatura absoluta $T = 0$, las sub-bandas $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ están llenas hasta la misma energía de Fermi $\varepsilon_F > 0$. A la curva de energía constante determinada por $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$, se le conoce como *contorno de Fermi*. Al nivel de Fermi cada sub-banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ tiene un vector de onda distinto, k_F^+ y k_F^- respectivamente (Figura 3.1b), determinados por la condición $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^\lambda)$, de donde

$$k_F^\lambda = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}\varepsilon_F + k_\alpha^2} - \lambda k_\alpha = \sqrt{k_F^2 + k_\alpha^2} - \lambda k_\alpha, \quad (3.16)$$

donde $k_F = \sqrt{2m^*\varepsilon_F/\hbar^2}$. En este caso, las dispersiones son isotrópicas y los contornos de Fermi son círculos concéntricos (Figura 3.1a). La separación entre las sub-bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, está dada por $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = 2\alpha k$.

Es común definir $\Delta_R \equiv 2\alpha k_F$, conocida como energía de desdoblamiento de los estados de espín (Figura 3.2b), que como veremos más adelante (Sección 3.7), $k_F = \sqrt{2\pi n - 2k_\alpha^2}$, y por tanto $\Delta_R = 2\alpha\sqrt{2\pi n - 2k_\alpha^2}$, donde n es la densidad electrónica. Por ejemplo, en pozos cuánticos de InGaAs y InAs donde se han encontrado valores experimentales de α en un rango entre 0.6 y 4×10^{-11} eVm, se tienen energías de desdoblamiento del orden de $\Delta_R = 1 - 5$ meV [3]. Mientras que la energía de Fermi es del orden de $\varepsilon_F = 20 - 50$ meV, para densidades electrónicas de 5×10^{11} a 10^{12} cm $^{-2}$ [4].

3.4. Acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus

3.4.1. Hamiltoniano espín-órbita de Dresselhaus

En 1954, Dresselhaus et al. [5] realizaron uno de los primeros estudios en los que se propuso que el acoplamiento espín-órbita (2.1) puede tener consecuencias importantes en los niveles de energía de un electrón en un semiconductor cristalino en el bulto. Un año después, Parmenter [6] y Dresselhaus [7], estudiaron los efectos de la interacción espín-órbita en una estructura cristalina tipo zincblenda. En sus investigaciones encontraron que la asimetría de inversión espacial de la estructura zincblenda da origen a una contribución espín-órbita a la energía, que produce un rompimiento en la degeneración de los estados electrónicos y de los huecos con vector de onda $\mathbf{k} \neq 0$, incluso en ausencia de algún campo magnético externo. Por el contrario, en los cristales con simetría de inversión como el Si y Ge, se tiene una doble degeneración de los estados de espín para

cualquier vector de onda \mathbf{k} .

La teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y la teoría de invariantes, son algunos de los principales métodos utilizados en el estudio de la estructura de bandas de los estados electrónicos [1]. Se ha encontrado que para electrones en la banda de conducción, la contribución al Hamiltoniano espín-órbita de menor orden en \mathbf{k} está dada por

$$H_D^{3d} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)] , \quad (3.17)$$

donde γ es un parámetro efectivo de acoplamiento [7] y $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$. En semiconductores con estructura zincblenda como el GaAs se han encontrado valores de $\gamma = 24 \text{ eV}\text{\AA}^3$, mientras que en InAs $\gamma = 130 \text{ eV}\text{\AA}^3$ [8]. El desdoblamiento de los estados de espín generado en estos sistemas es proporcional a k^3 , a diferencia del producido por el acoplamiento Rashba el cual es lineal en k .

Si ahora el semiconductor cristalino se reduce a un sistema cuasi-bidimensional, en el cual se forma un pozo cuántico, la componente del vector de onda normal al pozo se cuantiza como $k_z \sim (\pi/L_z)$, donde L_z es el ancho del pozo, de tal forma que los electrones sólo se pueden mover libremente en el plano xy . Si el pozo cuántico es suficientemente angosto (7 – 15 nm) de modo que $(\pi/L_z) \gg k_{||}$, entonces el desdoblamiento de los estados de espín producido por la asimetría de inversión en el bulto será proporcional a $\Delta_D^{3d} \sim \gamma(\pi/L_z)^2 k_{||}$ [9, 10]. En esta clase de sistemas, el acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus es sensible a la orientación de crecimiento del pozo. Por tal motivo, en las siguientes secciones se analizarán las propiedades electrónicas de un GE2D que se forma en un pozo cuántico crecido en la dirección $[hkl]$. En particular se considerarán pozos crecidos en las direcciones: [001], [111] y [110]. Se utilizará la notación Dresselhaus $[hkl]$ o D $[hkl]$ para indicar la dirección cristalográfica considerada.

3.4.2. Dresselhaus[001]

En pozos cuánticos suficientemente angostos crecidos en la dirección [001] ($x || [100]$, $y || [010]$, $z || [001]$), las componentes del vector de onda normal al plano del gas se promedian, esto es, $k_z \rightarrow \langle \widehat{k}_z \rangle = \langle i\partial_z \rangle = 0$ y $k_z^2 \rightarrow \langle \widehat{k}_z^2 \rangle$, de modo que (3.17) se reduce a

$$H_D^{[001]} = \gamma [k_y \langle k_z^2 \rangle \sigma_y - k_x \langle k_z^2 \rangle \sigma_x] + \gamma [k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y] . \quad (3.18)$$

Para $\mathbf{k}_{||}$ pequeños, el término lineal en $\mathbf{k}_{||}$ se vuelve dominante frente al término cúbico. De tal forma que el Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[001] lineal en $\mathbf{k}_{||}$ está

dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \beta_{[001]} (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) , \quad (3.19)$$

donde $\beta_{[001]} = \gamma \langle \widehat{k_z^2} \rangle$. Para abreviar, en lo que sigue escribimos $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{||} = (k_x, k_y)$, de tal manera que el campo espín-órbita es de la forma

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k}) = \beta_{[001]} (-k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}) . \quad (3.20)$$

Es importante notar que a diferencia del acoplamiento Rashba donde $\mathbf{k} \perp \boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k})$, el campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k})$ no es perpendicular a \mathbf{k} . No obstante, las relaciones de dispersión son similares, esto es

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \beta_{[001]} k . \quad (3.21)$$

De la misma forma, (3.21) puede escribirse como en (3.15) sólo haciendo el cambio $k_\alpha \rightarrow k_{\beta_{[001]}}$, donde $k_{\beta_{[001]}} = m^* \beta_{[001]} / \hbar^2$. El resultado anterior indica que el acoplamiento Dresselhaus[001] produce un desdoblamiento de los estados de espín dado por $\Delta_D^{[001]} = 2\beta_{[001]} k_F$, similar a Δ_R (Figura 3.1).

De lo estudiado con anterioridad en la Sección 3.3, se sabe que $\alpha = 0.6-4.0 \times 10^{-11} \text{ eV m}$ en pozos cuánticos de InGaAs y InAs, mientras que en GaAs es un orden de magnitud menor [2]. Con base en estos valores de α , resulta conveniente e ilustrativo comparar la magnitud de los parámetros α y $\beta_{[001]}$ a través de su razón, es decir, $\alpha/\beta_{[001]}$, esto permite tener una idea de cual es el acoplamiento espín-órbita dominante en un determinado material semiconductor. Por ejemplo, se ha demostrado tanto en trabajos teóricos como experimentales que en pozos cuánticos de InAs el acoplamiento Rashba es el dominante debido a que $\alpha/\beta_{[001]} = 2.15$, mientras que en pozos de InGaAs se obtienen valores de $\alpha/\beta_{[001]} = 1.5-1.85$ [11]. En cambio, en pozos cuánticos de GaAs el parámetro $\beta_{[001]}$ llega a ser un orden de magnitud mayor que α , esto es, $\alpha/\beta_{[001]} = 0.1$ [2].

3.4.3. Dresselhaus[110]

En un pozo cuántico crecido en la dirección [110] ($x \parallel [\bar{1}10]$, $y \parallel [001]$, $z \parallel [110]$), el Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[110] lineal en \mathbf{k} (ver Apéndice A) está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \beta_{[110]} k_x \sigma_z , \quad (3.22)$$

donde $\beta_{[110]} = -\gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle / 2$ [12, 13, 14, 15, 16, 17]. De tal forma que

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) = \beta_{[110]} k_x \hat{\mathbf{z}} . \quad (3.23)$$

En este caso $\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) \perp \mathbf{k}$, pero además es perpendicular al plano xy del gas de electrones. Esto refleja una diferencia significativa con respecto a $\boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k})$ y $\boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k})$, los cuales sólo tiene componentes en el plano del gas.

Las relaciones de dispersión están dadas por

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \beta_{[110]} |k_x| . \quad (3.24)$$

Una forma más conveniente de escribir (3.24) es introduciendo el ángulo polar θ del vector de onda \mathbf{k} en el plano xy , esto es, $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = k (\cos \theta, \sin \theta)$, por consiguiente

$$\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \beta_{[110]} k |\cos \theta| . \quad (3.25)$$

La dependencia angular en (3.25) tiene como consecuencia que el desdoblamiento de los estados de espín se vuelva anisotrópico, dado que $\Delta_D^{[110]} = 2\beta_{[110]} k_F |\cos \theta|$. Nótese que en $\theta = \pi/2$ o $3\pi/2$, $\Delta_D^{[110]} = 0$, esto quiere decir que los estados de espín están degenerados. Por el contrario, en $\theta = 0$ o π , la separación entre las sub-bandas adquiere su valor máximo $\Delta_D^{[110]} = 2\beta_{[110]} k_F$. Estos resultados pueden apreciarse en la Figura 3.2.

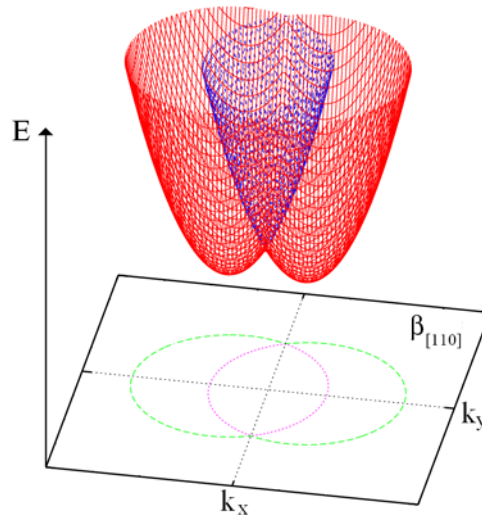


Figura 3.2: Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento Dresselhaus[110].

3.5. Acoplamiento conjunto: Rashba+Dresselhaus[hkl]

En las Secciones 3.3 y 3.4 se discutieron los acoplamientos Rashba y Dresselhaus[hkl] por separado. Mientras que el acoplamiento Dresselhaus[hkl] es esencialmente una propiedad intrínseca del material, el acoplamiento Rashba se puede modificar por voltajes de compuerta. Sin embargo, la importancia de estos dos mecanismos varía dependiendo del material, su geometría particular y la densidad electrónica. Por tal motivo, en las siguientes secciones se estudia cómo la presencia de ambos acoplamientos cambia las propiedades espectrales, a diferencia del caso cuando está presente sólo un tipo de acoplamiento. En lo que sigue, se utilizará la notación compacta R+D[hkl] para indicar la presencia conjunta de los acoplamientos tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl].

3.5.1. Rashba+Dresselhaus[111]

En un pozo cuántico crecido en la dirección [111] ($x \parallel [11\bar{2}]$, $y \parallel [\bar{1}10]$, $z \parallel [111]$), el Hamiltoniano de interacción espín-órbita R+D[111] está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \tilde{\alpha} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) , \quad (3.26)$$

donde $\tilde{\alpha} \equiv \alpha + \beta_{[111]}$ y $\beta_{[111]} = \frac{2}{\sqrt{3}} \gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle$ [12, 13]. Nótese que el Hamiltoniano (3.26) es formalmente idéntico al Hamiltoniano de Rashba (3.12). Por lo tanto, en general, todos los resultados derivados en la Sección 3.3 para el caso donde sólo hay acoplamiento Rashba se mantienen, sólo es necesario hacer la sustitución del parámetro $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$.

3.5.2. Rashba+Dresselhaus[001]

De acuerdo a lo estudiado en las Secciones 3.3 y 3.4.2, el Hamiltoniano de interacción espín-órbita R+D[001] está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta_{[001]} (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) , \quad (3.27)$$

y de aquí

$$\frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega}_{RD}^{[001]}(\mathbf{k}) = \alpha (k_y \hat{\mathbf{x}} - k_x \hat{\mathbf{y}}) + \beta_{[001]} (-k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}) . \quad (3.28)$$

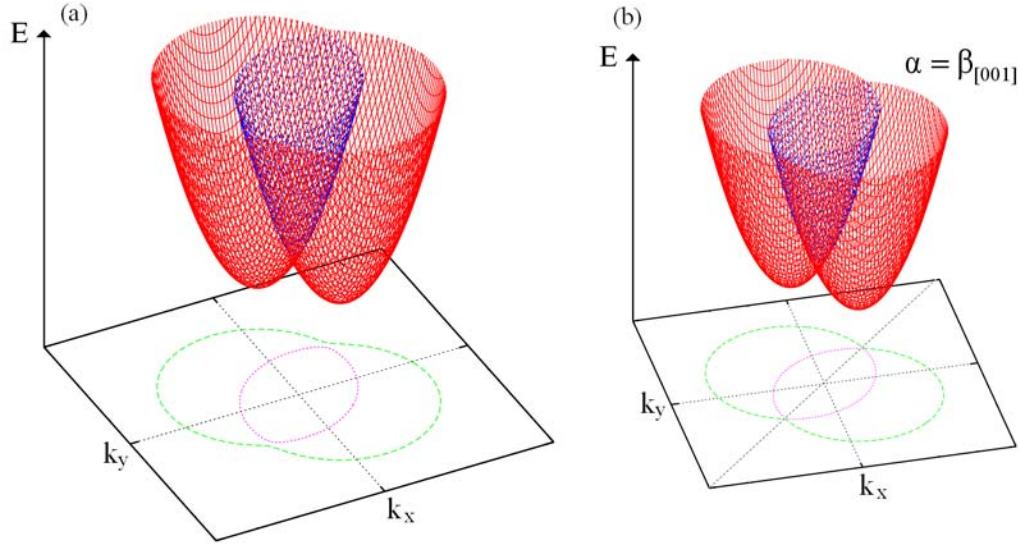


Figura 3.3: Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[001], cuando (a) $\alpha \neq \beta_{[001]}$ y (b) $\alpha = \beta_{[001]}$.

De esta manera, las relaciones de dispersión están dadas por

$$\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \sqrt{(\alpha k_y - \beta_{[001]} k_x)^2 + (\beta_{[001]} k_y - \alpha k_x)^2} . \quad (3.29)$$

Es posible escribir la expresión anterior en coordenadas polares como

$$\varepsilon_{\lambda}(k, \theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda k \Delta(\theta) , \quad (3.30)$$

donde se ha definido la función angular

$$\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \sin 2\theta} . \quad (3.31)$$

Esta función indica claramente que el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico (Figura 3.3a). Sólo cuando $\alpha \neq 0$ y $\beta_{[001]} = 0$ (3.14), o $\alpha = 0$ y $\beta_{[001]} \neq 0$ (3.21), la separación entre las sub-bandas es isotrópica, es decir, cuando $\Delta(\theta)$ es constante. En el caso particular cuando $\alpha = \beta_{[001]}$, el Hamiltoniano (3.27) se reduce a

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha (k_y - k_x) (\sigma_x + \sigma_y) , \quad (3.32)$$

de modo que

$$\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda\sqrt{2}\alpha k |\sin \theta - \cos \theta| . \quad (3.33)$$

Del resultado anterior se puede ver que en $\theta = \pi/4$ o $5\pi/4$, los estados de espín están degenerados. En este caso los contornos de Fermi son dos círculos que tienen el mismo radio y están desplazados del origen, como se muestra en el plano $k_x - k_y$ en la Figura 3.3b. Un comportamiento similar ocurre en el caso con acoplamiento Dresselhaus[110] estudiado en la Sección 3.4.2 (Figura 3.2).

3.5.3. Rashba+Dresselhaus[110]

Ahora se considera la presencia conjunta de la interacción espín-órbita R+D[110]. En este caso, el Hamiltoniano está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta_{[110]} k_x \sigma_z , \quad (3.34)$$

de modo que

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_{RD}^{[110]}(\mathbf{k}) = \alpha (k_y \hat{\mathbf{x}} - k_x \hat{\mathbf{y}}) + \beta_{[110]} k_x \hat{\mathbf{z}} . \quad (3.35)$$

Las relaciones de dispersión están dadas por

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \lambda \sqrt{(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2) k_x^2 + \alpha^2 k_y^2} , \quad (3.36)$$

o bien, en coordenadas polares como en (3.30) donde ahora $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta}$. De nueva cuenta, la función angular $\Delta(\theta)$ indica que el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico (Figura 3.4).

3.6. Orientación del espín de los estados electrónicos

Es esta sección se estudiará la orientación del espín $\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda$ de los estados electrónicos en presencia del acoplamiento tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl].

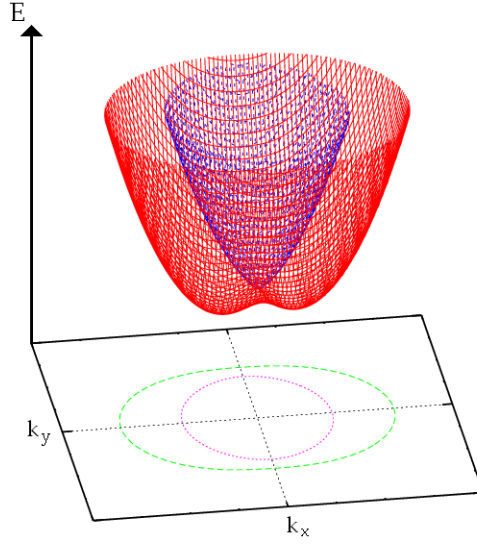


Figura 3.4: Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[110].

Acoplamiento R+D[001]

Puesto que $\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}_R(\mathbf{k}) = \alpha(k_y\hat{\mathbf{x}} - k_x\hat{\mathbf{y}})$, los espinores $\psi_\lambda^R(\mathbf{k})$ asociados al acoplamiento Rashba se pueden determinar a partir de (3.6),

$$\psi_\lambda^R(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{k_y - ik_x}{k} \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

o bien, escritos en términos del ángulo polar como

$$\psi_\lambda^R(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i\lambda e^{i\theta} \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

De tal forma que la orientación del espín (3.10) está dada por

$$\frac{\hbar}{2}\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\lambda = \lambda \frac{\hbar}{2} (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}). \quad (3.39)$$

En la Figura 3.5a se muestra la orientación del espín (3.39) sobre contornos de energía constante en el plano $k_x - k_y$. De (3.39), se puede ver que $\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\lambda \perp \mathbf{k}$.

Similarmente, usando (3.6) y (3.20), los espinores correspondientes al acoplamiento Dresselhaus[001] son

$$\psi_\lambda^D(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -\lambda e^{-i\theta} \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

de modo que

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = \lambda \frac{\hbar}{2} (-\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}}). \quad (3.41)$$

Si $\mathbf{k} \parallel [100]$ ($\theta = 0$), de (3.41) se obtiene que el espín está orientado en la dirección $-\lambda \hat{\mathbf{x}}$. Cuando $\mathbf{k} \parallel [010]$ ($\theta = \pi/2$) la orientación del espín es a lo largo de $\lambda \hat{\mathbf{y}}$. Sólo cuando $\mathbf{k} \parallel [110]$ ($\theta = \pi/4$), $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda \perp \mathbf{k}$. En la Figura 3.5b claramente se observa que la orientación del espín producida por el acoplamiento Dresselhaus[001] es distinta a la del acoplamiento Rashba (Figura 3.5a). Aún cuando en las expresiones (3.14) y (3.21) se mostró que el acoplamiento Rashba y Dresselhaus[001] producen aparentemente el mismo desdoblamiento de los estados de espín, las correspondientes $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda$ son cualitativamente distintas debido a las diferentes simetrías de los campos espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k})$ y $\boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k})$.

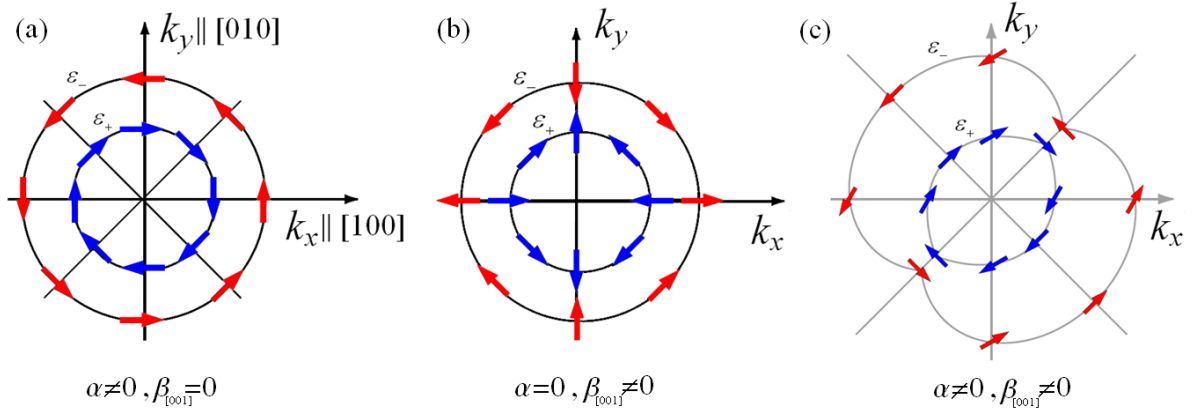


Figura 3.5: Distribución de la orientación del espín en el estado $|\lambda \mathbf{k}\rangle$ para el caso con acoplamiento (a) Rashba, (b) Dresselhaus[001] y (c) R+D[001] [11].

Si están presentes ambos acoplamientos, los espinores están dados por

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}, \quad (3.42)$$

donde $\phi(\mathbf{k})$ está definido como

$$\tan \phi(\mathbf{k}) = \frac{\beta_{[001]}k_y - \alpha k_x}{\alpha k_y - \beta_{[001]}k_x}. \quad (3.43)$$

Por lo tanto la orientación del espín está descrita por

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda &= \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta(\theta)} \left[(\alpha - \beta_{[001]} \sin 2\theta) (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) - \beta_{[001]} \cos 2\theta \hat{\mathbf{k}} \right] \\ &= \lambda \frac{\hbar}{2} (\cos \phi \hat{\mathbf{x}} - \sin \phi \hat{\mathbf{y}}). \end{aligned} \quad (3.44)$$

En la Figura 3.5c se muestra la distribución de la orientación del espín (3.44). Se puede observar que la presencia conjunta del acoplamiento Rashba y Dresselhaus[001] representa un cambio significativo sobre la distribución de la orientación del espín en comparación con el caso isotrópico (sólo Rashba o Dresselhaus[001]).

Acoplamiento R+D[110]

Puesto que $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) = \beta_{[110]} k_x \hat{\mathbf{z}}$, los espinores correspondientes están dados por (3.9), los cuales a su vez están determinados por $|k_x|$. El hecho de que $\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) \parallel \hat{\mathbf{z}}$, anticipa que el espín electrónico también debe estar orientado fuera del plano del gas. En forma general se tiene que

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = \lambda \frac{\hbar}{2} \operatorname{sgn}(k_x) \hat{\mathbf{z}}. \quad (3.45)$$

En este caso la orientación del espín sólo tiene componentes a lo largo de la dirección $\pm \hat{\mathbf{z}}$. Este resultado es totalmente distinto al obtenido en el caso del acoplamiento Rashba y del acoplamiento Dresselhaus[001], en donde el espín está orientado sólo en el plano $x - y$ del gas de electrones.

Cuando están presentes ambos acoplamientos (R+D[110]), los espinores son

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\Delta(\theta) + \lambda \beta_{[110]} \cos \theta}{2 \Delta(\theta)}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi(\mathbf{k})} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (3.46)$$

donde $\tan \varphi(\mathbf{k}) = \tan(\theta + \pi/2) = -k_x/k_y$. De tal forma, que el valor esperado del espín

está dado por

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = \lambda \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta(\theta)} \left[\alpha \left(\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}} \right) + \beta_{[110]} \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \right] . \quad (3.47)$$

Cabe resaltar que se han realizado importantes observaciones de fenómenos espintrónicos en heteroestructuras semiconductoras crecidas en la dirección [110]. Uno de los primeros trabajos fue realizado por Sih et al. [18] en 2005, en el cual observaron el fenómeno de la polarización de espines como respuesta a un campo eléctrico y el efecto Hall de espín. En este trabajo formaron un GE2D en un pozo cuántico simétrico de AlGaAs crecido en la dirección [110], motivados por el hecho de que estudios teóricos establecen que el acoplamiento Dresselhaus[110] da lugar a una polarización de espines perpendicular al plano del gas electrones, esta característica permitió observar estos fenómenos utilizando la técnica experimental de microscopía de rotación de Kerr.

3.7. Densidad electrónica

La densidad electrónica n_λ , definida como el número de electrones por unidad de área contenidos dentro de los contornos de Fermi, está determinada por

$$n_\lambda = \int_0^{k_F^\lambda} \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) . \quad (3.48)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón unitaria. Con base en los resultados obtenidos en las secciones anteriores, es posible escribir las relaciones de dispersión en forma general como

$$\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left(k + \lambda k_{so}^2(\theta) \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{so}^2(\theta) , \quad (3.49)$$

donde $k_{so}(\theta) \equiv m^* \Delta(\theta) / \hbar^2$. La diferencia entre los distintos casos la determina la función $\Delta(\theta)$. Cuando se tiene acoplamiento isotrópico, $\Delta(\theta)$ es constante, esto es

$$\Delta(\theta) = \begin{cases} \alpha & \text{R} \\ \tilde{\alpha} & \text{R + D[111]} \\ \beta_{[001]} & \text{D[001]} \end{cases} \quad (3.50)$$

Mientras que el acoplamiento anisotrópico está dado por

$$\Delta(\theta) = \begin{cases} \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta} & \text{R + D[001]} \\ \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta} & \text{R + D[110]} \\ \beta_{[110]} |\cos \theta| & \text{D[110]} \end{cases} \quad (3.51)$$

A partir de la condición $\varepsilon_\lambda(k_F^\lambda(\theta), \theta) = \varepsilon_F$, es posible escribir los vectores de Fermi característicos $k_F^+(\theta)$ y $k_F^-(\theta)$ como

$$k_F^\lambda(\theta) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \varepsilon_F + k_{so}^2(\theta)} - \lambda k_{so}(\theta) . \quad (3.52)$$

Al sustituir estos vectores de Fermi en la ecuación (3.48) escrita en coordenadas polares, se obtiene

$$\begin{aligned} n_\lambda &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{k_F^\lambda(\theta)} k dk d\theta \\ &= \frac{1}{4\pi} (k_F^2 + 2q_{so}^2) - \frac{\lambda}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} k_{so}(\theta) \sqrt{k_F^2 + k_{so}^2(\theta)} d\theta , \end{aligned} \quad (3.53)$$

aquí se usó $\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} k_{so}^2(\theta) d\theta = q_{so}^2$, donde se ha definido q_{so} como

$$q_{so} = \begin{cases} m^* \tilde{\alpha} / \hbar^2 & \text{R + D[111]} \\ m^* \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2} / \hbar^2 & \text{R + D[001]} \\ m^* \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} / 2 / \hbar^2 & \text{R + D[110]} \end{cases} \quad (3.54)$$

La cantidad q_{so}^2 determina el promedio angular de la profundidad de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (Figura 3.1b). De tal forma que al calcular la densidad electrónica total $n = \sum_\lambda n_\lambda$, se obtiene

$$n = \frac{1}{2\pi} (k_F^2 + 2q_{so}^2) \quad (3.55)$$

y por tanto (3.53) puede reescribirse como

$$n_\lambda = \frac{n}{2} - \frac{\lambda}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} k_{so}(\theta) \sqrt{k_F^2 + k_{so}^2(\theta)} d\theta . \quad (3.56)$$

De (3.55) se obtiene que

$$k_F = \sqrt{k_0^2 - 2q_{so}^2} , \quad (3.57)$$

donde $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ es el vector de Fermi de un GE2D degenerado en espín, es decir, en ausencia de interacción espín-órbita. De modo que la energía de Fermi está dada por

$$\begin{aligned}\varepsilon_F &= \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_0^2 - 2q_{so}^2) \\ &= \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*} - 2\varepsilon_{so} ,\end{aligned}\tag{3.58}$$

donde $\varepsilon_{so} = \hbar^2 q_{so}^2 / 2m^*$ es la energía de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, que en el caso con acoplamiento Rashba $\varepsilon_{so} = \varepsilon_R$ (Figura 3.1b). El resultado anterior muestra que la energía de Fermi depende esencialmente de tres parámetros, la masa efectiva m^* , la densidad electrónica n y los parámetros de acoplamiento α y $\beta_{[hkl]}$. En gases de electrones bidimensionales, típicamente las concentraciones electrónicas varían de 5×10^{11} a 10^{12} cm^{-2} [4].

Cuando se tiene un acoplamiento isotrópico (3.50), se puede obtener una expresión simple para n_λ . Por ejemplo, si $\Delta(\theta) = \alpha$, la integral en (3.56) da

$$n_+ = \frac{n}{2} - \frac{k_\alpha}{2\pi} \sqrt{k_F^2 + k_\alpha^2} \quad \text{y} \quad n_- = \frac{n}{2} + \frac{k_\alpha}{2\pi} \sqrt{k_F^2 + k_\alpha^2} .\tag{3.59}$$

De las expresiones anteriores se puede observar que $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ están igualmente ocupadas cuando $k_\alpha = 0$, es decir, $n_+ = n_- = n/2$, que es precisamente el caso de un GE2D degenerado en espín, en donde cada nivel de energía puede estar ocupado hasta por un máximo de dos electrones con espines opuestos, conforme al principio de exclusión de Pauli.

En la Figura 3.6 se muestra la densidad de electrones (3.59) como función del parámetro α , donde se fijó $n = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En la gráfica se puede ver una distribución de electrones distinta en cada sub-banda de energía, con un mayor número de electrones en $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ que en $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, es decir, $n_- > n_+$. Esto se debe a que al aumentar α o k_α , la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ se vuelve más profunda, o dicho de otra forma, la energía de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ disminuye, lo que favorece que más electrones se encuentren ahí. Asimismo, al aumentar el parámetro de Rashba la concentración de electrones en n_+ disminuye en la misma proporción que n_- crece, de forma tal que el número total de electrones se conserva, puesto que se cumple la condición $(n_+ + n_-)/n = 1$.

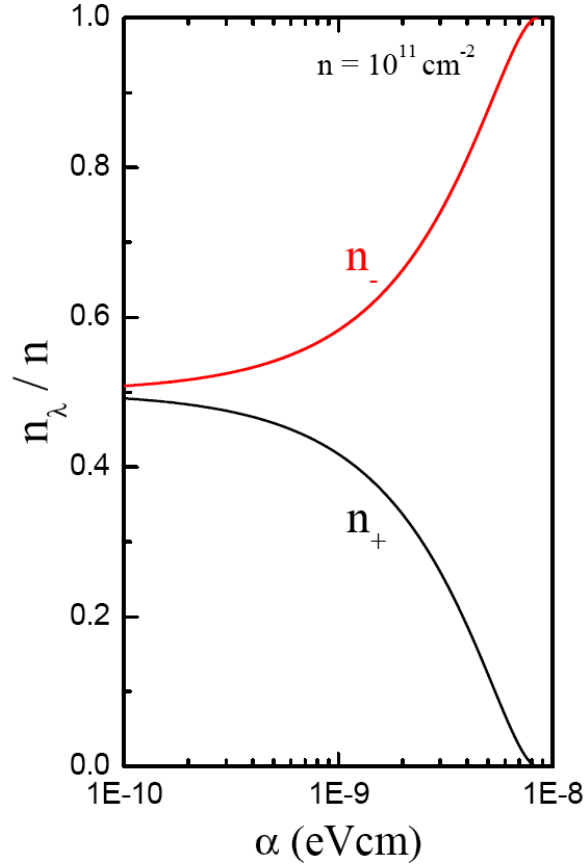


Figura 3.6: Densidad electrónica n_λ como función del parámetro de Rashba α . El eje x está graficado en escala logarítmica.

3.8. Densidad de estados

Por último en esta sección se evalúa la densidad de estados $D_\lambda(\varepsilon)$ del gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita. Esta cantidad está definida como el número de estados permitidos por unidad de energía y por unidad de área en la sub-banda λ , y está dada por

$$D_\lambda(\varepsilon) = \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) , \quad (3.60)$$

donde $\delta(x)$ es la función delta de Dirac. En coordenadas polares

$$D_\lambda(\varepsilon) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_0^k dk d\theta k \delta(\varepsilon - \varepsilon_\lambda(k, \theta)) . \quad (3.61)$$

Si se utiliza (3.49), se obtiene que

$$k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2}\varepsilon_\lambda + k_{so}^2(\theta) - \lambda k_{so}(\theta)} \implies dk = \frac{m^*}{\hbar^2} \left[\frac{2m^*}{\hbar^2}\varepsilon_\lambda + k_{so}^2(\theta) \right]^{-1/2} d\varepsilon_\lambda ; \quad (3.62)$$

y se puede escribir

$$D_\lambda(\varepsilon) = \nu_0 \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int \left[1 - \lambda \sqrt{\frac{\epsilon(\theta)}{\varepsilon_\lambda + \epsilon(\theta)}} \right] \delta(\varepsilon - \varepsilon_\lambda(k, \theta)) d\varepsilon_\lambda d\theta , \quad (3.63)$$

donde se define $\epsilon(\theta) \equiv m^* \Delta^2(\theta)/2\hbar^2$ y $\nu_0 = m^*/\pi\hbar^2$ es la densidad de estados de un sistema bidimensional sin acoplamiento espín-órbita. Por ejemplo, considerando los parámetros del InAs con una masa efectiva de $m^* = 0.05m$, se obtiene $\nu_0 = 2.09 \times 10^{10}/\text{meV cm}^2$.

Para determinar la densidad estados $D_+(\varepsilon)$ y $D_-(\varepsilon)$, es necesario analizar la forma de las sub-bandas de energía (3.49). Comenzando con la densidad de estados $D_+(\varepsilon)$, en todos los casos estudiados anteriormente, se puede ver que $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ sólo tiene valores de energía positivos, por lo tanto al realizar la integral en la energía ε se obtiene que la densidad de estados $D_+(\varepsilon)$ está dada por

$$\frac{D_+(\varepsilon)}{\nu_0} = \frac{1}{2} \Theta(\varepsilon) \left[1 - \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon(\theta)}{\varepsilon + \epsilon(\theta)}} d\theta \right] , \quad (3.64)$$

donde $\Theta(\varepsilon)$ es la función escalón unitaria. Por otro lado, en la sub-banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ se observa que además de tener energías positivas, existe también un rango de energías negativas, por lo que ahora la integración de la densidad de estados $D_-(\varepsilon)$ se separa en dos intervalos dependiendo del valor de la energía, lo que conduce a la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \frac{D_-(\varepsilon)}{\nu_0} &= \frac{1}{2} \Theta(\varepsilon) \left[1 + \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon(\theta)}{\varepsilon + \epsilon(\theta)}} d\theta \right] \\ &+ \Theta(-\varepsilon) \left[\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sqrt{\frac{\epsilon(\theta)}{\varepsilon + \epsilon(\theta)}} \Theta(\varepsilon + \epsilon(\theta)) d\theta \right] . \end{aligned} \quad (3.65)$$

El primer término sólo cuenta los estados disponibles para las energías positivas de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, mientras que el segundo término cuenta los estados disponibles para las energías negativas de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. A un ángulo dado, $D_-(\varepsilon) \rightarrow \infty$ si $\varepsilon = -\epsilon$, en consecuencia sólo las energías comprendidas en el intervalo $-\epsilon < \varepsilon < 0$ contribuyen a la densidad de estados, es decir, son aquellas energías que cumplen con la condición dada en la función escalón

$\Theta(\varepsilon + \epsilon(\theta))$. Notamos que para $\varepsilon \geq 0$, $D_+(\varepsilon) + D_-(\varepsilon) = \nu_0$, y que cuando $\varepsilon \rightarrow \infty$, $D_+(\varepsilon) = D_-(\varepsilon) = \nu_0/2$.

El caso más simple se tiene cuando $\epsilon(\theta)$ es constante, que es el caso del acoplamiento isotrópico (3.50). Por ejemplo, si sólo el acoplamiento Rashba está presente, se tiene que

$$\frac{D_+(\varepsilon)}{\nu_0} = \frac{1}{2} \Theta(\varepsilon) \left(1 - \sqrt{\frac{\varepsilon_R}{\varepsilon + \varepsilon_R}} \right), \quad (3.66)$$

$$\frac{D_-(\varepsilon)}{\nu_0} = \frac{1}{2} \Theta(\varepsilon) \left(1 + \sqrt{\frac{\varepsilon_R}{\varepsilon + \varepsilon_R}} \right) + \Theta(-\varepsilon) \Theta(\varepsilon + \varepsilon_R) \sqrt{\frac{\varepsilon_R}{\varepsilon + \varepsilon_R}}, \quad (3.67)$$

recordando que $\varepsilon_R = m^* \alpha^2 / 2\hbar^2$. Las expresiones (3.66) y (3.67) son equivalentes a las obtenidas por Winkler [1]. En la Figura 3.7 se muestra la densidad de estados $D(\varepsilon)/\nu_0$ como función de la energía ε , para los casos con acoplamiento Rashba (Figura 3.7a), R+D[001] y R+D[110] (Figura 3.7b). Se puede observar que a diferencia de un GE2D degenerado en espín donde su densidad de estados total es simplemente $D_T(\varepsilon) = \Theta(\varepsilon) \nu_0$, por ejemplo, en presencia del acoplamiento Rashba se tiene que

$$\frac{D_T(\varepsilon)}{\nu_0} = \Theta(\varepsilon) + \Theta(-\varepsilon) \Theta(\varepsilon + \varepsilon_R) \sqrt{\frac{\varepsilon_R}{\varepsilon + \varepsilon_R}}, \quad (3.68)$$

como se observa en la Figura 3.7a. Obsérvese asimismo que $D_-(\varepsilon) > D_+(\varepsilon)$ para todas las energías en el rango $-\varepsilon_{so} < \varepsilon < \infty$. Además, la densidad de estados $D_-(\varepsilon)$ comprendida en el rango $-\varepsilon_{so} < \varepsilon < 0$ se incrementa conforme ε disminuye y, como era de esperarse, $D_-(\varepsilon) \rightarrow \infty$ cuando $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon_{so}$.

3.9. Resumen de resultados

En general, en este capítulo se verificaron los resultados ya conocidos en la literatura de las propiedades del estado base de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl].

No obstante, se aportó un nuevo resultado que no ha sido reportado previamente. Éste es la densidad de estados de un GE2D con interacción espín-órbita tipo R+D[110] mostrada en la Figura 3.7, la cual cabe señalar, presenta un comportamiento muy similar a los casos con acoplamiento Rashba y acoplamiento R+D[001].

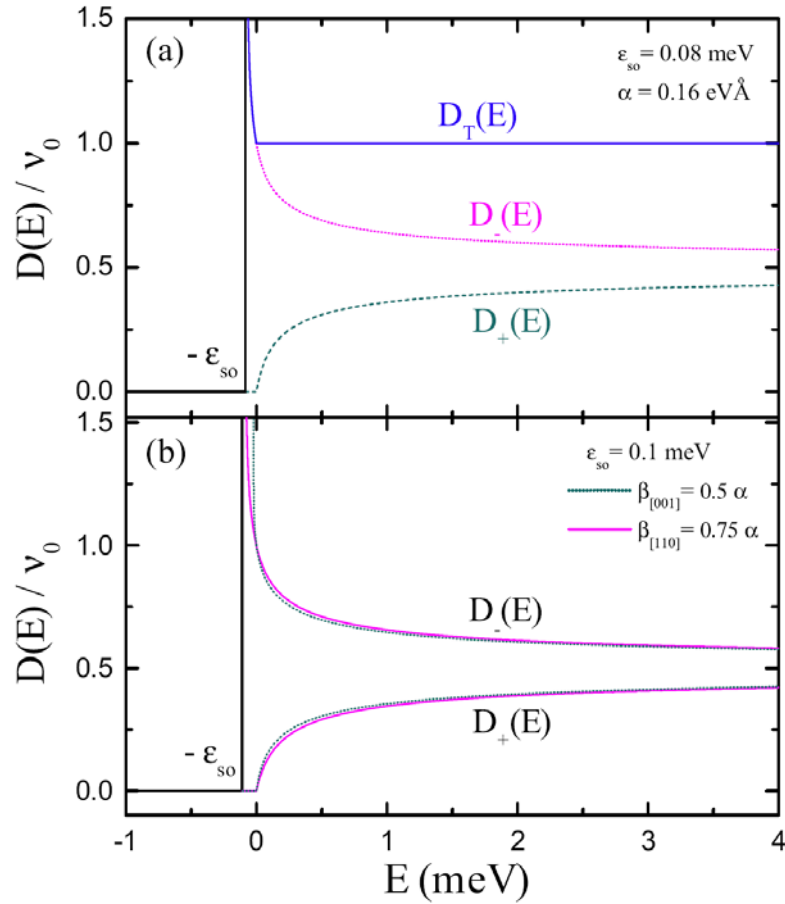


Figura 3.7: Densidad de estados $D_\lambda(\varepsilon)$ como función de la energía ε , para el caso con acoplamiento (a) Rashba, (b) R+D[001] y R+D[110], donde $\varepsilon_{so} = \hbar^2 q_{so}^2 / 2m^*$ y $D_T(E) = D_+(E) + D_-(E)$. Los parámetros usados en todos los casos son $\alpha = 1.6 \times 10^{-9}$ eVcm y $m^* = 0.05m_0$.

Bibliografía

- [1] R. Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Springer, Berlin, 2003).
- [2] J. Schliemann, “Spin Hall effect”, *Int. J. Mod. Phys. B* **20**, 1015 (2006).
- [3] D.D. Awschalom, D. Loss y N. Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Springer, Alemania, 2002).
- [4] N.A. Sinitsyn, E.M. Hankiewicz, W. Teizer y J. Sinova, “Spin Hall and diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **70**, 081312 (2004).
- [5] G. Dresselhaus, A.F. Kip y C. Kittel, “Spin-orbit interaction and the effective masses of holes in germanium”, *Phys. Rev.* **95**, 568 (1954).
- [6] R.H. Parmenter, “Symmetry properties of the energy bands of the zinc blende structure”, *Phys. Rev.* **100**, 573 (1955).
- [7] G. Dresselhaus, “Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures”, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [8] V.I. Perel’, S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel’kov y W. Prettl, “Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier”, *Phys. Rev. B* **67**, 201304 (2003).
- [9] M.I. D’yakonov y V.Yu Kachorovskii, “Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors”, *Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986).
- [10] J. Luo, H. Munekata, F.F. Fang y P.J. Stiles, “Effects of inversion asymmetry on electron energy band structures in GaSb/InAs/GaSb quantum wells”, *Phys. Rev. B* **41**, 7685 (1990).

- [11] S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, L.E. Golub, E.L. Ivchenko, Petra Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss y W. Prettl, "Experimental separation of Rashba and Dresselhaus spin splittings in semiconductors quantum wells", *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601 (2004).
- [12] R. Eppenga y M.F.H. Schuurmans, "Effect of bulk inversion asymmetry on [001], [110], and [111] GaAs/AlAs quantum wells", *Phys. Rev. B* **37**, 10923 (1988).
- [13] X. Cartoixa, D. Z.-Y. Ting y Y.-C. Chang, "Suppression of the D'yakonov-Perel' spin-relaxation mechanism for all spin components in [111] zincblende quantum wells", *Phys. Rev. B* **71**, 045313 (2005).
- [14] I. Zutic, J. Fabian y S. Das Sarma, "Spintronics: Fundamentals and applications", *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [15] M. Borunda, T.S. Nunner, T. Lück, N.A. Sinitsyn, C. Timm, J. Wunderlich, T. Jungwirth, A.H. MacDonald y J. Sinova, "Absence of skew scattering in two-dimensional systems: testing the origins of the anomalous Hall effect", *Phys. Rev. Lett.* **99**, 066604 (2007).
- [16] T. Hassenkam, S. Pedersen, K. Baklanov, A. Kristensen, C.B. Sorensen, P.E. Lindelof, F.G. Pikus y G.E. Pikus, "Spin splitting and weak localization in (110) $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum wells", *Phys. Rev. B* **55**, 9298 (1997).
- [17] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, y M. Oestreich, "Anomalous spin dephasing in (110) GaAs quantum wells: anisotropy and intersubband effects", *Phys. Rev. Lett.* **93**, 147405 (2004).
- [18] V. Sih, R.C. Myers, Y.K. Kato, W.H. Lau, A.C. Gossard y D.D. Awschalom, "Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases", *Nature Phys.* **1**, 31 (2005).

Capítulo 4

Teoría de respuesta lineal de un sistema cuántico a una perturbación externa

Si a un sistema inicialmente en equilibrio se le aplica una perturbación externa, el sistema responderá a la perturbación en su propia forma característica. La relación entre la respuesta del sistema y la perturbación externa se puede determinar a través de una función característica llamada función respuesta. Cuando la magnitud del campo perturbativo es pequeña, la respuesta del sistema es directamente proporcional a la perturbación externa, y bajo esta suposición, se dice que la respuesta es *lineal*. Entre las numerosas aplicaciones de la teoría de la respuesta lineal se encuentran, por ejemplo, el estudio del transporte electrónico de sistemas fuera del equilibrio; de particular interés es el estudio de la conductividad, conductancia, función dieléctrica y susceptibilidades eléctrica y magnética de sistemas electrónicos bajo la influencia de campos eléctricos o magnéticos, por mencionar sólo algunas funciones respuesta.

En el Capítulo 3 se estudiaron las propiedades electrónicas de un GE2D en equilibrio en presencia de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl]. En lo que sigue, se estudia la orientación del espín de los electrones en un GE2D como respuesta a un campo eléctrico ac. Dicha orientación está descrita por una función de polarizabilidad de espín dada por una fórmula de Kubo en términos de la correlación entre densidad de espín y corriente de carga eléctrica.

En este capítulo, se repasa el formalismo general de la teoría de respuesta lineal que proporciona fórmulas para funciones respuesta (como la mencionada polarizabilidad de

espín) en términos de las propiedades microscópicas de equilibrio. Se deriva primero la fórmula general de Kubo en la Sección 4.1. En la Sección 4.2 se utiliza esta fórmula de Kubo para calcular las funciones respuesta de susceptibilidad y polarizabilidad de espín de nuestro problema en particular.

4.1. Matriz de densidad

La función de onda, o el vector de estado, proporciona la descripción más completa de un sistema en mecánica cuántica. Sin embargo, un sistema físico no necesariamente puede ser caracterizado con una función de onda, pues sucede con frecuencia, especialmente para sistemas grandes, que el ensemble cuántico de interés está constituido a su vez por varios subensembles independientes entre sí. En tales casos es necesaria también una descripción estadística del sistema. Una variable dinámica L puede estar bien definida en cada uno de los subensembles y tener el valor L_i , en el subensemble i ; sin embargo, el valor medio sobre todo el ensemble que se le debe asignar a esta variable depende de qué tanto contribuye cada uno de los subensembles.

Sea w_i la probabilidad del sistema de estar en el estado $|i\rangle$ y sea \hat{L} un operador cualquiera, del cual se desea calcular su valor medio sobre el ensemble. El valor esperado de \hat{L} calculado sobre el subensemble que se encuentra en el estado $|i\rangle$ es $\langle L_i \rangle = \langle i | \hat{L} | i \rangle$, mientras que el promedio de \hat{L} sobre todo el ensemble está dado por

$$\begin{aligned}
 \overline{\langle \hat{L} \rangle} &= \sum_i w_i \langle L_i \rangle = \sum_i w_i \langle i | \hat{L} | i \rangle \\
 &= \sum_i \sum_n w_i \langle i | \hat{L} | n \rangle \langle n | i \rangle \\
 &= \sum_n \langle n | \sum_i w_i | i \rangle \langle i | \hat{L} | n \rangle
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

donde $|n\rangle$ es una base arbitraria. Nótese que se están efectuando dos promedios sobre \hat{L} , un promedio cuántico denotado por $\langle \dots \rangle$ y un promedio estadístico denotado por una barra. De esta forma el sistema cuántico queda caracterizado por un conjunto de vectores de estado y por un conjunto de pesos o probabilidades que especifican la contribución relativa de cada uno de ellos al ensemble. En efecto, lo que se busca es pasar de la teoría en términos de un vector de estado a la de sistemas cuya descripción requiere un conjunto apropiado de vectores de estado y los pesos correspondientes. Una

forma de lograrlo es con la introducción de la llamada *matriz de densidad* (u operador estadístico) que se define de la siguiente manera [1, 2, 3]

$$\hat{\rho} = \sum_i w_i |i\rangle \langle i| . \quad (4.2)$$

Al sustituir $\hat{\rho}$ en la expresión (4.1) se obtiene $\overline{\langle \hat{L} \rangle} = \sum_n \langle n | \hat{L} \hat{\rho} | n \rangle$, es decir

$$\overline{\langle \hat{L} \rangle} = \text{Tr}[\hat{L} \hat{\rho}] , \quad (4.3)$$

en donde el operador $\text{Tr}[\dots]$ significa tomar la traza de la matriz. Este resultado establece que el valor esperado de un operador \hat{L} , calculado sobre un ensemble descrito por la matriz de densidad $\hat{\rho}$, está dado por la traza del producto $\hat{L} \hat{\rho}$.

4.2. Fórmula general de Kubo

Para continuar con este análisis, considere un sistema cuántico con un gran número de componentes. Si el sistema se encuentra en equilibrio a una temperatura fija T y E_n representa los eigenvalores del Hamiltoniano H de uno de sus componentes, la probabilidad de que éste se encuentre en un estado de energía E_n está dada por la distribución de Maxwell-Boltzman¹

$$w_n = \frac{1}{Z} e^{-E_n/k_B T} , \quad (4.4)$$

donde k_B es la constante de Boltzmann y $Z = \sum_n e^{-E_n/k_B T}$ es la función de partición. De esta manera, la matriz de densidad (4.2) está dada por

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-E_n/k_B T} , \quad (4.5)$$

en donde $|n\rangle$ representa uno de los eigenvectores de H , esto es, $H|n\rangle = E_n|n\rangle$. De (4.5) se obtiene que

$$\rho_{nm} = \frac{e^{-E_n/k_B T}}{Z} . \quad (4.6)$$

¹Este es el *límite clásico*, se satisface cuando la densidad de partículas del sistema es suficientemente pequeña o la temperatura es suficientemente alta, esto es, $e^{(\mu - E_n)/k_B T} \ll 1$, donde μ es el potencial químico [4].

Tomando en cuenta que $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$, entonces

$$\text{Tr}[\hat{\rho}] = \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n/k_B T} = 1, \quad (4.7)$$

de aquí la función de partición está dada por $Z = \sum_n e^{-E_n/k_B T}$, de modo que la matriz de densidad adquiere la forma $\hat{\rho} = e^{-H/k_B T} / \text{Tr}[e^{-H/k_B T}]$. El ensemble de sistemas descritos con esta matriz de densidad es, por definición, un ensemble canónico². Como $\hat{\rho}$ depende sólo del Hamiltoniano, se trata de un ensemble en equilibrio, cuyas propiedades termodinámicas quedan determinadas por la función de partición Z .

Sustituyendo la matriz de densidad canónica (4.5) en la expresión (4.3), el valor esperado de una cantidad física descrita por un operador \hat{L} , está dado por

$$\overline{\langle \hat{L} \rangle} = \text{Tr}[\hat{L} \hat{\rho}] = \frac{1}{Z} \sum_n \langle n | \hat{L} | n \rangle e^{-E_n/k_B T}. \quad (4.8)$$

Si se considera que en algún tiempo, $t = t_0$, se aplica una perturbación externa sacando al sistema del equilibrio, el Hamiltoniano total $H(t)$ será

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad (4.9)$$

donde H_0 es el Hamiltoniano del sistema antes de aplicar la perturbación y $H'(t)$ es el Hamiltoniano que representa la perturbación externa. El objetivo principal es encontrar el valor esperado de \hat{L} a tiempos $t > t_0$; para lograrlo, es necesario calcular la evolución temporal de la matriz de densidad o equivalentemente la evolución temporal de los eigenestados.

Existen distintas maneras de formular la dinámica cuántica del sistema. Estas distintas formulaciones son llamadas Representaciones (*Pictures*). La dependencia temporal de $\langle \hat{L}(t) \rangle$ se puede encontrar a través de la dependencia temporal del estado cuántico $|n\rangle$, o a través de la dependencia temporal del operador \hat{L} , o a través de ambos.

Una de estas representaciones es la *Representación de interacción*, en donde la dependencia temporal se lleva a cabo a través del estado cuántico $|n(t)_I\rangle$ y del operador $\hat{L}(t)_I$; pero además, se utiliza cuando el Hamiltoniano del sistema se puede escribir en términos de un Hamiltoniano independiente del tiempo H_0 y de una perturbación dependiente del tiempo $H'(t)$ [5], situación representada en (4.9). En esta representación,

²El ensemble canónico representa un sistema con un número fijo de partículas y volumen constante, el cual está abierto al intercambio de calor con un baño térmico a temperatura fija T .

los eigenestados evolucionan de acuerdo al Hamiltoniano sin perturbar H_0 en la forma

$$|n(t)_I\rangle = e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle . \quad (4.10)$$

Al calcular la derivada temporal de $|n(t)_I\rangle$ se obtiene

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)_I\rangle &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} e^{iH_0t/\hbar} \right) |n(t)\rangle + e^{iH_0t/\hbar} \left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle \right) \\ &= -e^{iH_0t/\hbar} H_0 |n(t)\rangle + e^{iH_0t/\hbar} H(t) |n(t)\rangle \\ &= e^{iH_0t/\hbar} (H(t) - H_0) |n(t)\rangle \\ &= e^{iH_0t/\hbar} H'(t) |n(t)\rangle . \end{aligned} \quad (4.11)$$

Al multiplicar el lado derecho de la ecuación (4.11) por los operadores $e^{\pm iH_0t/\hbar}$, se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)_I\rangle = e^{iH_0t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0t/\hbar} e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle , \quad (4.12)$$

con lo cual, la ecuación de Schrödinger resultante para $|n(t)_I\rangle$ está dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)_I\rangle = H'(t)_I |n(t)_I\rangle , \quad (4.13)$$

donde $H'(t)_I = e^{iH_0t/\hbar} H'(t) e^{-iH_0t/\hbar}$ es la perturbación dependiente del tiempo en la representación de interacción. Esta ecuación muestra que la dependencia temporal de $|n(t)_I\rangle$ está determinada completamente por el término del potencial externo $H'(t)_I$.

Similarmente, la evolución temporal del operador \hat{L} se puede definir como

$$\hat{L}(t)_I = e^{iH_0t/\hbar} \hat{L}(t) e^{-iH_0t/\hbar} , \quad (4.14)$$

mientras que el operador de la matriz densidad está definido como

$$\hat{\rho}(t)_I = e^{iH_0t/\hbar} \hat{\rho}(t) e^{-iH_0t/\hbar} . \quad (4.15)$$

La evolución temporal de la matriz de densidad está determinada por la ecuación de Liouville, dada por $i\hbar \partial_t \hat{\rho}(t)_I = [H'(t)_I, \hat{\rho}(t)_I]$. Si se considera que $H'(t)_I$ es suficien-

temente pequeño comparado con H_0 , entonces en teoría de perturbaciones de primer orden la ecuación de Liouville se puede escribir en la forma

$$\hat{\rho}(t)_I = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [H'(t')_I, \hat{\rho}_0] , \quad (4.16)$$

donde $\hat{\rho}_0$ es la matriz densidad del sistema en equilibrio dada por (4.5) [5]. De tal forma que la evolución temporal de $\langle \hat{L}(t) \rangle$ a orden lineal en la perturbación $H'(t)$ está dada por

$$\begin{aligned} \overline{\langle \hat{L}(t) \rangle} &= \text{Tr}[\hat{L}(t)_I \hat{\rho}(t)_I] \\ &= \text{Tr}[\hat{L}(t)_I \hat{\rho}_0] - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \left\{ \hat{L}(t)_I [H'(t')_I, \hat{\rho}_0] \right\} \\ &= \text{Tr}[\hat{L}(t)_I \hat{\rho}_0] - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \left\{ [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] \hat{\rho}_0 \right\} . \end{aligned} \quad (4.17)$$

Al sustituir $\hat{\rho}_0$ en la expresión anterior, se obtiene

$$\begin{aligned} \overline{\langle \hat{L}(t) \rangle} &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n | \hat{L}(t)_I | n \rangle \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle n | [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] | n \rangle . \end{aligned} \quad (4.18)$$

Resulta muy conveniente introducir una notación que permita representar el valor esperado del operador $\hat{L}(t)$ en (4.18) de manera más compacta, para ello considere la notación

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle \dots \rangle , \quad (4.19)$$

donde los brackets $\langle \dots \rangle_0$ representan un promedio en equilibrio con respecto al Hamiltoniano H_0 , de tal forma que la ecuación (4.18) se reduce a

$$\overline{\langle \hat{L}(t) \rangle} = \overline{\langle \hat{L}(t)_I \rangle}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] \rangle_0 . \quad (4.20)$$

De esta manera, el operador $\langle \hat{L}(t) \rangle$ ha sido expresado como una función de correlación retardada, conocida también como función respuesta retardada (o causal), la cual expresa propiedades fuera de equilibrio en términos de promedios sobre los estados en equilibrio. Esta ecuación se conoce comunmente como fórmula general de Kubo [6] que

expresa la respuesta lineal del sistema a una perturbación pequeña $H'(t)$.

Desarrollando el conmutador en la función de correlación de (4.20), se obtiene

$$\begin{aligned} \langle [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] \rangle_0 &= \text{Tr} \left\{ [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{L}(t)_I H'(t')_I \hat{\rho}_0 - H'(t')_I \hat{L}(t)_I \hat{\rho}_0 \right\}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

el primer término del lado derecho de la ecuación se puede escribir como

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ \hat{L}(t)_I H'(t')_I \hat{\rho}_0 \right\} &= \text{Tr} \left\{ e^{iH_0 t/\hbar} \hat{L}(t) e^{-iH_0 t/\hbar} e^{iH_0 t'/\hbar} H'(t') e^{-iH_0 t'/\hbar} \hat{\rho}_0 \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{L}(t) e^{-iH_0(t-t')/\hbar} H'(t') e^{-iH_0 t'/\hbar} \hat{\rho}_0 e^{iH_0 t/\hbar} \right\} \\ &= \text{Tr} \left\{ \hat{L}(t) e^{-iH_0(t-t')/\hbar} H'(t') e^{iH_0(t-t')/\hbar} \hat{\rho}_0 \right\}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde se utilizó la propiedad $\text{Tr} \{ABC\dots YZ\} = \text{Tr} \{BC\dots YZA\}$ y tomando en cuenta que $[H_0, \hat{\rho}_0] = 0$. De (4.22) se puede ver que (4.21) esencialmente es una función que depende sólo de la diferencia $t - t'$. En particular, si la perturbación se puede escribir en la forma $H'(t) = B(t)h'(t)$, donde $B(t)$ es un operador y $h'(t)$ no es un operador, entonces la función de correlación retardada (4.21) puede escribirse como [7]

$$C_{LH'}^R(t, t') = C_{LB}^R(t - t')h'(t'), \quad (4.23)$$

en donde $C_{LB}^R(t - t')$ está dada por

$$C_{LB}^R(t - t') = \Theta(t - t') \langle [\hat{L}(t), \hat{B}(t')] \rangle_0; \quad (4.24)$$

$\Theta(t - t')$ es la función escalón unitaria. Una forma equivalente de expresar $C_{LB}^R(t - t')$ es haciendo el cambio de de variable $t - t' \rightarrow \tau$ y escribir la función de correlación en términos de una sola variable τ , de esta manera (4.24) puede escribirse como [8]

$$C_{LB}^R(\tau) = \Theta(\tau) \langle [\hat{L}(\tau), \hat{B}(0)] \rangle_0. \quad (4.25)$$

Esta expresión será útil en la siguiente sección cuando se estudie la función respuesta espín-corriente de carga.

4.3. Funciones respuesta

4.3.1. Polarizabilidad de espín

El operador de espín del electrón está determinado por las matrices de Pauli como $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$, de tal forma que si se considera al GE2D como un ensemble de electrones, éste será una superposición de los diferentes estados posibles de polarización. Por lo tanto el valor esperado del espín está dado por

$$\langle S_i \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \sigma_i \rangle . \quad (4.26)$$

Si al gas de electrones se le aplica una perturbación externa $H'(t)$ al tiempo $t = t_0$, puesto que hay interacción espín-órbita es posible determinar la evolución temporal del operador de espín σ_i utilizando la fórmula de Kubo (4.20), esto es

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i(t) \rangle &= \langle \sigma_i \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\sigma_i(t), H'(t')] \rangle_0 \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\sigma_i(t), H'(t')] \rangle_0 , \end{aligned} \quad (4.27)$$

donde $\langle \sigma_i \rangle_0 = 0$, debido a que antes de aplicar la perturbación no hay una polarización neta de espines en el GE2D, tal como se estableció en (3.11). Lo que se hará a continuación es determinar la forma del Hamiltoniano H' .

Hamiltoniano de interacción

Considere que el GE2D es perturbado por un campo electromagnético, de tal forma que el Hamiltoniano para un electrón con carga $e < 0$ en presencia de este campo perturbativo está descrito por

$$H(t) = \frac{1}{2m^*} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 , \quad (4.28)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, c es la velocidad de la luz, \mathbf{p} es el operador de momento y $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ es un potencial vectorial definido como $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Desarrollando el cuadrado de (4.28) se obtiene

$$H(t) \approx \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e}{2m^*c} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}] . \quad (4.29)$$

Nótese que en la ecuación anterior se despreció el término cuadrático A^2 , debido a que se considera que el campo perturbativo es pequeño, por lo tanto sólo se toman en cuenta términos de orden lineal. El Hamiltoniano (4.29) se reduce a³

$$H(t) = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) . \quad (4.30)$$

Es posible escribir este Hamiltoniano en la forma (4.9), es decir, separarlo en un término independiente del tiempo $H_0 = p^2/2m^*$ y en otro término perturbativo conocido como *Hamiltoniano de interacción*, dado por

$$H'(t) = -\frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) . \quad (4.31)$$

Por otro lado, antes de aplicar la perturbación, donde sólo interviene el Hamiltoniano H_0 , el operador de velocidad está dado por $\mathbf{v} = \partial_p H_0 = \mathbf{p}/m^*$; sustituyendo este operador de velocidad en el operador de corriente de carga definido como $\mathbf{j} = e\mathbf{v}$, se obtiene

$$\mathbf{j} = \frac{e}{m^*} \mathbf{p} . \quad (4.32)$$

Al sustituir (4.32) en (4.31) el Hamiltoniano de interacción queda como

$$H'(t) = -\frac{1}{c} \mathbf{j}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) . \quad (4.33)$$

Considere ahora un potencial vectorial y un campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \quad (4.34)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} . \quad (4.35)$$

Estos campos describen una onda plana con vector de onda \mathbf{q} y frecuencia ω , donde \mathbf{A}_0 es la magnitud del potencial vectorial y \mathbf{E}_0 la magnitud del campo eléctrico. Utilizando la ecuación de Maxwell $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}/c$ y la definición del potencial vectorial $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, se obtiene una relación directa entre el campo eléctrico y el potencial vectorial, dada por $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}/c$. Por lo tanto, al derivar (4.34) y usando (4.35) se obtiene

$$\mathbf{A}_0 = \frac{-i c}{\omega} \mathbf{E}_0 . \quad (4.36)$$

³Usando la definición del operador de momento $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$: $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) f(r) = \mathbf{A} \cdot (-i\hbar\nabla f(r)) + (-i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}) f(r)$, dado que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, se obtiene que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$.

Si se considera la parte temporal del campo eléctrico, $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$, el Hamiltoniano de interacción (4.33) queda como

$$H'(t) = \frac{i}{\omega} \mathbf{j}(t) \cdot \mathbf{E}(t) . \quad (4.37)$$

Sustituyendo (4.37) en (4.27), se obtiene

$$\langle \sigma_i(t) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{t_0}^t dt' \langle [\sigma_i(t), j_j(t')] \rangle_0 E_j(t') . \quad (4.38)$$

Además si el campo se aplica adiabáticamente, esto quiere decir $t_0 \rightarrow -\infty$, se tiene

$$\langle \sigma_i(t) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\sigma_i(t), j_j(t')] \rangle_0 E_j(t') . \quad (4.39)$$

Si se desea calcular el operador de espín en función de la frecuencia del campo eléctrico, es necesario calcular su transformada de Fourier definida como

$$\begin{aligned} \langle \sigma_i(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \sigma_i(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\sigma_i(t), j_j(t')] \rangle_0 E_j(t') . \end{aligned} \quad (4.40)$$

Al realizar el cambio de variable $t - t' \rightarrow \tau$ y multiplicar la integral por el término $e^{i\omega\tau} e^{-i\omega\tau} = 1$, se obtiene

$$\langle \sigma_i(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-\tau)} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \underbrace{\langle [\sigma_i(t), j_j(t')] \rangle_0}_{C_{\sigma_j}^R(\tau)} E_j(t - \tau) , \quad (4.41)$$

donde $C_{\sigma_j}^R(\tau) = \Theta(\tau) \langle [\sigma_i(\tau), j_j(0)] \rangle_0$ es la función de correlación espín-corriente de carga (ver ecuación 4.25). De (4.41) se puede identificar la transformada de Fourier del campo eléctrico definida como

$$E_j(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-\tau)} E_j(t - \tau) , \quad (4.42)$$

con lo cual, podemos expresar (4.41) como

$$\langle \sigma_i(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\sigma_i(\tau), j_j(0)] \rangle_0 E_j(\omega) . \quad (4.43)$$

Se puede ver que la integral no está bien definida en el límite superior, por lo que se hace necesario garantizar su convergencia redefiniéndola como sigue

$$\langle \sigma_i(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^{\infty} d\tau e^{i(\omega + i\eta)\tau} \langle [\sigma_i(\tau), j_j(0)] \rangle_0 E_j(\omega) , \quad (4.44)$$

es decir, se introduce un término $i\eta$ a la frecuencia ω , donde $\eta \rightarrow 0^+$; este parámetro permite regularizar la integral, pero se puede interpretar como una medida de los procesos de dispersión del momento del electrón debido a impurezas o cualquier otro mecanismo de disipación [1]. Con estos resultados es posible escribir (4.44) en la forma general

$$\langle S_i(\omega) \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \sigma_i(\omega) \rangle \equiv \frac{\hbar}{2} \gamma_{ij}(\omega) E_j(\omega) , \quad (4.45)$$

donde se puede identificar de (4.44) que $\gamma_{ij}(\omega)$ es la función respuesta espín-corriente de carga, dada por la fórmula de Kubo

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty d\tau e^{i(\omega + i\eta)\tau} \langle [\sigma_i(\tau), j_j(0)] \rangle_0 . \quad (4.46)$$

La función $\gamma_{ij}(\omega)$ recibe el nombre de *tensor de polarizabilidad de espín* y describe la orientación de espín $S_i(\omega)$ como respuesta a un campo eléctrico homogéneo $E_j(\omega)$ que oscila en el tiempo con una frecuencia ω . Los índices i, j son coordenadas cartesianas, donde i indica la dirección de la polarización de espín y j la componente del campo eléctrico.

La polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$ se puede escribir en términos de otra función respuesta auxiliar, la función $\chi_{ij}(\omega)$, llamada susceptibilidad de espín, cuyo tratamiento se desarrolla en la siguiente sección.

4.3.2. Susceptibilidad de espín

Como se mencionó anteriormente, $j_i = ev_i$ es el operador de corriente de carga eléctrica y v_i es una componente del operador de velocidad. Al sustituir j_i en la ecuación (4.46) se obtiene⁴

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{e}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\eta)t} \langle [\sigma_i(t), v_j(0)] \rangle_0 , \quad \eta \rightarrow 0^+ . \quad (4.47)$$

En el estado base, el Hamiltoniano del gas de electrones está dado por $H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + H_{so}$, donde H_{so} puede escribirse también como

$$H_{so} = \frac{\hbar}{2} \Omega_i \sigma_i = \sigma_i \mu_{ij} k_j . \quad (4.48)$$

⁴Nótese que por simplicidad se efectuó el cambio de variable $\tau \rightarrow t$.

La matriz μ_{ij} está determinada sólo por los parámetros de acoplamiento α y $\beta_{[hkl]}$,

$$\mu_{ij} = \begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & \alpha & 0 \\ -\alpha & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\alpha} & 0 \\ -\tilde{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.49)$$

para pozos cuánticos crecidos a lo largo de las direcciones [001], [110] y [111], respectivamente. De modo que el operador de velocidad está dado por

$$\begin{aligned} v_l &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_l} \\ &= \frac{\hbar k_l}{m^*} + \frac{1}{\hbar} \sigma_i \mu_{il}. \end{aligned} \quad (4.50)$$

Cabe señalar que en presencia de la interacción espín-órbita el operador de corriente en función del operador de velocidad (4.50), contiene un término que depende del espín y por lo tanto la interacción $-\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}/c$ acopla un campo electromagnético con la densidad de espín. Los resultados anteriores permiten escribir (4.47) en la forma general

$$\begin{aligned} \gamma_{ij}(\omega) &= \frac{e}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [\sigma_i(t), \frac{1}{\hbar} \mu_{kj} \sigma_k(0)] \rangle_0 \\ &= \frac{e}{i\hbar(\omega + i\eta)} \left(\frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] \rangle_0 \right) \mu_{kj} \\ &= \frac{e}{i\hbar(\omega + i\eta)} \chi_{ik}(\omega) \mu_{kj}, \end{aligned} \quad (4.51)$$

donde el tensor $\chi_{ij}(\omega)$ es la función de correlación tipo espín-espín o función respuesta de densidad de espín, conocida como *tensor de susceptibilidad de espín*, que de acuerdo a (4.51) está dada por

$$\chi_{ij}(\omega) = \frac{i}{\hbar} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] \rangle_0, \quad \eta \rightarrow 0^+. \quad (4.52)$$

En la sección 4.2 se introdujo la notación $\langle \dots \rangle_0$ para representar un promedio cuántico y térmico respecto a H_0 (4.19). Para un GE2D los eigenvectores están dados por los espinores $|\lambda \mathbf{k}\rangle$ calculados en el Capítulo 3. Además, la distribución propia para describir al gas de electrones es la función de distribución de Fermi $f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) =$

$(1 + e^{(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_F)/k_B T})^{-1}$. Por lo tanto los brackets en (4.52) quedan como

$$\langle [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] \rangle_0 = \sum_{\mathbf{k}, \lambda} f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) \langle \lambda \mathbf{k} | [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle . \quad (4.53)$$

Como es habitual, la suma en \mathbf{k} se puede cambiar por una integral de la forma, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2}$, con lo cual

$$\langle [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] \rangle_0 = \sum_{\lambda} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) \langle \lambda \mathbf{k} | [\sigma_i(t), \sigma_j(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle . \quad (4.54)$$

De esta manera los brackets representan una integración sobre la distribución de Fermi en el espacio \mathbf{k} . La integración en el tiempo de la ecuación (4.52) da

$$\chi_{ij}(\omega) = \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} [f(\varepsilon_-(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_+(\mathbf{k}))] \left(\frac{M_{ij}(\mathbf{k})}{\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar(\omega + i\eta)} + \frac{M_{ji}(\mathbf{k})}{\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) + \hbar(\omega + i\eta)} \right), \quad (4.55)$$

donde los elementos de matriz $M_{ij}(\mathbf{k})$ están dados por (ver Apéndice C)

$$M_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \langle -\mathbf{k} | \sigma_i | +\mathbf{k} \rangle \langle +\mathbf{k} | \sigma_j | -\mathbf{k} \rangle . \quad (4.56)$$

En un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl], los elementos de matriz tienen la propiedad $M_{ij}(\mathbf{k}) = (M_{ji}(\mathbf{k}))^*$. En el límite de temperatura cero, la función de distribución de Fermi se convierte en una función escalón y el tensor (4.55) se reduce a

$$\chi_{ij}(\omega) = \int' \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left(\frac{M_{ij}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} - \hbar(\omega + i\eta)} + \frac{M_{ji}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} + \hbar(\omega + i\eta)} \right), \quad (4.57)$$

con $\hbar\omega_{+-} \equiv \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k})$. La prima en la integral indica que la integración está restringida a la región entre los contornos de Fermi $k_F^+(\theta) < k < k_F^-(\theta)$ con $0 < \theta < 2\pi$, para la cual se cumple que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+(\mathbf{k})$ (Figura 3.1b).

Parte real y parte imaginaria de la susceptibilidad de espín

Los elementos de matriz (4.56) se pueden escribir en forma general como

$$M_{ij}(\mathbf{k}) = m'_{ij}(\mathbf{k}) + i m''_{ij}(\mathbf{k}), \quad (4.58)$$

de modo que la susceptibilidad de espín (4.57) toma la forma

$$\chi_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{m'_{ij} + i m''_{ij}}{(\omega_{+-} - \omega) - i\eta} + \frac{m'_{ij} - i m''_{ij}}{(\omega_{+-} + \omega) + i\eta} \right). \quad (4.59)$$

Esta función tiene una parte real y una parte imaginaria, cuyas expresiones se pueden obtener utilizando la relación

$$\frac{1}{x \pm i\eta} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x), \quad (4.60)$$

donde \mathcal{P} denota la integral del valor principal⁵ y $\delta(x)$ es la función delta de Dirac. Esta relación implica

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(\omega) &= \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (m'_{ij} + i m''_{ij}) \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{+-} - \omega} \right) + i\pi\delta(\omega_{+-} - \omega) \right] \\ &\quad + \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (m'_{ij} - i m''_{ij}) \left[\mathcal{P} \left(\frac{1}{\omega_{+-} + \omega} \right) - i\pi\delta(\omega_{+-} + \omega) \right]. \end{aligned} \quad (4.61)$$

En este punto cabe analizar la naturaleza de las deltas de Dirac de la expresión anterior. La primera delta de Dirac, $\delta(\omega_{+-} - \omega)$, describe los procesos de absorción, mientras que $\delta(\omega_{+-} + \omega)$ los de emisión. Se ha considerado que el sistema inicialmente se encuentra en el estado base, por lo tanto sólo se consideran los efectos de absorción, no de emisión; por consiguiente $\delta(\omega_{+-} + \omega)$ no se toma en cuenta, lo que conduce a la expresión

$$\begin{aligned} \chi_{ij}(\omega) &= \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m'_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega_{+-}}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) - \pi m''_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) \right] \\ &\quad + i \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m''_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) + \pi m'_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) \right] \\ &= \chi'_{ij}(\omega) + i \chi''_{ij}(\omega), \end{aligned} \quad (4.62)$$

donde $\chi'_{ij}(\omega)$ y $\chi''_{ij}(\omega)$ son, respectivamente, las partes reales e imaginarias de la función $\chi_{ij}(\omega)$.

En coordenadas polares es posible escribir los elementos de matriz como $M_{ij}(\theta) = m'_{ij}(\theta) + i m''_{ij}(\theta)$, al igual que $\hbar\omega_{+-} = 2k\Delta(\theta)$, donde $\Delta(\theta)$ es la función definida en (3.50) y (3.51). De esta manera, después de efectuar algunas operaciones algebraicas (ver Apéndice B) se obtienen las expresiones

⁵ $\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{x_0 - \delta} f(x) dx + \int_{x_0 + \delta}^{\infty} f(x) dx \right\}$, donde x_0 es una singularidad.

$$\chi'_{ij}(\omega) = \chi_{ij}(0) + \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{m'_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega + \hbar\Omega_+(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)]}{[\hbar\omega + \hbar\Omega_-(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)]} \right| + I'_{ij}(\omega) , \quad (4.63)$$

la integral $I'_{ij}(\omega)$ está dada por

$$I'_{ij}(\omega) = -\frac{\hbar\omega}{16\pi} \int d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)] , \quad (4.64)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón unitaria y $\chi_{ij}(0)$ es el valor estático de la susceptibilidad de espín dado por el promedio angular

$$\chi_{ij}(0) = \nu_0 \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta m'_{ij}(\theta) , \quad (4.65)$$

recordando que $\nu_0 = m^*/\pi\hbar^2$ (ver Sección 3.8). Para la parte imaginaria se obtiene

$$\chi''_{ij}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi} \int d\theta \frac{m'_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)] + I''_{ij}(\omega) , \quad (4.66)$$

donde

$$I''_{ij}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_-(\theta)]^2}{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_+(\theta)]^2} \right| . \quad (4.67)$$

Aquí $\hbar\Omega_+(\theta) = \varepsilon_F - \varepsilon_-(k_F^+(\theta), \theta) = 2k_F^+(\theta) \Delta(\theta)$ y $\hbar\Omega_-(\theta) = \varepsilon_+(k_F^-(\theta), \theta) - \varepsilon_F = 2k_F^-(\theta) \Delta(\theta)$, donde los vectores de Fermi $k_F^\lambda(\theta)$ están dados en (3.52). El significado y origen de las energías $\hbar\Omega_\pm(\theta)$ se discutirá en el Capítulo 5.

4.4. Resumen de resultados

En este capítulo se utilizó el formalismo de la teoría de la respuesta lineal para obtener las expresiones generales del tensor de polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, el cual está dado por una fórmula de Kubo en términos de la correlación entre densidad de espín y corriente de carga eléctrica (4.46). La polarizabilidad de espín nos permiten describir la orientación de espín $S_i(\omega)$ como respuesta a un campo eléctrico ac, aplicado en el plano de un GE2D con interacción espín-órbita. Además se encontró una relación directa entre

el tensor $\gamma_{ij}(\omega)$ y el tensor de susceptibilidad de espín $\chi_{ij}(\omega)$, dada por (4.51).

Lo que sigue es calcular estas funciones respuestas para cada uno de los casos estudiados en el Capítulo 3. Los resultados se presentan en el Capítulo 6. Pero antes, como preparación para entender y describir las propiedades espectrales de la polarizabilidad de espín, en el siguiente capítulo se estudiará la densidad conjunta de estados $D_{+-}(\omega)$. La importancia de estudiar la densidad conjunta de estados se debe a que usualmente en las funciones respuesta cada transición va pesada por algún elemento de matriz, como se puede ver en la expresión (4.62). Si estos pesos son constantes, la estructura en ω quedará determinada por $D_{+-}(\omega)$.

Bibliografía

- [1] Yu. A. Il'inskii y L. V. Keldysh, *Electromagnetic response of material media* (Plenum, Nueva York, 1994).
- [2] L. De la Peña, *Introducción a la Mecánica Cuántica* (UNAM-FCE, México, 2006).
- [3] R. P. Feynman, *Statistical Mechanics: A set of lectures*, (Addison-Wesley, Redwood city, California, 1972).
- [4] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, (McGraw-Hill, Nueva York, 1965).
- [5] K. Blum, *Density matrix theory and applications*, (Plenum, Nueva York, 1989).
- [6] R. Kubo, "Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems" *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
- [7] H. Bruus y K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics: An introduction* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- [8] G. Mahan, *Many-particle physics*, (Wiley, Nueva York, 2000).

Capítulo 5

Transiciones entre sub-bandas de espín: Densidad conjunta de estados

La anisotropía que resulta de la presencia simultánea de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl] (R+D[hkl]), da lugar a un comportamiento espectral muy diferente del correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico (3.50). Por tal motivo, antes de mostrar el espectro de $\gamma_{ij}(\omega)$, se estudiará la densidad conjunta de estados $D_{+-}(\omega)$.

Típicamente, en las funciones respuesta (su parte disipativa), cada transición va ‘pesada’ por algún elemento de matriz (ver ecuación 4.62). Si estos ‘pesos’ son constantes, la estructura en ω quedará determinada por la densidad conjunta de estados. Por lo tanto, $D_{+-}(\omega)$ permitirá describir y anticipar las propiedades espectrales de las funciones respuesta. En la Sección 5.1 se presentan los aspectos generales de la densidad conjunta de estados de un GE2D con interacción espín-órbita. En la Sección 5.2 se analiza en detalle el caso con acoplamiento isotrópico, mientras que en las secciones 5.3 y 5.4 se estudian los acoplamientos anisotrópicos (3.51).

5.1. Densidad conjunta de estados

La densidad conjunta de estados, $D_{+-}(\omega)$, para las sub-bandas ε_λ , está definida por (a $T = 0$)

$$D_{+-}(\omega) = \int' \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\omega) . \quad (5.1)$$

Esta función da el número de transiciones verticales que se pueden llevar a cabo entre ε_+ y ε_- separadas por una energía $\hbar\omega$. La prima en la integral indica que la región de integración se restringe a aquellas zonas tales que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$, es decir, se restringe a radios vectores tales que $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$, para $\theta \in [0, 2\pi]$ (Figura 5.1a). Esto define una zona anular entre los contornos de Fermi que delimita el espacio \mathbf{k} disponible para transiciones verticales, para una energía de Fermi dada (Figura 5.1b).

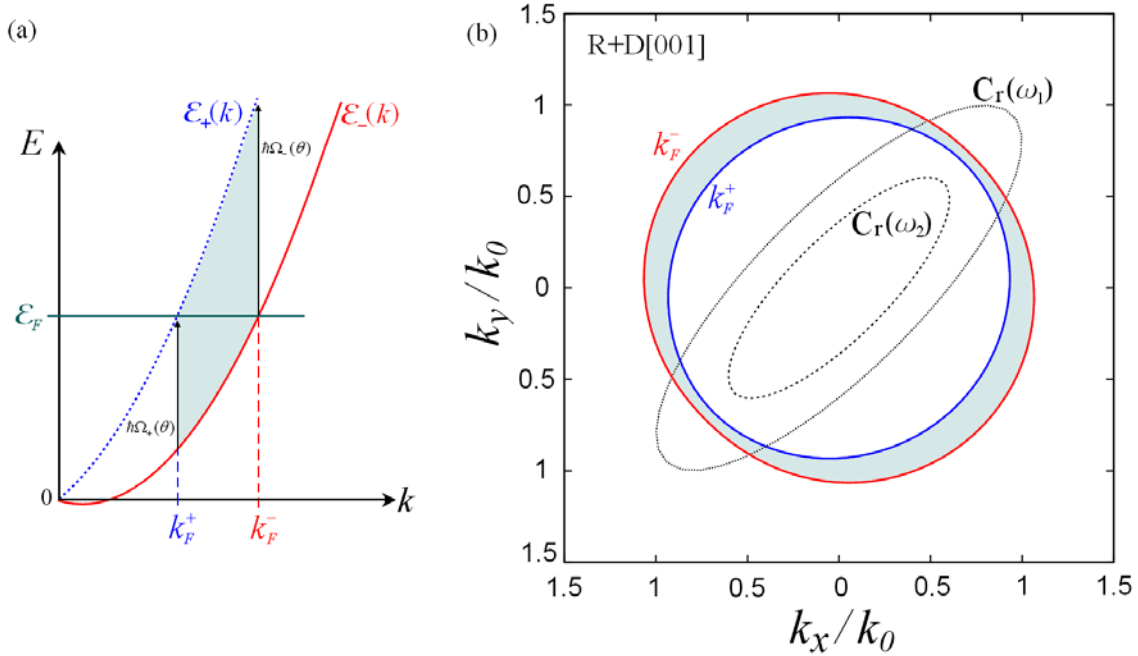


Figura 5.1: (a) A temperatura cero, los únicos estados permitidos que intervienen en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ , son aquellos con vectores de onda $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$ para los cuales se cumple que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$. (b) La curva de resonancia $C_r(\omega)$ está definida por los puntos (k_x, k_y) tales que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$; para ω_1 y ω_2 fijas, con $\omega_2 < \omega_1$ y $k_0 = \sqrt{2\pi n}$. Sólo la región sombreada contribuye a la absorción óptica.

La ecuación (5.1) muestra que las transiciones verticales entre la sub-banda inicial ε_- y la sub-banda final ε_+ , a la energía $\hbar\omega$, tendrán lugar para aquellos puntos en el espacio \mathbf{k} que caen sobre la curva de resonancia $C_r(\omega)$ definida por la ecuación $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ (Figura 5.1b). Recordando que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ (sección 3.2), donde $\frac{\hbar}{2}\Omega_i = \mu_{ij} k_j$ (ver ecuación 4.48) y la matriz μ_{ij} está dada por (4.49), entonces para $\omega = |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ la curva de resonancia $C_r(\omega)$ está definida por

$$\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 = \mu_{ij} \mu_{il} k_j k_l. \quad (5.2)$$

Además, la expresión (5.1) puede reescribirse como la integral de línea

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int'_{C_r(\omega)} \frac{dk_r}{|\nabla_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{+-}(\mathbf{k})|} , \quad (5.3)$$

donde la integral se toma sobre aquéllos arcos de la curva $C_r(\omega)$ que caen en la región anular $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$, recordando que $\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) = \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k})$. La expresión (5.3) muestra que habrá picos siempre que la velocidad conjunta $\mathbf{v}_{+-}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \omega_{+-}(\mathbf{k})$ (restringida a los arcos en $C_r(\omega)$) tome valores mínimos. Esto semeja la presencia de puntos críticos o singularidades de van Hove que son fuente de estructura en $D_{+-}(\omega)$ y en constantes ópticas [1, 2]. Si la ecuación (5.1) se escribe en coordenadas polares da

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) - \hbar\omega) , \quad (5.4)$$

donde por un lado $\hbar\omega_{+-} = 2k\Delta(\theta)$ y por otro $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$, por lo tanto $2k_F^+(\theta)\Delta(\theta) \leq \hbar\omega \leq 2k_F^-(\theta)\Delta(\theta)$. Si se definen las energías

$$\hbar\Omega_{\pm}(\theta) \equiv [\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta)]|_{k=k_F^{\pm}(\theta)} = 2k_F^{\pm}(\theta) \Delta(\theta) , \quad (5.5)$$

la función δ en (5.4) puede escribirse como

$$\delta(\hbar\omega_{+-}(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] \frac{1}{2\Delta(\theta)} \delta\left[k - \frac{\hbar\omega}{2\Delta(\theta)}\right] , \quad (5.6)$$

de modo que

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int d\theta \frac{1}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] . \quad (5.7)$$

Recordando que $\varepsilon_{\lambda}(k_F^{\lambda}(\theta), \theta) = \varepsilon_F$, de (5.5) se obtiene que

$$\hbar\Omega_+(\theta) = \varepsilon_F - \varepsilon_-(k_F^+(\theta)) \quad (5.8)$$

$$\hbar\Omega_-(\theta) = \varepsilon_+(k_F^-(\theta)) - \varepsilon_F . \quad (5.9)$$

La Figura 5.1a ilustra el significado de estas energías: $\hbar\Omega_+(\theta)$ es la energía mínima, mientras que $\hbar\Omega_-(\theta)$ la energía máxima $\hbar\omega$, que se requiere absorber para inducir transiciones verticales desde la sub-banda ε_- hasta la sub-banda ε_+ , a un ángulo dado. En otras palabras, en una cierta dirección en el espacio \mathbf{k} entre los contornos de Fermi,

las únicas transiciones de ε_- a ε_+ , son aquéllas en las cuales

$$\hbar\Omega_+(\theta) \leq \hbar\omega \leq \hbar\Omega_-(\theta) . \quad (5.10)$$

Esto implica que para una energía $\hbar\omega$ dada, sólo aquéllos ángulos que satisfacen esta condición deben ser considerados en la integral (5.7). Estos ángulos están determinados por la forma del desdoblamiento de los estados de espín $\Delta(\theta)$. Por ejemplo, cuando la separación entre las sub-bandas es isotrópica (ver ecuación 3.50), para una ω en la banda de absorción, toda la región angular $0 < \theta < 2\pi$ contribuye en la integral (5.7). Por el contrario, cuando el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico (ecuación 3.51), sólo ciertos ángulos deben ser tomados en cuenta.

En la Figura 5.2 se muestra la densidad conjunta de estados obtenida al integrar numéricamente la ecuación (5.7). Aquí se consideró la función $\Delta(\theta)$ correspondiente a los casos en que se tiene interacción espín-órbita tipo Rashba, R+D[111], R+D[001] y R+D[110]. En la figura se puede apreciar que la densidad conjunta de estados de los acoplamientos isotrópicos es claramente diferente a los acoplamientos anisotrópicos. Con el fin de entender estos resultados, en las siguientes secciones se realizará un estudio más detallado de los distintos casos.

5.2. Caso con acoplamiento isotrópico

Cuando se tiene un acoplamiento isotrópico (3.50), se puede obtener una expresión simple para $D_{+-}(\omega)$. Por ejemplo, si $\Delta(\theta) = \alpha$, $D_{+-}(\omega)$ se reduce a

$$D_{+-}^R(\omega) = \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha^2} , \quad 2\alpha k_F^+ \leq \hbar\omega \leq 2\alpha k_F^- \quad (5.11)$$

donde las energías $\hbar\Omega_{\pm} = 2\alpha k_F^{\pm}$ no dependen del ángulo, por lo tanto toda la región angular $0 < \theta < 2\pi$ contribuye en la integral (5.7). De la expresión (5.11) se puede ver que para una α dada, $D_{+-}^R(\omega)$ crece linealmente como función de la frecuencia, esto se ve reflejado en la forma de $D_{+-}^R(\omega)$ mostrada en la Figura 5.2. En particular, en el caso con acoplamiento Rashba (o R+D[111] o D[001]) se puede demostrar que

$$\chi_{ij}''(\omega) = \delta_{ij} \frac{\pi}{2} D_{+-}^R(\omega) , \quad (5.12)$$

recordando que $\chi_{ij}''(\omega)$ es la parte real de la susceptibilidad de espín dada por (4.66). Por lo tanto, la ecuación (5.12) indica que la estructura en ω de la función $\chi_{ij}''(\omega)$ quedará

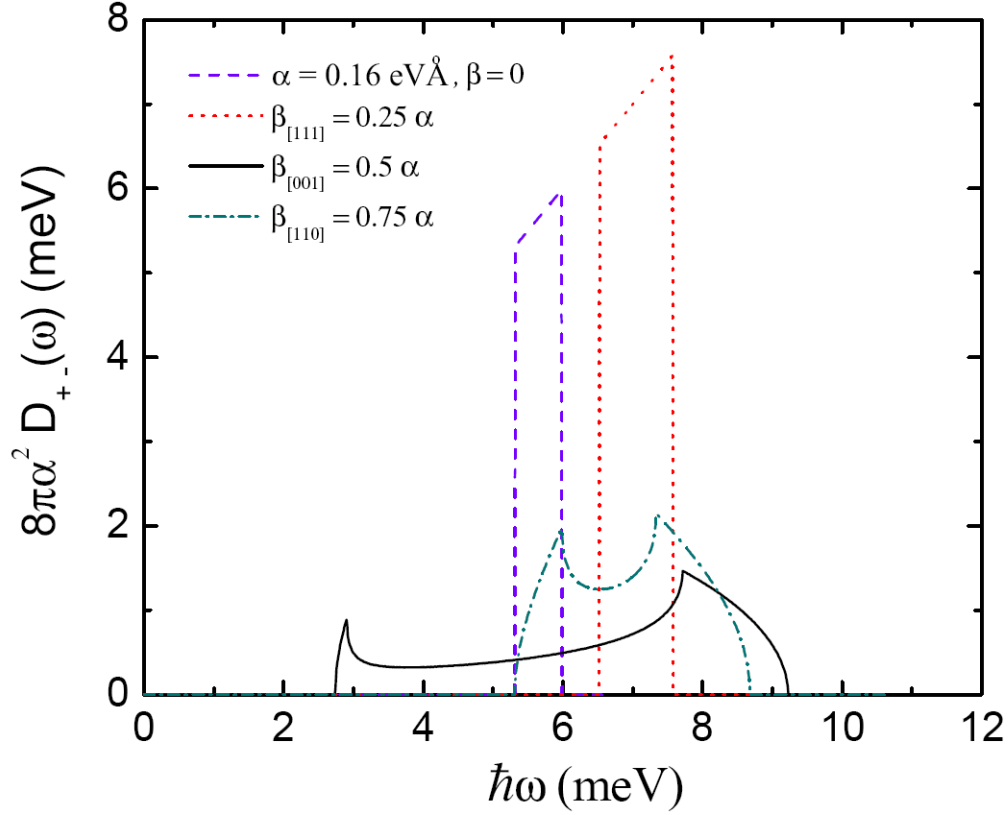


Figura 5.2: Densidad conjunta de estados de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus[hkl]. Los parámetros usados son $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

determinada por $D_{+-}^R(\omega)$. Esto permite ver la importancia de la densidad conjunta de estados.

Ahora bien, recordando que $k_F^\pm = \sqrt{k_F^2 + k_\alpha^2} \mp k_\alpha$, con $k_\alpha = m^* \alpha / \hbar^2$, y suponiendo que $(k_\alpha/k_F)^2 \ll 1$, se obtiene que

$$\hbar\omega_\pm \equiv \hbar\Omega_\pm = 2\alpha k_F \mp \frac{2m^* \alpha^2}{\hbar^2}. \quad (5.13)$$

Por lo tanto, las transiciones directas de ε_- a ε_+ se llevan a cabo en un ancho de banda que no depende de ω , dado por

$$\Delta\varepsilon = \hbar\Omega_- - \hbar\Omega_+ = \frac{4m^* \alpha^2}{\hbar^2}, \quad (5.14)$$

de tal manera que $\Delta\varepsilon$ depende esencialmente del parámetro α . Para los parámetros de la Figura 5.2, cuando $\beta = 0$ se tiene que $\hbar\Omega_+ \approx 5.31 \text{ meV}$ y $\hbar\Omega_- \approx 5.98 \text{ meV}$, por lo tanto el ancho de banda es del orden de $\Delta\varepsilon \approx 0.67 \text{ meV}$. En la misma figura se muestra el caso con acoplamiento R+D[111], donde $\tilde{\alpha} = \alpha + \beta_{[111]}$ con $\beta_{[111]} = \alpha/4$, en este caso

se obtiene $\hbar\Omega_+ \approx 6.52$ meV y $\hbar\Omega_- \approx 7.57$ meV, de modo que $\Delta\varepsilon \approx 1.05$ meV. Estos resultados muestran que el ancho de banda de absorción en el caso con acoplamiento R+D[111] es mayor que en el caso donde sólo hay acoplamiento Rashba, además de que las energías $\hbar\Omega_{\pm}$ involucradas en el primer caso son mayores. Esto claramente se debe a que $\tilde{\alpha} > \alpha$. Por lo tanto, la magnitud de las constantes de acoplamiento permiten determinar el ancho de la banda de absorción y las frecuencias características $\hbar\omega_{\pm}$ en las cuales se observa estructura en la densidad conjunta de estados.

5.3. Caso con acoplamiento R+D[001]

En un GE2D con acoplamiento R+D[001], $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta}$. En este caso, la curva de resonancia (5.2) está definida por los puntos (k_x, k_y) tales que

$$k_x^2 + k_y^2 - \left(\frac{2\alpha\beta_{[001]}}{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2} \right) 2k_x k_y = \frac{(\hbar\omega)^2}{4(\alpha^2 + \beta_{[001]}^2)}. \quad (5.15)$$

Si definimos $k_x = (\tilde{k}_x - \tilde{k}_y)/\sqrt{2}$ y $k_y = (\tilde{k}_x + \tilde{k}_y)/\sqrt{2}$, entonces la ecuación (5.15) puede escribirse también como

$$\frac{\tilde{k}_x^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2(\alpha - \beta_{[001]})} \right)^2} + \frac{\tilde{k}_y^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2(\alpha + \beta_{[001]})} \right)^2} = 1. \quad (5.16)$$

Escrita de esta manera, la curva de resonancia $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada cuyo semieje mayor, $k_a(\omega)$, se encuentra en $\theta_+ = \pi/4$ o $5\pi/4$, de modo que

$$\begin{aligned} \hbar\omega &= 2 k_a(\omega) \Delta(\theta_+) \\ &= 2 k_a(\omega) |\alpha - \beta_{[001]}|, \end{aligned} \quad (5.17)$$

y por tanto $k_a(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta_{[001]}|$. Asimismo, puesto que el semieje menor $k_b(\omega)$ se encuentra en $\theta_- = 3\pi/4$ o $7\pi/4$, se tiene que $k_b(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta_{[001]}|$. Nótese que al crecer ω , la curva $C_r(\omega)$ se hace más grande y eventualmente llegará a zonas de menor ocupación, hasta salirse completamente de la región anular, como se ilustra en la Figura 5.3. En $\theta_+ = \pi/4$ o $5\pi/4$, la energía mínima necesaria para inducir transiciones verticales de ε_- a ε_+ (ver Fig. 5.1a), involucra a un electrón cuyo vector de onda cae sobre el contorno de Fermi $k_F^+(\theta)$, esto es

$$\hbar\omega_+ = \hbar\Omega_+(\theta_+) = 2k_F|\alpha - \beta_{[001]}| - \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha - \beta_{[001]})^2, \quad (5.18)$$

en este caso, el semieje mayor de la elipse coincide con $k_a(\omega) = k_F^+(\theta_+)$ (Fig. 5.3a). En esta misma dirección, $\hbar\omega_a$ es la energía máxima requerida para inducir transiciones y a la cual $k_a(\omega) = k_F^-(\theta_+)$ (Fig. 5.3b), de modo que

$$\hbar\omega_a = \hbar\Omega_-(\theta_+) = 2k_F|\alpha - \beta_{[001]}| + \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha - \beta_{[001]})^2. \quad (5.19)$$

Ahora bien, en $\theta_- = 3\pi/4$ o $7\pi/4$, la energía mínima requerida para inducir transiciones de ε_- a ε_+ está dada por

$$\hbar\omega_b = \hbar\Omega_+(\theta_-) = 2k_F|\alpha + \beta_{[001]}| - \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha + \beta_{[001]})^2, \quad (5.20)$$

donde ahora el semieje menor coincide con $k_b(\omega) = k_F^+(\theta_-)$ (Fig. 5.3c); mientras que la energía máxima requerida es

$$\hbar\omega_- = \hbar\Omega_-(\theta_-) = 2k_F|\alpha + \beta_{[001]}| + \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha + \beta_{[001]})^2, \quad (5.21)$$

donde $k_b(\omega) = k_F^-(\theta_-)$ (Fig. 5.3d). Por lo tanto, tenemos que $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$. El ancho de banda de absorción está determinado por

$$\Delta\varepsilon = 4k_F [\beta_{[001]}\Theta(\alpha - \beta_{[001]}) + \alpha\Theta(\beta_{[001]} - \alpha)] + \frac{4m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[001]}^2). \quad (5.22)$$

donde $\Theta(x)$ es la función escalón unitaria. Cabe notar que $\Delta\varepsilon$ depende explícitamente de la densidad electrónica n (a través de k_F), a diferencia del caso con acoplamiento isotrópico (5.14) que sólo depende del parámetro α . Por lo tanto, como resultado de la presencia simultánea del acoplamiento tipo Rashba y tipo Dresselhaus[001], aparece otro parámetro manipulable (n) con el cual es posible controlar $D_{+-}(\omega)$ en adición a la modulabilidad del parámetro α [3].

En la Figura 5.4a se muestra la densidad conjunta de estados para el caso con acoplamiento R+D[001]. La forma asimétrica de $D_{+-}(\omega)$ se debe a la función angular $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\text{sen}2\theta$ en la ecuación (5.7). Los picos que se observan en la Figura 5.4a corresponden a excitaciones electrónicas que involucran estados con vectores de onda que caen sobre $C_r(\omega)$. De tal forma que el desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín, obliga a que las transiciones sólo se lleven a cabo en valores específicos de \mathbf{k} , es decir, sólo en ciertos ángulos. Para ilustrar este último punto, en la Figura 5.4b

se muestra la región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones verticales de ε_- a ε_+ , como función de la energía $\hbar\omega$. Sólo la región sombreada contribuye a la absorción. El límite inferior de la región angular está determinado por la curva $\hbar\Omega_+(\theta)$, mientras que el límite superior lo determina $\hbar\Omega_-(\theta)$. En este caso el ancho de banda es $\Delta\varepsilon \approx 6.49$ meV, puesto que $\hbar\omega_+ \approx 2.74$ meV y $\hbar\omega_- \approx 9.23$ meV, el cual es un orden de magnitud mayor que en el caso con acoplamiento Rashba.

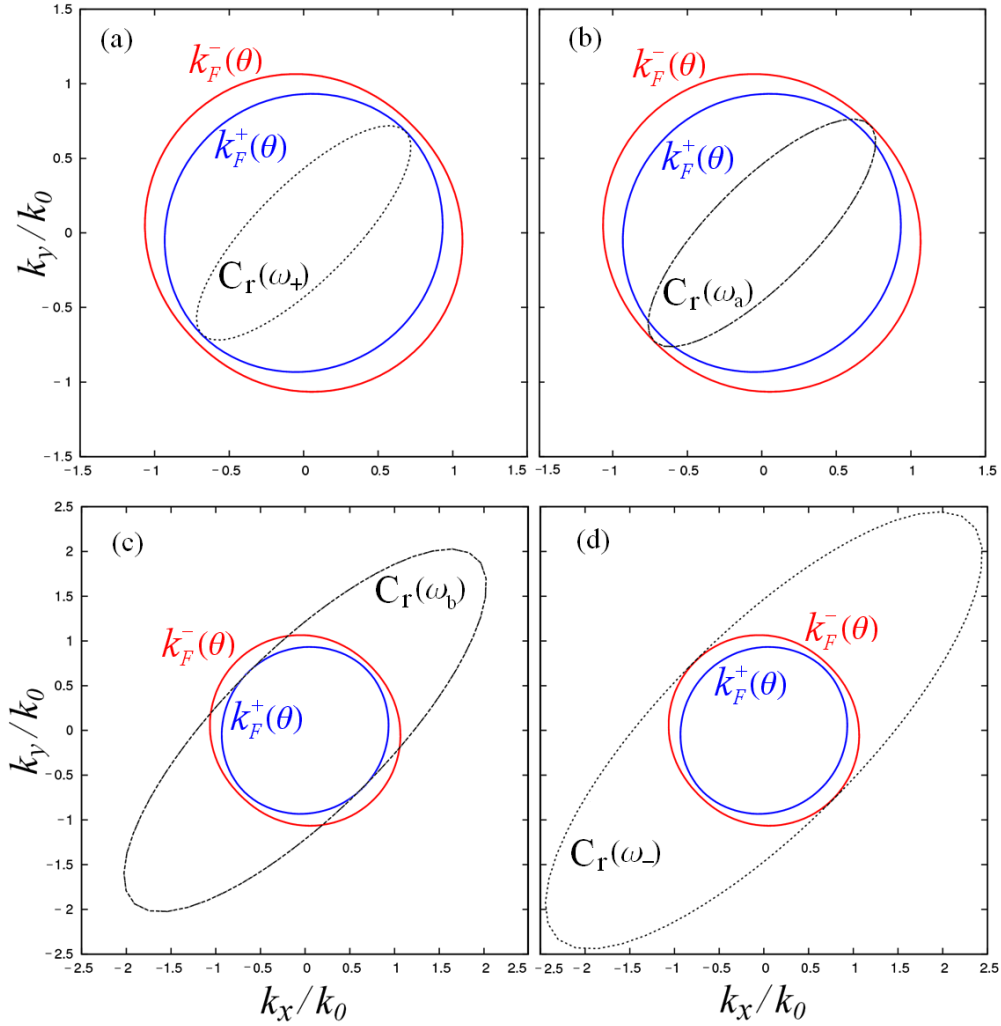


Figura 5.3: La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta_{[001]}|$ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta_{[001]}|$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_a$, (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$, con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV}\text{\AA}$, $\beta_{[001]} = 0.5\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

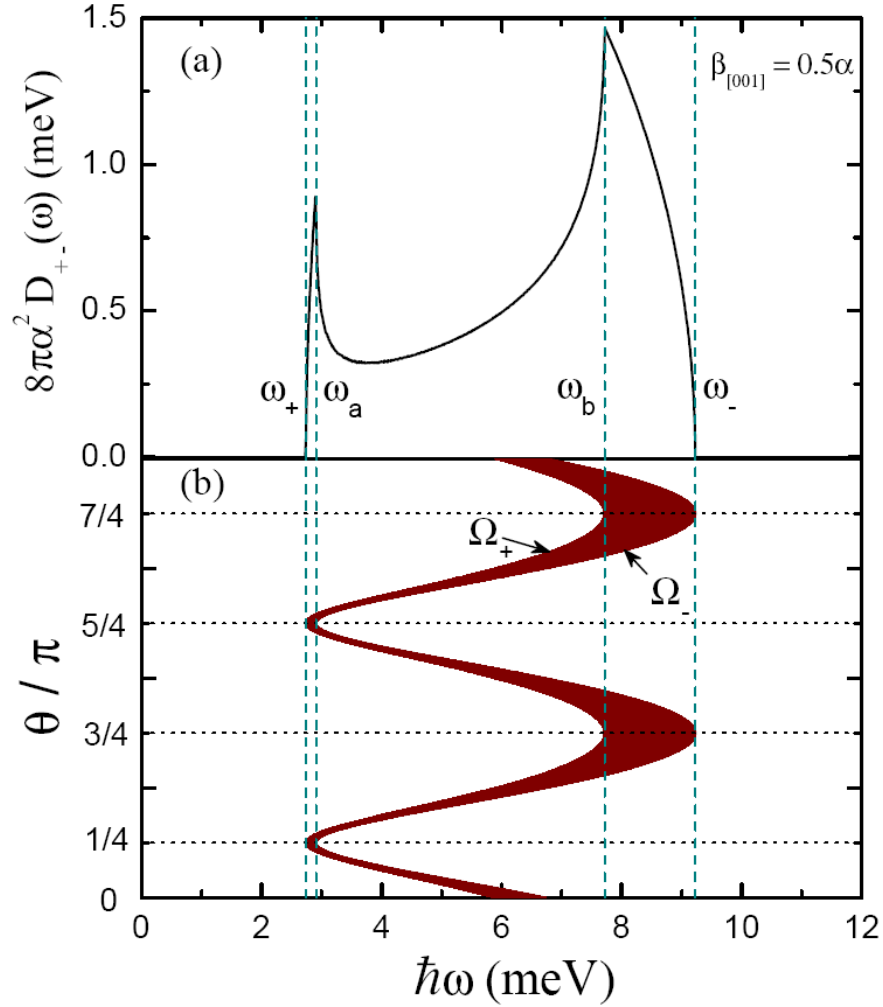


Figura 5.4: (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[001]. (b) Región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/4)$, $\omega_a = \Omega_-(\pi/4)$, $\omega_b = \Omega_+(3\pi/4)$, $\omega_- = \Omega_-(3\pi/4)$ [3]. Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 5.3.

5.4. Caso con acoplamiento R+D[110]

Un caso que no ha sido reportado en la literatura es el de un GE2D con acoplamiento R+D[110]. En este caso $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta}$. Siguiendo un análisis similar al de la sección 5.3, se obtiene que la curva $C_r(\omega)$ describe una elipse con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$ en $\theta_+ = \pi/2$ o $3\pi/2$, y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$ en $\theta_- = 0$ o π , esto es

$$\frac{k_x^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}}\right)^2} + \frac{k_y^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2\alpha}\right)^2} = 1. \quad (5.23)$$

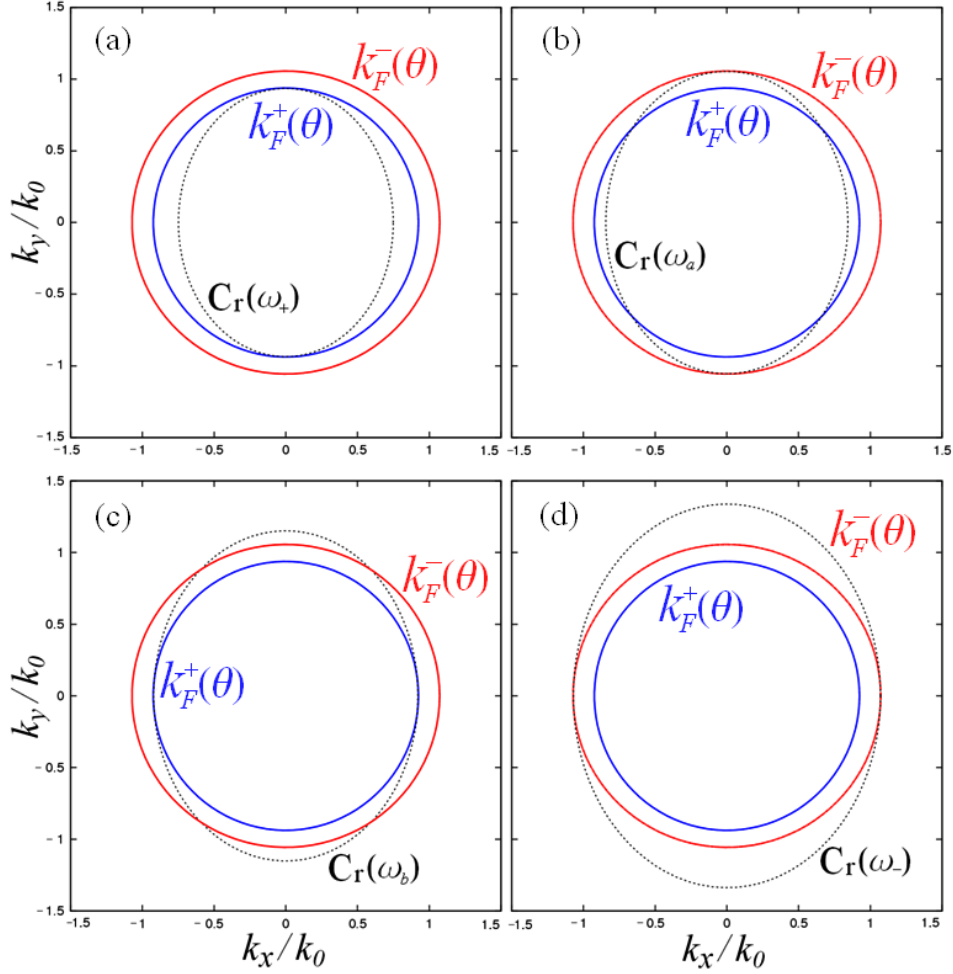


Figura 5.5: La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_a$, (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$, con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV}\text{\AA}$, $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

Asimismo, se obtiene que las energías $\hbar\Omega_\pm(\theta_\pm)$ (Fig. 5.5) están dadas por

$$\hbar\omega_+ = \hbar\Omega_+(\theta_+) = 2\alpha k_F - \frac{2m^*}{\hbar^2}\alpha^2, \quad (5.24)$$

$$\hbar\omega_- = \hbar\Omega_-(\theta_-) = 2k_F\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2). \quad (5.25)$$

Mientras que para $\hbar\Omega_\pm(\theta_\mp)$, se obtiene

$$\hbar\omega_a = \hbar\Omega_-(\theta_+) = 2\alpha k_F + \frac{2m^*}{\hbar^2}\alpha^2, \quad (5.26)$$

$$\hbar\omega_b = \hbar\Omega_+(\theta_-) = 2k_F\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2). \quad (5.27)$$

En este caso $\Delta\varepsilon$ está dado por

$$\Delta\varepsilon = 2k_F \left[\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} - \alpha \right] + \frac{2m^*}{\hbar^2}(2\alpha^2 + \beta_{[110]}^2). \quad (5.28)$$

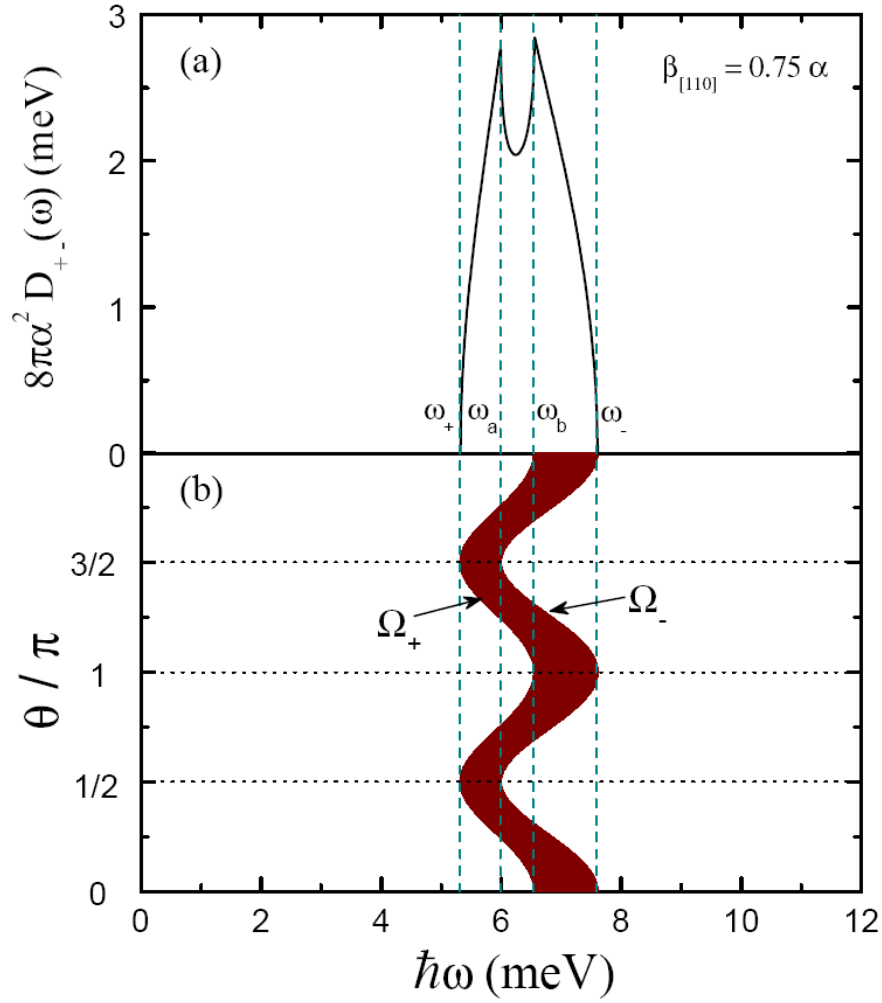


Figura 5.6: (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[110]. (b) Región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/2)$, $\omega_a = \Omega_-(\pi/2)$, $\omega_b = \Omega_+(\pi)$, $\omega_- = \Omega_-(\pi)$. Los parámetros usados son los mismos que en la Figura 5.5.

En la Figura 5.6a se muestra $D_{+-}(\omega)$ para el caso con acoplamiento R+D[110], se

observa que la forma del espectro de $D_{+-}(\omega)$ es más simétrica si se compara con el caso con acoplamiento R+D[001] (Fig. 5.4a). Esta simetría se debe a la función angular $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta$ en (5.7). Asimismo, en la Figura 5.6a se observa que el desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín producido por el acoplamiento R+D[110], restringe los valores de \mathbf{k} involucrados en las transiciones de ε_- a ε_+ a una energía $\hbar\omega$, tal como se muestra en la Figura 5.6b. Dado que $\hbar\omega_+ \approx 5.31$ meV y $\hbar\omega_- \approx 7.58$ meV, el ancho de banda de absorción es $\Delta\varepsilon \approx 2.27$ meV.

5.5. Resumen de resultados

En este capítulo se analizó la densidad conjunta de estados de un GE2D con interacción espín-órbita. Esta función da el número de transiciones verticales que se pueden llevar a cabo entre las sub-bandas ε_+ y ε_- separadas por una energía $\hbar\omega$. Se encontraron expresiones para determinar el ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon$, en el cual se pueden llevar a cabo estas transiciones intersub-banda. Asimismo se encontraron expresiones para la energía máxima $\hbar\omega_-$ y la energía mínima $\hbar\omega_+$, que se requiere absorber para inducir transiciones verticales desde la sub-banda ε_- hasta la sub-banda ε_+ , a un ángulo dado.

Cabe destacar que en el caso con acoplamiento isotrópico, se encontró que $\Delta\varepsilon$ depende esencialmente de las constantes de acoplamiento α y $\beta_{[hkl]}$. En cambio, como resultado de la presencia simultánea del acoplamiento R+D[001], $\Delta\varepsilon$ depende de α y $\beta_{[hkl]}$, así como de la densidad electrónica n . Esta dependencia explícita en n , abre la posibilidad de controlar $D_{+-}(\omega)$ manipulando n , en adición a la modulabilidad del parámetro α .

Cuando se tiene interacción espín-órbita tipo Rashba o R+D[111], el desdoblamiento de los estados de espín es isotrópico, y sucede que para una ω en la banda de absorción, toda la región angular $0 < \theta < 2\pi$ contribuye en $D_{+-}(\omega)$. Por el contrario, el desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín producido por la presencia simultánea de la interacción espín-órbita tipo R+D[001] o R+D[110], obliga a que las transiciones intersub-banda, sólo se lleven a cabo en valores específicos de \mathbf{k} . En particular, en el caso con acoplamiento R+D[001], el desdoblamiento anisotrópico a lo largo de las direcciones (1,1) y (-1,1) en el plano $k_x - k_y$, es el responsable de la absorción y los picos de alta densidad a las energías $\hbar\omega_a$ y $\hbar\omega_b$, respectivamente. En el caso con acoplamiento R+D[110], este desdoblamiento anisotrópico ocurre en las direcciones (1,0) y (0,1).

Así pues, el origen de estas energías nos permite entender y explicar la estructura en $D_{+-}(\omega)$ (Fig. 5.2).

Los resultados muestran que la forma del espectro de $D_{+-}(\omega)$ está determinada por la función angular $\Delta^2(\theta)$ que aparece en la expresión (5.7). En el caso con acoplamiento isotrópico $\Delta^2(\theta)$ es una constante, por este motivo se observa que $D_{+-}(\omega)$ crece linealmente como función de la frecuencia (Fig. 5.2). En el caso con acoplamiento R+D[001] (Fig. 5.4a) la función angular $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\text{sen}2\theta$ da lugar a un espectro más asimétrico, comparado con el del caso con acoplamiento R+D[110] (Fig. 5.6a) en donde $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta$.

En el caso de un GE2D con acoplamiento R+D[001], la forma de la densidad conjunta de estados de la Figura 5.4 y las expresiones (5.18-19) para las energías $\hbar\omega_{\pm}$, $\hbar\omega_a$ y $\hbar\omega_b$, coinciden con los resultados reportados previamente [3]. Sin embargo, la densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[110] y las expresiones para las energías características, no han sido reportadas en la literatura.

En general, los resultados obtenidos nos permiten concluir que la presencia simultánea de la interacción R+D[hkl], abre la posibilidad de tener un mayor control tipo ‘óptico’ sobre los estados de espín, debido a que el ancho de banda de absorción es mayor comparado con los casos isotrópicos. La estructura en la densidad conjunta de estados permite anticipar las frecuencias en las que los espectros de las funciones respuesta mostrarán estructura. Estos resultados son importantes ya que nos permitirán describir las propiedades espectrales de la polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$ en términos de transiciones ópticas y absorción de energía, tal como se mostrará en el siguiente capítulo.

Bibliografía

- [1] M. L. Cohen y J. K. Chelikowsky, *Electronic structure and optical properties of semiconductor* (Springer, Berlin, 1989).
- [2] F. Wooten, *Optical properties of solids* (Academic Press, Nueva York, 1972).
- [3] J.A. Maytorena, C. López-Bastidas y F. Mireles, “Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems”, *Phys. Rev. B* **74**, 235313 (2006).

Capítulo 6

Orientación de espín como respuesta a un campo eléctrico ac

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos al calcular el tensor de polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, el cual describe la orientación de espín $S_i(\omega)$ como respuesta a un campo eléctrico homogéneo $E_j(\omega)$. Este campo se aplica en el plano xy de un GE2D con interacción espín-órbita. Se evalúan numéricamente las expresiones de $\gamma_{ij}(\omega)$ obtenidas en el Capítulo 4. En la Sección 6.1 se considera el caso de un GE2D con acoplamiento Rashba y R+D[001], mientras que en la Sección 6.2 se estudia el caso R+D[110].

6.1. Acoplamiento Rashba+Dresselhaus[001]

En el Capítulo 4 se encontró que el tensor de polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, se puede expresar en términos de la susceptibilidad de espín $\chi_{ij}(\omega)$ a través de la relación (4.51).

Cuando se tiene acoplamiento R+D[001], los espinores $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ están dados por (3.42), estos espinores son los que se utilizan para calcular los elementos de matriz (4.56) (ver Apéndice C), con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} \Delta^2(\theta) M_{ij}(\theta) = & \delta_{ij} [(\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta)^2 \delta_{ix} + (\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta)^2 \delta_{iy} + \Delta^2(\theta) \delta_{iz}] \\ & + (1 - \delta_{ij}) [(1 - \delta_{iz})(1 - \delta_{jz}) (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta)(\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta) \\ & + i\Delta(\theta)(\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta) \epsilon_{yij} - i\Delta(\theta)(\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta) \epsilon_{xij}], \end{aligned} \quad (6.1)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker y ϵ_{ijk} es el tensor de Levi-Civita. Al sustituir estos elementos de matriz en las expresiones (4.63) y (4.66) de la parte real e imaginaria de $\chi_{ij}(\omega)$, respectivamente, se obtiene mediante la evaluación numérica que $I'_{ij}(\omega) =$

$I''_{ij}(\omega) = 0$ (ver Apéndice C).

De (6.1) se puede ver que los elementos de matriz $M_{xy}(\theta) = M_{yx}(\theta)$, de tal forma que al sustituirlos en (4.63) y (4.66) se obtiene la relación de simetría $\chi_{xy}(\omega) = \chi_{yx}(\omega)$. Por otro lado, al evaluar numéricamente el resto de las componentes se obtiene que $\chi_{xx}(\omega) = \chi_{yy}(\omega)$ y $\chi_{xz}(\omega) = \chi_{zx}(\omega) = \chi_{yz}(\omega) = \chi_{zy}(\omega) = 0$. Con estos resultados el tensor $\chi_{ij}(\omega)$ es una matriz de 3×3 de la forma

$$\chi_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \chi_{xx} & \chi_{xy} & 0 \\ \chi_{xy} & \chi_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{zz} \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

Usando (6.2) en (4.51), el tensor de polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$ puede escribirse como

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [\chi_{ix}(\omega) (\alpha\delta_{jy} - \beta_{[001]}\delta_{jx}) + \chi_{iy}(\omega) (\beta_{[001]}\delta_{jy} - \alpha\delta_{jx})] \quad (i, j = x, y). \quad (6.3)$$

Nótese que aún cuando $\chi_{zz}(\omega) \neq 0$, esta componente no está involucrada en el tensor $\gamma_{ij}(\omega)$. Este resultado muestra que el tensor de polarizabilidad de espín sólo tiene componentes en el plano xy del GE2D, por lo tanto la respuesta de espín en la dirección normal al plano es cero.

De la ecuación (6.3) se puede ver que las expresiones para las componentes $\gamma_{xx}(\omega)$ y $\gamma_{yy}(\omega)$ están dadas por

$$\gamma_{xx}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [-\beta_{[001]}\chi_{xx}(\omega) - \alpha\chi_{xy}(\omega)] , \quad (6.4)$$

$$\gamma_{yy}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [\alpha\chi_{yx}(\omega) + \beta_{[001]}\chi_{yy}(\omega)] , \quad (6.5)$$

tomando en cuenta que $\chi_{xx}(\omega) = \chi_{yy}(\omega)$ y $\chi_{xy}(\omega) = \chi_{yx}(\omega)$, se obtiene la relación de simetría $\gamma_{xx}(\omega) = -\gamma_{yy}(\omega)$. Similarmente, para las componentes $\gamma_{xy}(\omega)$ y $\gamma_{yx}(\omega)$ se tiene que

$$\gamma_{xy}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [\alpha\chi_{xx}(\omega) + \beta_{[001]}\chi_{xy}(\omega)] , \quad (6.6)$$

$$\gamma_{yx}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [-\beta_{[001]}\chi_{yx}(\omega) - \alpha\chi_{yy}(\omega)] , \quad (6.7)$$

lo que conduce a la relación $\gamma_{xy}(\omega) = -\gamma_{yx}(\omega)$.

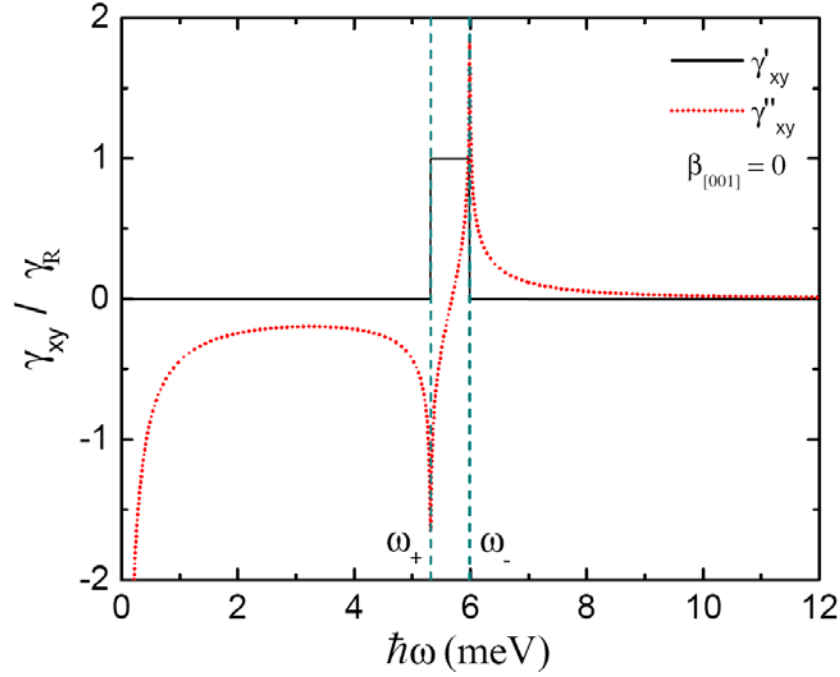


Figura 6.1: Componente $\gamma_{xy}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín, para el caso con acoplamiento Rashba, donde $\gamma_R = |\gamma_{xy}(\omega)|$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV\AA}$, $n = 5 \times 10^{11}\text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

Acoplamiento isotrópico

Si se considera el caso cuando sólo está presente el acoplamiento Rashba ($\alpha \neq 0$, $\beta_{[001]} = 0$) o R+D[111], se obtiene que $\chi_{xy}(\omega) = \chi_{yx}(\omega) = 0$. De tal forma que (6.3) se reduce a

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{e\alpha}{i\hbar\omega} [\chi_{ix}(\omega)\delta_{jy} - \chi_{iy}(\omega)\delta_{jx}] . \quad (6.8)$$

En este caso vemos que $\gamma_{xx}(\omega) = \gamma_{yy}(\omega) = 0$ y se sigue cumpliendo la relación de simetría $\gamma_{xy}(\omega) = -\gamma_{yx}(\omega)$. En la Figura 6.1 se muestra el cálculo numérico de la componente $\gamma_{xy}(\omega)$ correspondiente el caso con acoplamiento Rashba, donde el tensor $\gamma_{xy}(\omega)$ está expresado en unidades de la polarizabilidad γ_R , definida como

$$\begin{aligned} \gamma_R &= |\gamma_{xy}(\omega)|_{\hbar\omega=\Delta_R} \\ &= \frac{e\alpha}{\Delta_R} |\chi_{xx}(\omega = \frac{\Delta_R}{\hbar})| \\ &= \frac{e}{16\alpha} , \end{aligned} \quad (6.9)$$

recordando que $\Delta_R = 2\alpha k_F$ es la energía del desdoblamiento de los estados de espín (ver Figura 3.2a). En la Figura 6.1 se puede observar que la parte imaginaria $\gamma''_{xy}(\omega)$ muestra estructura en las frecuencias características ω_{\pm} , mientras que la parte real toma el valor constante $\gamma'_{xy}(\omega) = \gamma_R$ en el rango $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_-$. El origen de las frecuencias ω_{\pm} es resultado del desdoblamiento isotrópico de los estados de espín (5.13), tal como se discutió en el Capítulo 5. Por lo tanto, la estructura observada en $\gamma_{ij}(\omega)$ se puede entender en términos de procesos de absorción de energía y de transiciones verticales desde la sub-banda ε_- hasta la sub-banda ε_+ , a un ángulo determinado.

Por otro lado, en la Figura 6.2 se muestran las componentes $\gamma_{xx}(\omega)$ y $\gamma_{xy}(\omega)$ correspondientes al caso R+D[001]. Se puede ver que la forma de los espectros en la Figura 6.2 son claramente distintos del caso isotrópico debido a que $\gamma_{ij}(\omega)$ se vuelve asimétrico y el ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon$ es aproximadamente un orden de magnitud mayor que en el caso con acoplamiento Rashba (Figura 6.1). Se observa estructura en las frecuencias características ω_{\pm} , así como en las frecuencias ω_a y ω_b , las cuales se sabe de acuerdo a lo estudiado en el Capítulo 5, son resultado de ciertas transiciones intersub-banda de alta densidad, que están determinadas por la anisotropía del acoplamiento R+D[001] (Figuras 5.3 y 5.4). Esta anisotropía genera que la magnitud y el signo de la función respuesta $\gamma_{ij}(\omega)$, y por lo tanto la orientación de espín $S_i(\omega)$, dependan de la frecuencia ω del campo eléctrico $E_j(\omega)$. La parte imaginaria $\gamma''_{ij}(\omega)$ se mantiene prácticamente constante cuando $\omega_a \leq \omega \leq \omega_b$. Asimismo, se observa que al aumentar la frecuencia, $\gamma_{ij}(\omega) \rightarrow 0$.

En las Figuras 6.1 y 6.2, se puede observar que en el límite de baja frecuencia ($\omega \rightarrow 0$), la parte imaginaria de $\gamma_{ij}(\omega)$ diverge, por lo que no es posible determinar el valor estático $\gamma_{ij}(0)$ utilizando el formalismo de Kubo. En este contexto, en un estudio hecho en el límite de baja frecuencia, Raichev [1] utilizó la ecuación cinética cuántica de la función de distribución de los electrones, que incorpora los procesos de dispersión por impurezas, y encontró que la polarizabilidad estática a frecuencia cero está dada por

$$\gamma_0 = \frac{em^*\beta_{[001]}}{2\pi\hbar^2\nu}, \quad (6.10)$$

donde $1/\nu$ es el tiempo de relajación del momento. Reportó que al disminuir la frecuencia, las componentes de la polarizabilidad de espín se aproximan a sus valores estáticos dados por $\gamma_{xx}(0) = \gamma_0$ y $\gamma_{yx}(0) = (\alpha/\beta_{[001]})\gamma_0$. En el caso particular cuando $\alpha = \beta_{[001]}$, obtiene que $\gamma_{ij}(\omega) = 0$, esto quiere decir que a cualquier frecuencia no hay

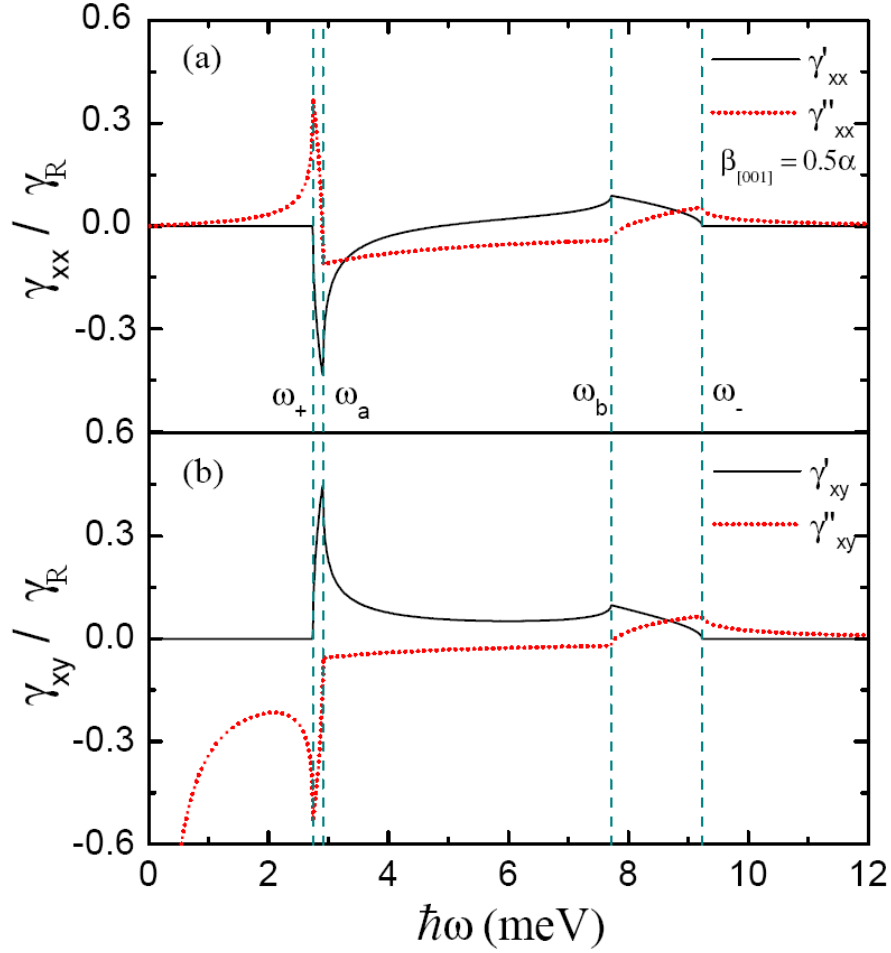


Figura 6.2: Componentes (a) $\gamma_{xx}(\omega)$ y (b) $\gamma_{xy}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín para el caso con acoplamiento R+D[001], con $\beta_{[001]} = 0.5 \alpha$. El resto de los parámetros usados son los mismos que en la Figura 6.1.

polarización de espín. Esta cancelación de la polarizabilidad de espín, se debe a que en el caso $\alpha = \beta_{[001]}$ existe una dirección fija de cuantización, esto quiere decir que el campo espín-órbita $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ no depende de \mathbf{k} , y por lo tanto los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan, como consecuencia el espín se conserva.

En el formalismo de Kubo empleando para analizar $\gamma_{ij}(\omega)$, consideramos el límite sin colisiones, esto es, $\nu \rightarrow 0$. No obstante, en el régimen de frecuencia finita en el cual estamos interesados, las relaciones de simetría de $\gamma_{ij}(\omega)$ obtenidas con nuestro cálculo, son las mismas que obtuvo Raichev [1]. En nuestro caso también sucede que $\gamma_{ij}(\omega) = 0$, cuando $\alpha = \beta_{[001]}$.

Tomando en cuenta las relaciones de simetría del tensor $\gamma_{ij}(\omega)$, la orientación de

espín $S_i(\omega)$ generada por un campo eléctrico $E_j(\omega)$, en presencia del acoplamiento R+D[001], está dada por

$$\mathbf{S}(\omega) = \frac{\hbar}{2} [\gamma_{xx}(\omega) (E_x(\omega)\hat{\mathbf{x}} - E_y(\omega)\hat{\mathbf{y}}) + \gamma_{xy}(\omega)\mathbf{E}(\omega) \times \hat{\mathbf{z}}] \quad (6.11)$$

o en forma matricial como

$$\begin{pmatrix} S_x(\omega) \\ S_y(\omega) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \gamma_{xx} & \gamma_{xy} \\ -\gamma_{xy} & \gamma_{xx} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x(\omega) \\ E_y(\omega) \end{pmatrix}. \quad (6.12)$$

De las expresiones (6.11) y (6.12) es evidente que la orientación de espín depende de la frecuencia del campo eléctrico $\mathbf{E}(\omega)$. No obstante, $|\mathbf{S}(\omega)|$ depende también de la dirección de $\mathbf{E}(\omega)$, esto quiere decir que la polarización de espín es anisotrópica, característica que ha sido poco estudiada hasta ahora [2]. Para analizar en detalle esta anisotropía, se calcula la magnitud de $\mathbf{S}(\omega)$ como

$$\begin{aligned} |\mathbf{S}(\omega)|^2 &= |S_x(\omega)|^2 + |S_y(\omega)|^2 \\ &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 E^2 [|\gamma_{xx}|^2 + |\gamma_{xy}|^2 + 2\text{Re}(\gamma_{xx}\gamma_{xy}^*) \text{sen } 2\varphi], \end{aligned} \quad (6.13)$$

donde φ es el ángulo polar del campo eléctrico $\mathbf{E}(\omega)$ en el plano xy del GE2D. En la Figura 6.3a se muestra la magnitud de la orientación de espín $|\mathbf{S}(\omega)|/S_0$, como función de la frecuencia ω y el ángulo φ del campo eléctrico, donde se ha definido $S_0 = \gamma_R E$. Se observa que la orientación de espín adquiere su valor máximo cuando el campo eléctrico se aplica a un ángulo de $\varphi = 3\pi/4$ (o $7\pi/4$) y a frecuencias que tales que $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_a$. También se observa estructura en $\omega_b \leq \omega \leq \omega_-$, cuando $\varphi = \pi/4$ (o $5\pi/4$). Esto se puede ver con mayor claridad en la Figura 6.3b, donde se muestra un mapa de intensidad de $|\mathbf{S}(\omega)|/S_0$, como función de $\hbar\omega$ y φ . Un aspecto importante por resaltar es que a cualquier frecuencia se puede ver que existe una polarización de espín distinta de cero.

Ahora bien, si escribimos (6.13) como

$$|\mathbf{S}(\omega)|^2 = \left(\frac{\hbar}{2}E\right)^2 \left[|\gamma_{xx}|^2 + |\gamma_{xy}|^2 + \frac{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2}{\alpha\beta_{[001]}} \text{Re}(\gamma_{xx}\gamma_{xy}^*) - \frac{\Delta^2(\varphi)}{\alpha\beta_{[001]}} \text{Re}(\gamma_{xx}\gamma_{xy}^*) \right], \quad (6.14)$$

donde $\Delta^2(\varphi) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \text{sen } 2\varphi$ (ver ecuación 3.51), se pone de manifiesto que a una frecuencia ω dada, la forma anisotrópica de $|\mathbf{S}(\omega)|$ está determinada por la función angular $\Delta^2(\varphi)$, la cual es resultado del desdoblamiento anisotrópico de los

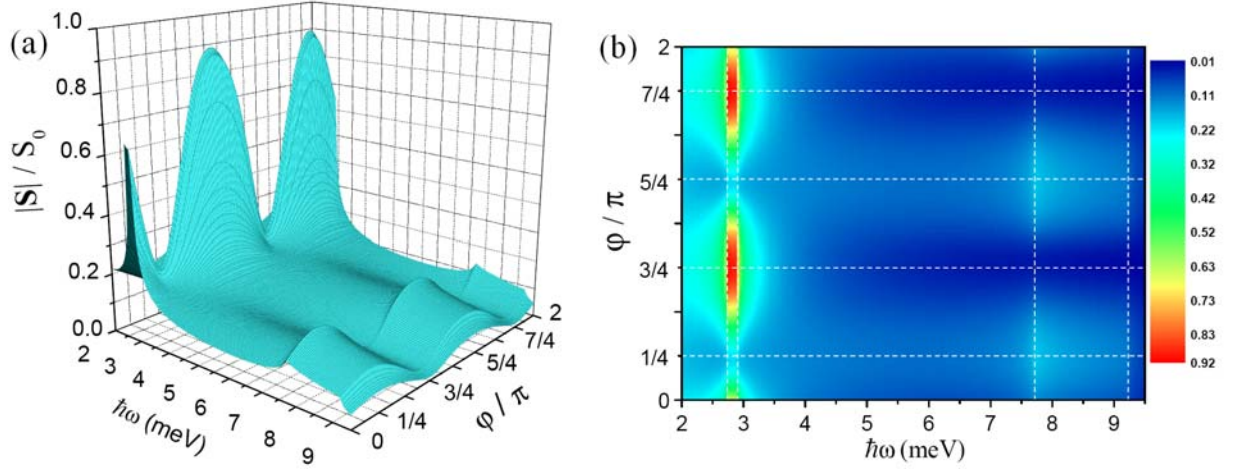


Figura 6.3: (a) Magnitud de la polarización de espín $|\mathbf{S}|/S_0$ como función de la frecuencia ω y ángulo φ del campo eléctrico aplicado en el plano del GE2D con acoplamiento R+D[001]. (b) Mapa de intensidad de $|\mathbf{S}|/S_0$, como función de ω y φ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 6.2.

estados de espín.

Cabe mencionar que cuando se tiene acoplamiento isotrópico, el tensor $\gamma_{xx}(\omega) = 0$ y $\Delta(\varphi)$ es constante, de modo que la polarización de espín no depende de la dirección en que se aplica el campo eléctrico, esto es,

$$|\mathbf{S}(\omega)| = \frac{\hbar}{2} E |\gamma_{xy}|. \quad (6.15)$$

El resultado que da esta expresión indica que para cualquier φ , $\mathbf{S}(\omega)$ adquiere su valor máximo en el rango de frecuencias $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_-$.

6.2. Acoplamiento Rashba+Dresselhaus[110]

En el caso con acoplamiento R+D[110], los espinores están dados por (3.46) (ver Apéndice C), de modo que los elementos de matriz toman la forma

$$\begin{aligned} \Delta^2(\theta) M_{ij}(\theta) = & \delta_{ij} \left[\alpha^2 \delta_{iz} + (\beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \cos^2 \theta \delta_{ix} + \alpha^2 \sin^2 \theta \delta_{iy})(1 - \delta_{iz}) \right] \\ & + (1 - \delta_{ij}) \left\{ (1 - \delta_{iz})(1 - \delta_{jz}) [\alpha^2 \sin \theta \cos \theta - i\beta_{[110]} \Delta(\theta) \cos \theta \epsilon_{zij}] + \right. \\ & (1 - \delta_{iy})(1 - \delta_{jy}) [-\alpha\beta_{[110]} \sin \theta \cos \theta + i\alpha\Delta(\theta) \cos \theta \epsilon_{yij}] + \\ & \left. (1 - \delta_{ix})(1 - \delta_{jx}) [\alpha\beta_{[110]} \cos^2 \theta - i\alpha\Delta(\theta) \sin \theta \epsilon_{xij}] \right\}. \quad (6.16) \end{aligned}$$

Al igual que en el sección anterior, se utilizan estos elementos de matriz para evaluar las expresiones de la parte real e imaginaria del tensor $\chi_{ij}(\omega)$. Al sustituir (6.16) en (4.63) y (4.66), se obtiene que $I'_{ij}(\omega) = I''_{ij}(\omega) = 0$ (ver Apéndice C).

En este caso se obtiene la relación de simetría $\chi_{yz}(\omega) = \chi_{zy}(\omega)$, mientras que $\chi_{xy}(\omega) = \chi_{yx}(\omega) = \chi_{zx}(\omega) = \chi_{xz}(\omega) = 0$. Por lo tanto, el tensor $\chi_{ij}(\omega)$ es una matriz de 3×3 de la forma

$$\chi_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \chi_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{yy} & \chi_{zy} \\ 0 & \chi_{zy} & \chi_{zz} \end{pmatrix}. \quad (6.17)$$

Con estos resultados es posible escribir el tensor $\gamma_{ij}(\omega)$ como

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{e}{i\hbar\omega} [\alpha\chi_{ix}(\omega)\delta_{jy} - \alpha\chi_{iy}(\omega)\delta_{jx} + \beta_{[110]}\chi_{iz}(\omega)\delta_{jx}] \quad (i = x, y, z ; j = x, y). \quad (6.18)$$

En este sistema, Raichev [1] encontró la relación de simetría $\gamma_{zx}(\omega) = -(\beta_{[110]}/\alpha)\gamma_{yx}(\omega)$, que en nuestro caso también se cumple esta relación entre las componentes $\gamma_{zx}(\omega)$ y $\gamma_{yx}(\omega)$. Además, se puede verificar analíticamente que cuando $\alpha = 0$, el tensor $\gamma_{ij}(\omega) = 0$, esto quiere decir que la sola presencia del acoplamiento Dresselhaus[110] no genera una polarización de espín independientemente del valor de la frecuencia.

En la Figura 6.4 se muestran las componentes $\gamma_{xy}(\omega)$ y $\gamma_{zx}(\omega)$. Se puede observar que hay estructura en las frecuencias características ω_{\pm} , ω_a y ω_b (ver Figura 5.5). Una característica notable es que la estructura en la componente $\gamma_{zx}(\omega)$ indica que se puede generar una respuesta de espín normal al plano del gas, que en el caso con acoplamiento R+D[001] no ocurre (6.3).

Utilizando (6.3), la orientación de espín $S_i(\omega)$ en presencia del acoplamiento R+D[110], está dada por

$$\mathbf{S}(\omega) = \frac{\hbar}{2} [\gamma_{xy}(\omega)E_y(\omega)\hat{\mathbf{x}} + \gamma_{yx}(\omega)E_x(\omega)\hat{\mathbf{y}} + \gamma_{zx}(\omega)E_x(\omega)\hat{\mathbf{z}}] \quad (i = x, y, z, j = x, y) \quad (6.19)$$

o en forma matricial

$$\begin{pmatrix} S_x(\omega) \\ S_y(\omega) \\ S_z(\omega) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & \gamma_{xy} & 0 \\ \gamma_{yx} & 0 & 0 \\ \gamma_{zx} & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x(\omega) \\ E_y(\omega) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (6.20)$$

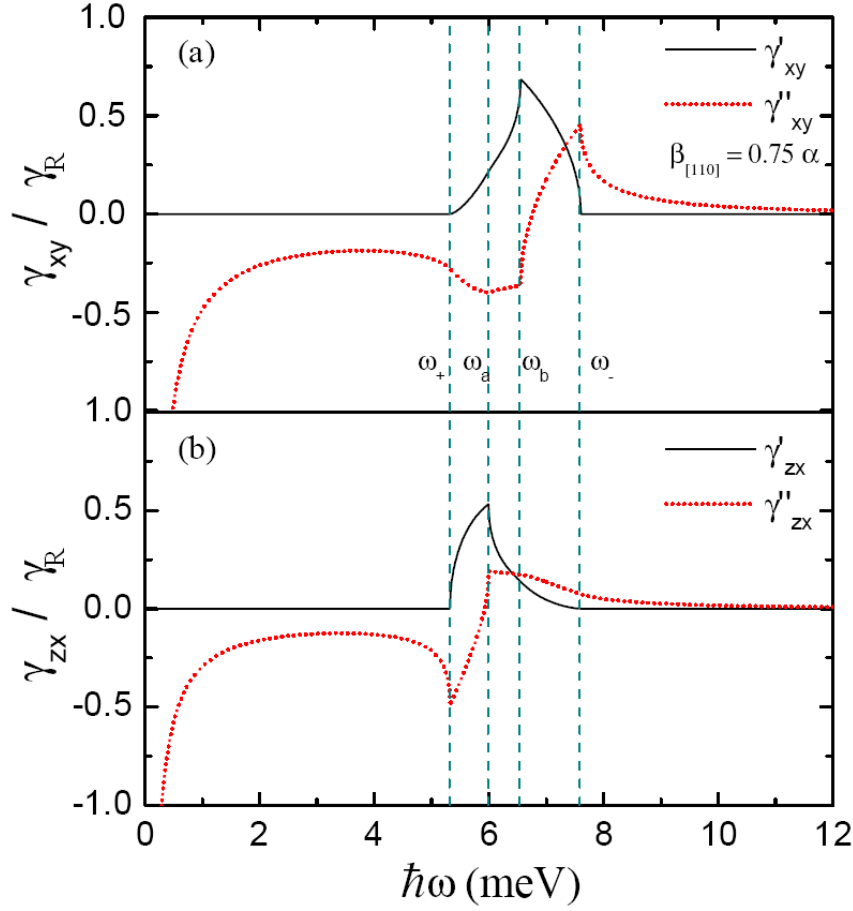


Figura 6.4: Componente (a) $\gamma_{xy}(\omega)$ y (b) $\gamma_{zx}(\omega)$ del tensor de polarizabilidad de espín con acoplamiento R+D[110], con $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$. El resto de los parámetros usados son los mismos que en la Fig. 6.1.

Es importante notar que sólo cuando se tiene la presencia conjunta del acoplamiento R+D[110], se pueden inducir espines orientados en la dirección $\hat{\mathbf{z}}$, lo cual como se ha mencionado en capítulos anteriores, puede ser de gran interés en la investigación experimental de fenómenos espintrónicos.

Al calcular la magnitud de $\mathbf{S}(\omega)$, se obtiene

$$\begin{aligned}
 |\mathbf{S}(\omega)|^2 &= |S_x(\omega)|^2 + |S_y(\omega)|^2 + |S_z(\omega)|^2 \\
 &= \left(\frac{\hbar}{2}\right)^2 \frac{E^2}{2} [|\gamma_{xy}|^2 + |\gamma_{yx}|^2 + |\gamma_{zx}|^2 + (|\gamma_{yx}|^2 + |\gamma_{zx}|^2 - |\gamma_{xy}|^2) \cos 2\varphi] .
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

El resultado anterior indica claramente que la polarización de espín es anisotrópica, puesto que depende de la dirección en la que se aplica el campo eléctrico. En la Figura 6.5a se muestra $|\mathbf{S}(\omega)|/S_0$, como función de la frecuencia ω y el ángulo φ del campo

eléctrico; mientras que en la Figura 6.5b se muestra un mapa de intensidad. En ambas figuras se puede ver que la orientación de espín alcanza su máximo al aplicar el campo eléctrico a un ángulo de $\varphi = 0$ (o π) y a frecuencias tales que $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_a$. Asimismo, se observa que para cualquier ω se genera una polarización neta de espín.

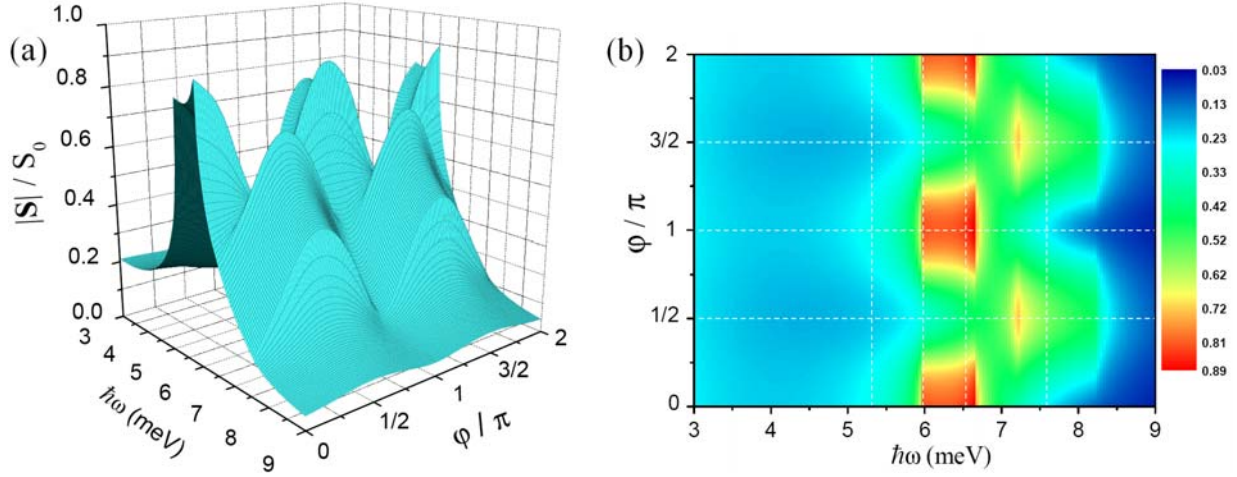


Figura 6.5: (a) Magnitud de la polarización de espín $|S|/S_0$ como función de la frecuencia ω y dirección φ del campo eléctrico aplicado en el plano del GE2D con acoplamiento R+D[110]. (b) Mapa de intensidad de $|S|/S_0$ como función de ω y φ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Fig. 6.4.

6.3. Resumen de resultados

Los principales resultados de esta tesis se presentan en este capítulo. La forma de los espectros de las Figuras 6.2 y 6.4, obtenidos al evaluar el tensor de polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, ponen de manifiesto la importancia de la presencia simultánea del acoplamiento R+D[001] o R+D[110]. Esto se debe a que el acoplamiento anisotrópico da lugar a que la magnitud y el signo de la polarizabilidad de espín dependan de la frecuencia del campo eléctrico $E_j(\omega)$, y como consecuencia que la orientación de espín $S_i(\omega)$ también sea sensible a la frecuencia ω . Además, en estos casos el ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon$ en el cual es posible variar la polarizabilidad de espín como función de ω , es un orden de magnitud mayor que en el caso con acoplamiento Rashba.

En las Figuras 6.2 y 6.4, se observa estructura en las frecuencias características ω_{\pm} , así como en las frecuencias ω_a y ω_b , las cuales se sabe de acuerdo a lo estudiado en el Capítulo 5, son resultado de ciertas transiciones intersub-banda de alta densidad, que

están determinadas por la anisotropía del acoplamiento R+D[001]

Asimismo, se verificó la predicción teórica acerca de la anisotropía de la polarización de espín [2], ya que en las expresiones (6.13) y (6.19), se muestra que la magnitud de la polarización de espín también depende de la dirección en la que se aplica el campo eléctrico. Por el contrario, en el caso de acoplamiento isotrópico, se observa un comportamiento espectral diferente del correspondiente al acoplamiento R+D[001] o R+D[110]. En este caso, la polarización de espín no depende de la dirección en que se aplica el campo eléctrico, sólo depende de la frecuencia.

Una aspecto muy importante que sólo se observa cuando está presente el acoplamiento R+D[110], es la orientación eléctrica de espines perpendiculares al plano del gas de electrones. Este resultado es totalmente distinto al obtenido en el caso del acoplamiento Rashba o el acoplamiento Dresselhaus[001], en donde el espín está orientado sólo en el plano xy del gas de electrones. Como se ha mencionado en capítulos anteriores, la generación de una polarización de espines fuera del plano del gas de electrones puede ser de gran interés en la investigación experimental de fenómenos espintrónicos, ya que puede ser detectada ópticamente con técnicas experimentales, como la microscopía basada en rotación de Kerr.

También se obtuvo que $\gamma_{ij}(\omega) = 0$, para cualquier frecuencia del campo eléctrico, cuando los parámetros de acoplamiento de Rashba y Dresselhaus[001] son iguales, $\alpha = \beta_{[001]}$. Esta cancelación de la polarizabilidad de espín también ocurre en pozos cuánticos simétricos crecidos en la dirección [110], esto es, cuando $\alpha = 0$ y $\beta_{[110]} \neq 0$. Raichev reportó que esta notable característica, se debe a que existe una dirección fija de cuantización. Esto quiere decir que el campo espín-órbita $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ no depende de \mathbf{k} , y por lo tanto los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan. Por tanto, el espín se conserva.

Finalmente, podemos concluir que los resultados anteriores sugieren la posibilidad de lograr un control sobre las densidades de espín mediante la variación de la frecuencia o la dirección del campo eléctrico, y no sólo a través de la modulabilidad de α o de variaciones de la densidad electrónica.

Bibliografía

- [1] O. E. Raichev, “Frequency dependence of induced spin polarization and spin current in quantum wells”, *Phys. Rev. B* **75**, 205340 (2007).
- [2] M. Trushin y J. Schliemann, “Anisotropic current-induced spin accumulation in the two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling”, *Phys. Rev. B* **75**, 155323 (2007).

Capítulo 7

Relaciones entre la polarizabilidad de espín y otras funciones respuesta

En este capítulo se derivan relaciones entre la polarización de espín $S_i(\omega)$ estudiada previamente en los Capítulos 4 y 6, con la corriente de carga eléctrica $J_i^s(\omega)$ y la corriente de espín $\mathcal{J}_i^k(\omega)$. Otros autores ya han advertido que es posible relacionar la densidad de espín $S_i(\omega)$ con $J_i^s(\omega)$ y $\mathcal{J}_i^k(\omega)$ [1, 2, 3, 4, 5]. En este sentido, lo que se propone en este capítulo es obtener este tipo de relaciones utilizando el formalismo de la teoría de la respuesta lineal en el límite sin impurezas y considerando un campo eléctrico $E_j(\omega)$ que oscila en el tiempo a frecuencia finita. Los resultados obtenidos muestran coincidencias con trabajos reportados previamente, en particular se hace una comparación con las expresiones reportadas por Raichev [4], que desarrolla su trabajo utilizando la ecuación cinética cuántica de la función de distribución de los electrones que incorpora los procesos de dispersión por impurezas y en el límite de baja frecuencia.

La importancia de este capítulo radica principalmente, en que estas relaciones establecen una conexión entre la corriente de espín y la densidad de espín a través de la interacción espín-órbita, lo cual puede ser útil, si se toma en cuenta que en un experimento resulta más fácil detectar una densidad de espín que una corriente de espín.

7.1. Conductividad de carga eléctrica

Si un GE2D con interacción espín-órbita es excitado por un campo eléctrico $E_j(\omega)$, se produce una corriente eléctrica, $J_i(\omega) = \sigma_{ij}(\omega)E_j(\omega)$, la cual está descrita por el tensor

de conductividad de carga eléctrica,

$$\sigma_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \sigma_D(\omega) + \sigma_{ij}^s(\omega) \quad , \quad i, j = x, y \quad (7.1)$$

donde $\sigma_D(\omega) = ine^2/m^*(\omega + i\eta)$ es la conductividad de Drude, n es la densidad electrónica, $e < 0$ es la carga del electrón y $\sigma_{ij}^s(\omega)$ es la conductividad debida a las transiciones entre las sub-bandas de espín ε_λ , con $\lambda = \pm 1$. La contribución del acoplamiento espín-órbita a la conductividad de carga, se puede determinar por la fórmula de Kubo en términos de la correlación corriente de carga-corriente de carga, esto es

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^s(\omega) &= \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [j_j(t), j_j(0)] \rangle \quad \eta \rightarrow 0^+ \\ &= \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [e v_j(t), e v_j(0)] \rangle . \end{aligned} \quad (7.2)$$

Sustituyendo el operador de velocidad (4.50) en (7.2), se obtiene

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^s(\omega) &= \frac{e^2}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [\frac{1}{\hbar} \sigma_k(t) \mu_{ki}, \frac{1}{\hbar} \sigma_l(0) \mu_{lj}] \rangle \\ &= \frac{e^2}{\hbar(\omega + i\eta)} \frac{1}{\hbar^2} \mu_{ki} \left(\frac{\hbar}{i} \chi_{kl}(\omega) \right) \mu_{lj} \\ &= \frac{e^2}{i\hbar^2(\omega + i\eta)} \mu_{ki} \chi_{kl}(\omega) \mu_{lj} . \end{aligned} \quad (7.3)$$

donde μ_{ij} está dada por (4.49). En la ecuación anterior se obtuvo una relación entre $\sigma_{ij}^s(\omega)$ y el tensor de susceptibilidad de espín $\chi_{ij}(\omega)$. Por lo tanto, usando (4.51), es posible establecer una relación directa entre $\sigma_{ij}^s(\omega)$ y la polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, dada por

$$\sigma_{ij}^s(\omega) = \frac{e}{\hbar} \mu_{ki} \gamma_{kj}(\omega) . \quad (7.4)$$

En el caso isotrópico (ecuación 3.50), por ejemplo, cuando sólo está presente el acoplamiento Rashba, se obtiene que $\Re \sigma_{ij}^s(\omega) = \delta_{ij} \sigma_R$, donde $\sigma_R = e^2/16\hbar$, esto es, la parte real de $\sigma_{ij}^s(\omega)$ no depende de la frecuencia del campo eléctrico, tal como se muestra en la Figura 7.1 donde se graficó $\Re \sigma_{xx}^s(\omega)$.

En la Figura 7.1 también se muestra $\Re \sigma_{xx}^s(\omega)$ correspondiente al acoplamiento R+D[001], cuyo espectro se vuelve más asimétrico debido al desdoblamiento anisotrópico

co de los estados de espín descrito por la función angular $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\text{sen}2\theta$, que en el caso con acoplamiento isotrópico $\Delta(\theta)$ es constante [5]. Si se consideran, por ejemplo, las componentes $\sigma_{xx}^s(\omega)$ y $\sigma_{yy}^s(\omega)$, de (7.4) se obtiene que

$$\sigma_{xx}^s(\omega) = \frac{e}{\hbar} [-\beta_{[001]}\gamma_{xx}(\omega) - \alpha\gamma_{yx}(\omega)] , \quad (7.5)$$

$$\sigma_{yy}^s(\omega) = \frac{e}{\hbar} [\alpha\gamma_{xy}(\omega) + \beta_{[001]}\gamma_{yy}(\omega)] , \quad (7.6)$$

tomando en cuenta que $\gamma_{xx}(\omega) = -\gamma_{yy}(\omega)$ y $\gamma_{xy}(\omega) = -\gamma_{yx}(\omega)$, se obtiene la relación de simetría $\sigma_{xx}^s(\omega) = \sigma_{yy}^s(\omega)$. De manera análoga se puede demostrar que $\sigma_{xy}^s(\omega) = \sigma_{yx}^s(\omega)$. Además, en el Capítulo 6 se encontró que $\gamma_{ij}(\omega) = 0$ en el caso particular cuando $\alpha = \beta_{[001]}$, como consecuencia, la contribución espín-órbita a la conductividad de carga también es cero independientemente del valor de la frecuencia si $\alpha = \beta_{[001]}$.

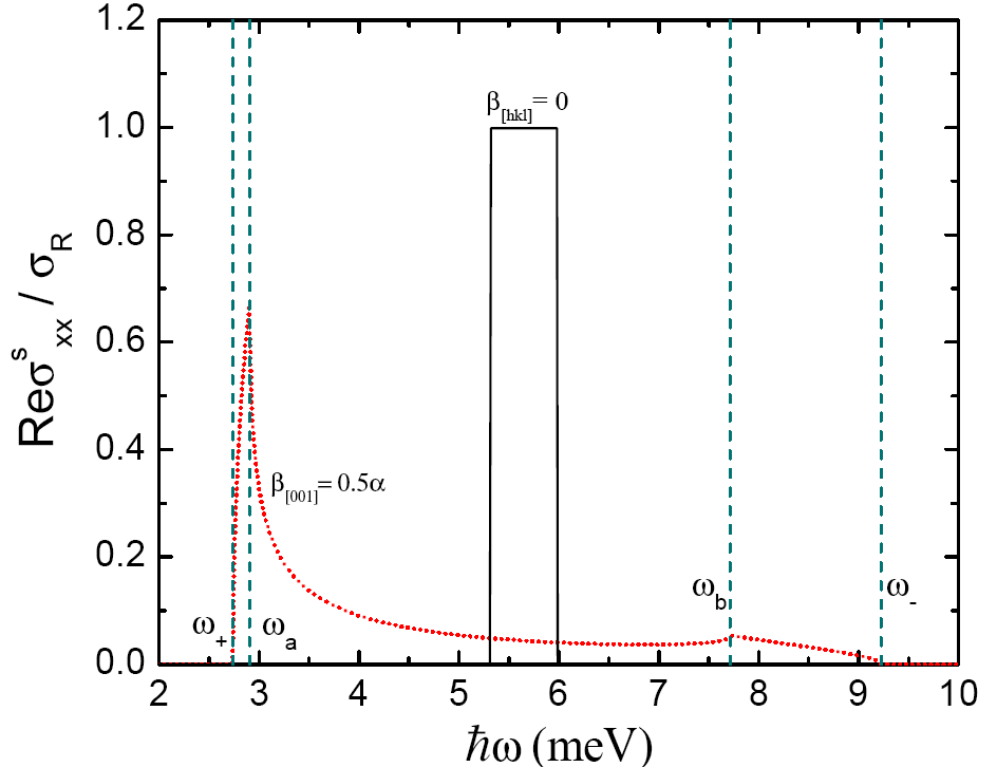


Figura 7.1: Contribución espín-órbita a la conductividad de carga $\text{Re}\sigma_{xx}^s(\omega)$, para el caso con acoplamiento tipo Rashba y tipo R+D[001], donde $\sigma_R = e^2/16\hbar$. Los parámetros usados son $\alpha = 0.6\text{eV}\text{\AA}$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

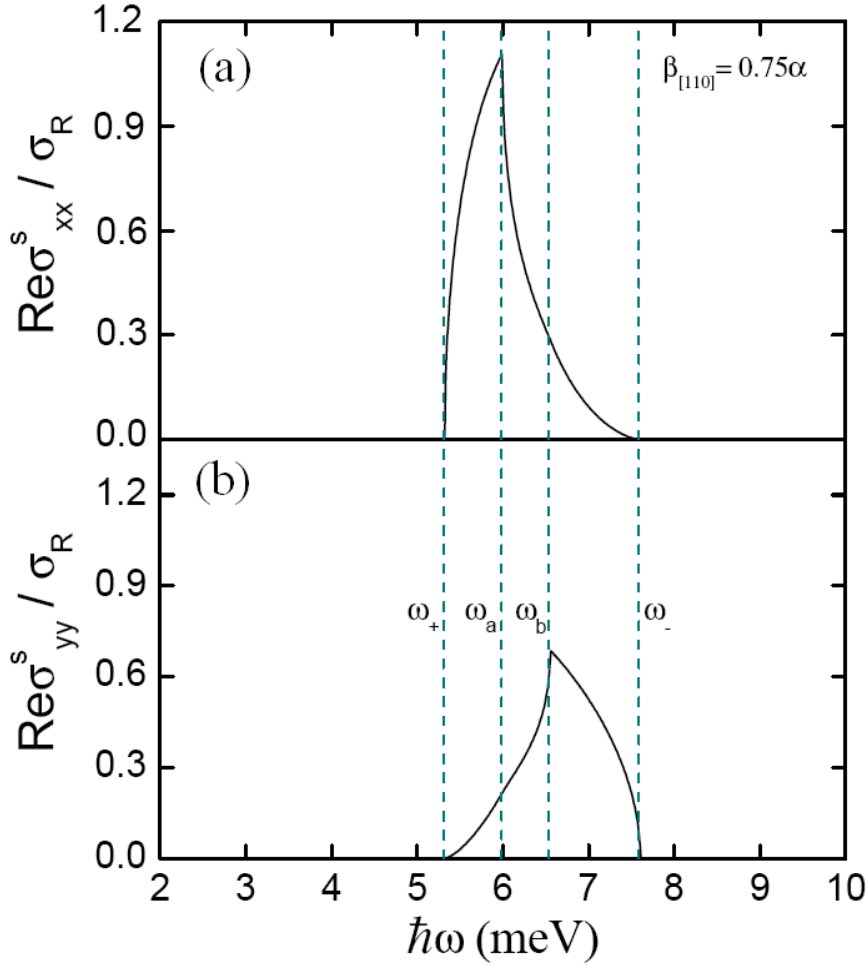


Figura 7.2: Contribución espín-órbita a la conductividad de carga (a) $\text{Re}\sigma_{xx}^s(\omega)$ y (b) $\text{Re}\sigma_{yy}^s(\omega)$, para el caso con acoplamiento R+D[110], donde $\sigma_R = e^2/16\hbar$. Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 7.1.

En presencia del acoplamiento R+D[110], el tensor $\sigma_{ij}^s(\omega)$ se vuelve diagonal. La componente $\sigma_{xx}^s(\omega)$ está dada por

$$\begin{aligned}\sigma_{xx}^s(\omega) &= \frac{e}{\hbar} [-\alpha\gamma_{yx}(\omega) + \beta_{[110]}\gamma_{zx}(\omega)] \\ &= \frac{e}{\hbar} \left(\frac{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}{\beta_{[110]}} \right) \gamma_{zx}(\omega),\end{aligned}\quad (7.7)$$

donde se usó la relación $\gamma_{zx}(\omega) = -(\beta_{[110]}/\alpha)\gamma_{yx}(\omega)$. Para la componente $\sigma_{yy}^s(\omega)$ se obtiene la expresión

$$\sigma_{yy}^s(\omega) = \frac{e}{\hbar}\alpha\gamma_{xy}(\omega). \quad (7.8)$$

En la Figura 7.2 se muestran las componentes $\Re \sigma_{xx}^s(\omega)$ y $\Re \sigma_{yy}^s(\omega)$, para el caso con acoplamiento R+D[110]; como era de esperarse, muestran un comportamiento espectral similar a las componentes $\gamma'_{zx}(\omega)$ y $\gamma'_{xy}(\omega)$, respectivamente, mostradas en la Figura 6.4. Asimismo, puesto que $\gamma_{ij}(\omega) = 0$ cuando $\alpha = 0$ y $\beta_{[110]} \neq 0$, en este caso también ocurre que $\sigma_{ij}^s(\omega) = 0$.

Nótese que la expresión (7.4) establece una relación entre la corriente de carga $J_i^s(\omega) = \sigma_{ij}^s(\omega)E_j(\omega)$ y la orientación de espín $S_i(\omega) = (\hbar/2)\gamma_{ij}(\omega)E_j(\omega)$, dada por

$$J_i^s(\omega) = \frac{2e}{\hbar^2} S_j(\omega) \mu_{ji} , \quad (7.9)$$

o bien, escrita como $J_i^s(\omega) = (2e/\hbar^2)\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{S}(\omega)$, donde $\boldsymbol{\mu}_i$ es el vector definido por la i -ésima columna de la matriz μ_{ki} . Cabe señalar que la expresión (7.9) es similar a la obtenida por Raichev [4] para relacionar $S_j(\omega)$ y la corriente de carga $J_i^s(\omega)$. La única diferencia es que Raichev obtuvo una ecuación que contiene explícitamente el parámetro $1/\nu$, el cual es el tiempo de relajación del momento de los electrones; mientras que la expresión (7.9) no involucra este parámetro, puesto que está basada en el límite sin colisiones ($\nu \rightarrow 0$) bajo el cual se desarrollaron las fórmulas de Kubo (4.51) y (7.2).

Particularmente, en el caso R+D[001], la inversión de la ecuación (7.9) da la siguiente expresión para la orientación de espín

$$S_i(\omega) = \frac{\hbar^2}{2e} (\mu^T)_{ij}^{-1} J_j^s(\omega) , \quad (7.10)$$

donde T indica la operación transpuesta; explícitamente

$$\begin{pmatrix} S_x(\omega) \\ S_y(\omega) \end{pmatrix} = \frac{\hbar^2}{2e} \frac{1}{\alpha^2 - \beta_{[001]}^2} \begin{pmatrix} \beta_{[001]} & \alpha \\ -\alpha & -\beta_{[001]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x^s(\omega) \\ J_y^s(\omega) \end{pmatrix} , \quad (7.11)$$

vemos que la relación entre la orientación de espín $S_i(\omega)$ y la corriente de carga $J_i^s(\omega)$, está determinada por los parámetros de acoplamiento α y $\beta_{[001]}$.

Retomando la ecuación (7.2), al integrar por partes da

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^s(\omega) &= \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \left[\frac{1}{i\tilde{\omega}} e^{i\tilde{\omega}t} \langle [j_i(t), j_j(0)] \rangle \Big|_0^\infty - \frac{1}{i\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[\frac{dj_i(t)}{dt}, j_j(0) \right] \rangle \right] \\ &= \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}^2} \langle [v_i^{so}(0), v_j^{so}(0)] \rangle + \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[\frac{dj_i(t)}{dt}, j_j(0) \right] \rangle \\ &= \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}^2} \frac{1}{\hbar^2} \mu_{ki} \mu_{lj} C_{kl} + \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[\frac{dj_i(t)}{dt}, j_j(0) \right] \rangle , \end{aligned} \quad (7.12)$$

donde $\tilde{\omega} \equiv \omega + i\eta$, $v_j^{so} = \sigma_i \mu_{ij}/\hbar$ es el término debido a la interacción espín-órbita en (4.50), y C_{kl} está dado por

$$\begin{aligned}
C_{kl} &= \langle [\sigma_k(0), \sigma_l(0)] \rangle \\
&= \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})) \langle \lambda \mathbf{k} | [\sigma_k(0), \sigma_l(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle \\
&= 2i\epsilon_{klj} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})) \langle \lambda \mathbf{k} | \sigma_j(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle \\
&= 2i\epsilon_{klj} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \langle -\mathbf{k} | \sigma_j(0) | -\mathbf{k} \rangle .
\end{aligned} \tag{7.13}$$

Al evaluar la expresión anterior se obtiene que $C_{kl} = 0$. Este resultado es consistente con la expresión (3.11), la cual establece que la interacción espín-órbita no genera una polarización espontánea de espín. Por lo tanto (7.12) se reduce a

$$\sigma_{ij}^s(\omega) = \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^{\infty} dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [-\frac{dj_i(t)}{dt}, j_j(0)] \rangle . \tag{7.14}$$

Lo que se hará a continuación es establecer una relación entre $\sigma_{ij}^s(\omega)$ y la conductividad Hall de espín $\Sigma_{ij}^k(\omega)$, a partir de la ecuación (7.14), esto implica a su vez una relación entre $\Sigma_{ij}^k(\omega)$ y la polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$.

7.2. Conductividad Hall de espín

La interacción espín-órbita produce que el operador de corriente tenga una dinámica complicada, esto es,

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{dj_i}{dt} &= e[v_i, H] = e[v_i^{so}, H_{so}] \\
&= \frac{e}{\hbar} [\sigma_m \mu_{mi}, \sigma_l \mu_{ln} k_n] = \frac{e}{\hbar} \mu_{mi} \mu_{ln} k_n [\sigma_m, \sigma_l] \\
&= \frac{2ie}{\hbar} \epsilon_{mlp} \mu_{mi} \mu_{ln} k_n \sigma_p
\end{aligned} \tag{7.15}$$

$$= \frac{2ie}{\hbar} k_n \boldsymbol{\mu}_i \cdot (\boldsymbol{\mu}_n \times \boldsymbol{\sigma}) . \tag{7.16}$$

donde se usó la regla de conmutación de las matrices de Pauli $[\sigma_m, \sigma_l] = 2i\epsilon_{mlp}\sigma_p$.

Por otro lado, el operador de corriente de espín $\hat{\mathcal{J}}_i^j$ definido usualmente por la

expresión $\hat{\mathcal{J}}_i^j = (\hbar/4)(\sigma_j v_i + v_i \sigma_j)$, donde j indica la orientación del espín e i la dirección del transporte, toma la forma

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{J}}_i^j &= \frac{\hbar}{4} \left[\frac{2\hbar k_i}{m^*} \sigma_j + \frac{1}{\hbar} (\sigma_j \sigma_k \mu_{ki} + \sigma_k \mu_{ki} \sigma_j) \right] \\ &= \frac{\hbar^2 k_i}{2m^*} \sigma_j + \frac{1}{4} \mu_{ki} [\sigma_j, \sigma_k]_+ = \frac{\hbar^2 k_i}{2m^*} \sigma_j + \frac{1}{4} \mu_{ki} 2\delta_{jk} \\ &= \frac{\hbar^2}{2m^*} k_i \sigma_j + \frac{1}{2} \mu_{ji} ,\end{aligned}\quad (7.17)$$

donde se utilizó el operador de velocidad dado por (4.50). Si usamos la propiedad $\boldsymbol{\mu}_i \cdot (\boldsymbol{\mu}_n \times \boldsymbol{\sigma}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_n)$ en la ecuación (7.16), podemos despejar el término $k_i \sigma_j$ de (7.17) y sustituirlo en (7.15) y (7.16), con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{dj_i}{dt} &= \frac{2ie}{\hbar} \frac{2m^*}{\hbar^2} \epsilon_{pml} \mu_{mi} \mu_{ln} \left(\hat{\mathcal{J}}_n^p - \frac{\mu_{pn}}{2} \right) \\ &= \frac{2ie}{\hbar} \frac{2m^*}{\hbar^2} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_n)_p \hat{\mathcal{J}}_n^p - \frac{2ie}{\hbar} \frac{2m^*}{\hbar^2} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_n)_p \mu_{pn} ,\end{aligned}\quad (7.18)$$

Nótese que $(\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_n)_p \mu_{pn} = (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_n) \cdot \boldsymbol{\mu}_n = 0$, entonces

$$\frac{dj_i}{dt} = \frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \hat{\mathcal{J}}_l^k .\quad (7.19)$$

La conductividad Hall de espín $\Sigma_{ij}^k(\omega)$ describe una corriente de espines orientados en la dirección k , que se transportan en la dirección i como respuesta a un campo eléctrico $E_j(\omega)$, esto es, $\mathcal{J}_i^k(\omega) \equiv \langle \hat{\mathcal{J}}_i^k(\omega) \rangle = \Sigma_{ij}^k(\omega) E_j(\omega)$, donde $\Sigma_{ij}^k(\omega)$ es la función respuesta corriente de carga-corriente de espín, dada por la fórmula de Kubo

$$\Sigma_{ij}^k(\omega) = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\mathcal{J}_i^k(t), j_j(0)] \rangle .\quad (7.20)$$

De tal manera que al sustituir (7.19) en (7.14), se obtiene

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^s(\omega) &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[\frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \mathcal{J}_l^k(t), j_j(0) \right] \rangle \\ &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \hbar\tilde{\omega} \left[\frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\mathcal{J}_l^k(t), j_j(0)] \rangle \right] ,\end{aligned}\quad (7.21)$$

de la expresión anterior se puede identificar que la relación entre la conductividad de

carga $\sigma_{ij}^s(\omega)$ y la conductividad Hall de espín $\Sigma_{ij}^k(\omega)$, está dada por

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^s(\omega) &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \hbar\tilde{\omega} \Sigma_{ij}^k(\omega) \\ &= \frac{4iem^*}{\hbar^4\tilde{\omega}} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \Sigma_{ij}^k(\omega) \\ &= \frac{4iem^*}{\hbar^4\tilde{\omega}} \epsilon_{kpq} \mu_{pi} \mu_{ql} \Sigma_{ij}^k(\omega) .\end{aligned}\quad (7.22)$$

Usando este resultado y (7.9), es posible encontrar una relación entre la corriente de espín $\mathcal{J}_i^k(\omega)$ y la densidad de espín $S_i(\omega)$, dada por

$$\begin{aligned}J_i^s(\omega) &= \frac{2e}{\hbar^2} S_j(\omega) \mu_{ji} = \sigma_{ij}^s(\omega) E_j(\omega) \\ &= \frac{4iem^*}{\hbar^4\omega} (\boldsymbol{\mu}_i \times \boldsymbol{\mu}_l)_k \mathcal{J}_l^k(\omega) \\ &= \frac{4iem^*}{\hbar^4\tilde{\omega}} \epsilon_{kpq} \mu_{pi} \mu_{ql} \mathcal{J}_l^k(\omega) ,\end{aligned}\quad (7.23)$$

de donde

$$S_i(\omega) = \frac{2im^*}{\hbar^2\omega} \epsilon_{ijk} \mu_{jl} \mathcal{J}_l^k(\omega) ,\quad (7.24)$$

por lo tanto, la conductividad Hall de espín $\Sigma_{ij}^k(\omega)$ y la polarizabilidad de espín $\gamma_{ij}(\omega)$, están relacionadas por

$$\gamma_{ij}(\omega) = \frac{4im^*}{\hbar^3\omega} \epsilon_{iqp} \mu_{ql} \Sigma_{ij}^p(\omega) .\quad (7.25)$$

Ahora bien, si se define un nuevo vector $\mathbf{Q}_l = (\mathcal{J}_l^x, \mathcal{J}_l^y, \mathcal{J}_l^z)$, la ecuación anterior puede expresarse en forma vectorial como

$$\mathbf{S}(\omega) = \frac{2im^*}{\hbar^2\omega} \boldsymbol{\mu}_i \times \mathbf{Q}_i(\omega) .\quad (7.26)$$

Esta expresión es formalmente idéntica a la obtenida por Raichev [4]. Por lo tanto, un aspecto notable de esta ecuación es que no contiene ningún parámetro relacionado con procesos de dispersión por impurezas, aún cuando se derive utilizando la ecuación cinética cuántica de la función de distribución de los electrones como lo hizo Raichev [4].

Bibliografía

- [1] S. I. Erlingsson, J. Schliemann y D. Loss, “Spin susceptibilities, spin densities, and their connection to spin currents”, *Phys. Rev. B* **71**, 035319 (2005).
- [2] O.V. Dimitrova, “Spin-Hall conductivity in a two-dimensional Rashba electron gas”, *Phys. Rev. B* **71**, 245327 (2005).
- [3] A. Shekhter, M. Khodas y A.M. Finkel’stein, “ Chiral spin resonance and spin-Hall conductivity in the presence of the electron-electron interactions”, *Phys. Rev. B* **71**, 165329 (2005).
- [4] O. E. Raichev, “Frequency dependence of induced spin polarization and spin current in quantum wells”, *Phys. Rev. B* **75**, 205340 (2007).
- [5] J.A. Maytorena, C. López-Bastidas y F. Mireles, “Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems”, *Phys. Rev. B* **74**, 235313 (2006).

Capítulo 8

Conclusiones

En este trabajo se llevó a cabo un estudio teórico del fenómeno de orientación de espines vía interacción espín-órbita en un gas de electrones bidimensional, como respuesta a un campo eléctrico homogéneo que oscila en el tiempo a una frecuencia finita. Este fenómeno es uno de los más importantes en Espintrónica de semiconductores.

Se utilizó el formalismo de la teoría de respuesta lineal para calcular el tensor de polarizabilidad de espín, el cual está dado por una fórmula de Kubo en términos de la correlación entre densidad de espín y corriente de carga eléctrica. Este cálculo combina el estudio a frecuencia finita con el efecto conjunto de la interacción espín-órbita debida a la asimetría de inversión espacial (acoplamiento Rashba) y la asimetría de inversión en el bulto (acoplamiento Dresselhaus) de una heteroestructura semiconductor con estructura cristalina tipo zincblenda. Los cálculos están hechos en el límite de temperatura cero y en una muestra sin impurezas. Se analizaron los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras crecidas en las principales direcciones cristalográficas: [001], [111] y [110].

El desdoblamiento de los estados de espín, producido por la interacción espín-órbita, abre la posibilidad de que se lleven a cabo transiciones (verticales) entre sub-bandas de espín. Por tal motivo se calculó la densidad conjunta de estados. Se encontró que estas transiciones tienen lugar en un ancho de banda de absorción determinado por los parámetros α , $\beta_{[hkl]}$ y la densidad electrónica n . Observamos que la coexistencia del acoplamiento R+D[001] o R+D[110], da como resultado un ancho de banda de absorción hasta un orden de magnitud mayor con respecto al caso donde sólo existe acoplamiento Rashba o Dresselhaus[001], con valores típicos de α , $\beta_{[hkl]}$ y n . El cálculo revela que las transiciones intersub-banda de alta densidad, que están determinadas por

la forma particular del desdoblamiento de los estados de espín, producen la estructura en las funciones respuesta.

En efecto, los resultados obtenidos al evaluar la polarizabilidad de espín, hacen patente la importancia de la presencia simultánea del acoplamiento R+D[001] o R+D[110]. Esto se debe a que el acoplamiento anisotrópico causa que la magnitud y el signo de la polarizabilidad de espín dependan de la frecuencia del campo eléctrico, y que por lo tanto la orientación de espín también sea sensible a la frecuencia. Asimismo, encontramos que la magnitud de la polarización de espín también depende de la dirección en la que se aplica el campo eléctrico. Esto quiere decir que la acumulación de espín es anisotrópica. Sin embargo, estos efectos se cancelan completamente, para cualquier frecuencia del campo eléctrico, cuando los parámetros de acoplamiento de Rashba y Dresselhaus[001] son iguales ($\alpha = \beta_{[001]}$). Esto mismo ocurre en pozos cuánticos simétricos crecidos en la dirección [110], esto es, cuando $\alpha = 0$ y $\beta_{[110]} \neq 0$. Raichev reportó que esta notable característica, se debe a que existe una dirección fija de cuantización. Esto quiere decir que el campo espín-órbita $\Omega(\mathbf{k})$ no depende de \mathbf{k} , y por lo tanto los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan. Como consecuencia, el espín se conserva.

En cambio, en el caso de acoplamiento isotrópico, se observa un comportamiento espectral notablemente diferente del correspondiente al acoplamiento anisotrópico. En este caso, la polarización de espín no depende de la dirección en que se aplica el campo eléctrico, sólo depende de la frecuencia.

Una característica importante que sólo se observa cuando está presente el acoplamiento R+D[110], es la orientación eléctrica de espines perpendiculares al plano del gas de electrones. Este resultado es totalmente distinto al obtenido en el caso del acoplamiento Rashba o el acoplamiento Dresselhaus[001], en donde el espín está orientado sólo en el plano xy del gas de electrones. La generación de una polarización de espines fuera del plano del gas de electrones es de particular importancia ya que puede ser detectada ópticamente con técnicas experimentales, como la microscopía de rotación de Kerr.

Por otro lado, se derivaron relaciones entre el tensor de polarizabilidad de espín con otras funciones respuesta, como la conductividad de carga y la conductividad Hall de espín. Esto nos permite establecer relaciones vía interacción espín-órbita, entre fenómenos diferentes que dependen del espín. Cabe destacar que establecer una conexión entre la corriente Hall de espín y la densidad de espín puede ser de utilidad, si se toma en cuenta que en un experimento resulta más fácil detectar una densidad de espín que una corriente de espín. Además, verificamos algunas propiedades generales de la respuesta

de espín reportadas previamente por Raichev.

Por lo tanto, podemos concluir que la presencia conjunta del acoplamiento tipo Rashba y tipo Dresselhaus desempeña un papel primordial en el fenómeno de orientación de espines, puesto que da lugar a que la polarización de espín dependa de la frecuencia del campo eléctrico y que se observen nuevas resonancias en la respuesta espín. Esto abre la posibilidad de lograr un control sobre las densidades de espín, mediante la variación de la frecuencia del campo aplicado o de su dirección, y no sólo a través de la modulabilidad del acoplamiento Rashba o de variaciones de la densidad electrónica. Esto puede ser útil para investigaciones experimentales en estos sistemas.

Apéndice A

Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[110]

En un pozo cuántico crecido en la dirección cristalográfica [001], el Hamiltoniano espín-órbita de Dresselhaus es de la forma

$$H_D^{3d} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)] , \quad (\text{A.1})$$

donde $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$. Es posible escribir este Hamiltoniano como

$$H_D^{3d} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad (\text{A.2})$$

donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli y el campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ está dado por

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \gamma (k_x (k_y^2 - k_z^2), k_y (k_z^2 - k_x^2), k_z (k_x^2 - k_y^2)) . \quad (\text{A.3})$$

Ahora bien, si se considera un pozo cuántico crecido la dirección cristalográfica [110] o [111], es necesario hacer una transformación de $z || [001]$ a $z' || [110]$ o [111], donde z' indica la nueva dirección de crecimiento del pozo. La transformación del sistema xyz al $x'y'z'$, está determinada por la transformación ortogonal $\mathbf{x}' = O\mathbf{x}$, donde O es una matriz ortogonal de transformación. Los elementos de la matriz O pueden ser expresados en términos de los ángulos de Euler [1]. Estos ángulos están definidos como los tres ángulos sucesivos de rotación. Esta secuencia de rotaciones comienza rotando el sistema de ejes original, xyz , por un ángulo ϕ alrededor del eje z , el sistema de coordendas resultante se denota como $\xi\eta\zeta$. Posteriormente, los ejes $\xi\eta\zeta$, son rotados

alrededor del eje ξ por un ángulo θ para producir otro conjunto de ejes $\xi'\eta'\zeta'$. Finalmente, los ejes $\xi'\eta'\zeta'$ son rotados por un ángulo ψ alrededor del eje ζ' para producir el sistema de ejes deseado $x'y'z'$. En la Figura A.1 se ilustran los ángulos de Euler ϕ , θ y ψ , que determinan completamente la orientación del sistema $x'y'z'$ relativo al sistema de ejes original xyz .

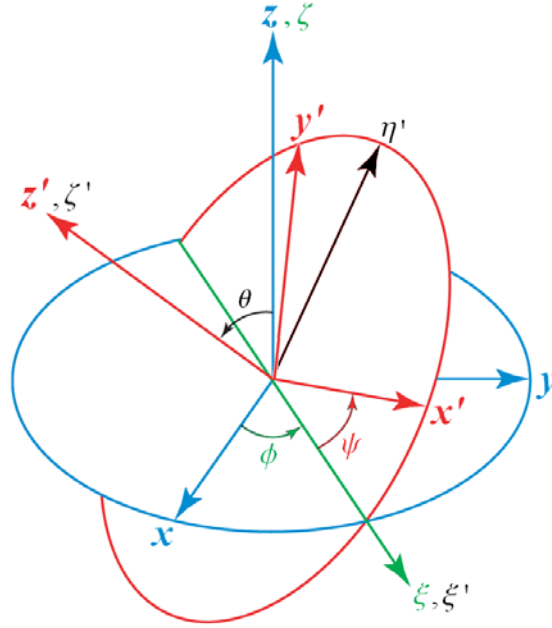


Figura A.1: Diagrama de los tres ángulos sucesivos de rotación ϕ , θ y ψ , los cuales determinan la orientación del nuevo sistema $x'y'z'$ relativo al sistema de ejes original xyz .

La rotación inicial alrededor del eje z está descrita por la matriz

$$R_z(\phi) = \begin{bmatrix} \cos \phi & \text{sen } \phi & 0 \\ -\text{sen } \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Similarmente, la transformación de $\xi\eta\zeta$ a $\xi'\eta'\zeta'$ está determinada por

$$R_\xi(\theta) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \text{sen } \theta \\ 0 & -\text{sen } \theta & \cos \theta \end{bmatrix}. \quad (\text{A.5})$$

La última rotación al sistema $x'y'z'$, está dada por

$$R_{\zeta'}(\psi) = \begin{bmatrix} \cos \psi & \text{sen } \psi & 0 \\ -\text{sen } \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

La matriz que determina la transformación completa está dada por $O = R_{\zeta'}(\psi)R_{\xi}(\theta)R_z(\phi)$, de modo que

$$O = \begin{bmatrix} \cos \psi \cos \phi - \cos \theta \text{sen } \phi \text{sen } \psi & \cos \psi \text{sen } \phi + \cos \theta \cos \phi \text{sen } \psi & \text{sen } \psi \text{sen } \theta \\ -\text{sen } \psi \cos \phi - \cos \theta \text{sen } \phi \cos \psi & -\text{sen } \psi \text{sen } \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi & \cos \psi \text{sen } \theta \\ \text{sen } \theta \text{sen } \phi & -\text{sen } \theta \cos \phi & \cos \theta \end{bmatrix}. \quad (\text{A.7})$$

La transformación inversa del sistema $x'y'z'$ a xyz , está determinado por $\mathbf{x} = O^T \mathbf{x}'$, puesto que $O^{-1} = O^T$, donde T indica la operación traspuesta. Además $\det O = 1$.

Si la rotación de $z = [001]$ a $z' = [110]$ o $[111]$ está determinada por la transformación ortogonal $\mathbf{x}' = O\mathbf{x}$, lo que tenemos que hacer es aplicar esta misma transformación a $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ para obtener $\mathbf{k}' = (\mathbf{k}'_{\parallel}, k'_z)$. Lo que se obtiene al hacer esta transformación es el campo espín-órbita $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k}') = \mathbf{\Omega}(\mathbf{k} = O^T \mathbf{k}')$, donde k'_z está a lo largo de la dirección de crecimiento del pozo cuántico y \mathbf{k}'_{\parallel} en el plano del pozo [2].

En particular, ilustraremos la transformación de $z = [001]$ a $z' = [110]$, donde se obtiene el nuevo eje de coordenadas $x' \parallel [\bar{1}10]$, $y' \parallel [001]$ y $z' \parallel [110]$. Para obtener esta transformación, los ángulos de Euler son $\phi = 3\pi/4$ (Fig. A.1a), $\theta = \pi/2$ y $\psi = 0$ (Fig. A.1b). Al sustituir estos ángulos en (A.7) se obtiene

$$O = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.8})$$

Aplicamos esta matriz de transformación para obtener $\mathbf{k}' = O\mathbf{k}$,

$$\begin{bmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{k_y - k_x}{\sqrt{2}} \\ k_z \\ \frac{k_y + k_x}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}. \quad (\text{A.9})$$

Similarmente, $\mathbf{k} = O^T \mathbf{k}'$ está dado por

$$\begin{bmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{k'_z - k'_x}{\sqrt{2}} \\ \frac{k'_z + k'_x}{\sqrt{2}} \\ k'_y \end{bmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

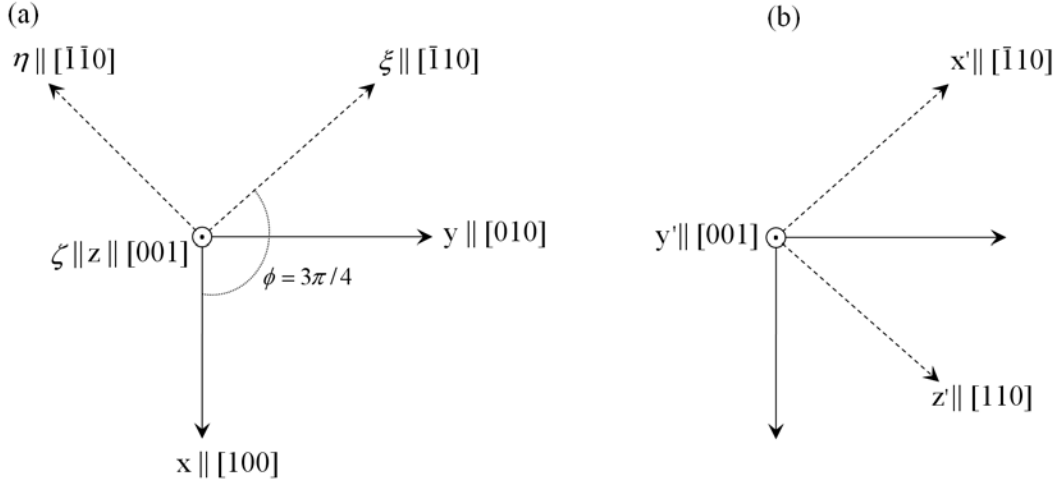


Figura A.2: Transformación del sistema xyz al $x'y'z'$, donde $x' \parallel [\bar{1}10]$, $y' \parallel [001]$ y $z' \parallel [110]$.

Ahora se sustituye el vector (A.10) en (A.3), de tal manera que el campo espín-órbita toma la forma

$$\frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}') = \gamma \begin{bmatrix} \frac{k'_z - k'_x}{\sqrt{2}} \left[\left(\frac{k'_z + k'_x}{\sqrt{2}} \right)^2 - (k'_y)^2 \right] \\ \frac{k'_z + k'_x}{\sqrt{2}} \left[(k'_y)^2 - \left(\frac{k'_z - k'_x}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] \\ k'_y \left[\left(\frac{k'_z - k'_x}{\sqrt{2}} \right)^2 - \left(\frac{k'_z + k'_x}{\sqrt{2}} \right)^2 \right] \end{bmatrix}. \quad (\text{A.11})$$

En pozos cuánticos suficientemente angostos, las componentes del vector de onda normal al plano del gas se promedian, esto es, $k'_z \rightarrow \langle \widehat{k'_z} \rangle = \langle i\partial_z \rangle = 0$ y $k'_z{}^2 \rightarrow \langle \widehat{k'_z}{}^2 \rangle$. Para \mathbf{k}'_{\parallel} pequeños, el término lineal en \mathbf{k}'_{\parallel} se vuelve dominante frente al término cúbico. De tal forma que (A.11) se reduce a

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \mathbf{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}'_{\parallel}) &= \gamma \left(\frac{-k'_x}{\sqrt{2}} \left[\frac{\langle \widehat{k'_z}{}^2 \rangle}{2} \right], \frac{k'_x}{\sqrt{2}} \left[-\frac{\langle \widehat{k'_z}{}^2 \rangle}{2} \right], 0 \right) \\ &= \frac{-\gamma \langle \widehat{k'_z}{}^2 \rangle k'_x}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} (1, 1, 0). \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

De la expresión anterior se puede ver que el campo espín-órbita $\mathbf{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}'_{\parallel})$ es paralelo

al vector normal al plano (110) (Fig. A.2a), de tal forma que es posible escribir (A.12) como

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_D^{[110]}(\mathbf{k}'_{\parallel}) = \beta_{[110]}k'_x\hat{\mathbf{z}}' . \quad (\text{A.13})$$

donde $\beta_{[110]} = -\gamma\langle\widehat{k'_z}\rangle/2$. Por simplicidad, se acostumbra omitir las primas en (A.13), de tal manera que el Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[110] (A.2) lineal en \mathbf{k}'_{\parallel} toma la forma

$$\begin{aligned} H_D^{[110]} &= (0, 0, \beta_{[110]}k_x) \cdot (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \\ &= \beta_{[110]}k_x\sigma_z . \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Este es el Hamiltoniano con acoplamiento Dresselhaus[110] presentado en la sección 3.4.3.

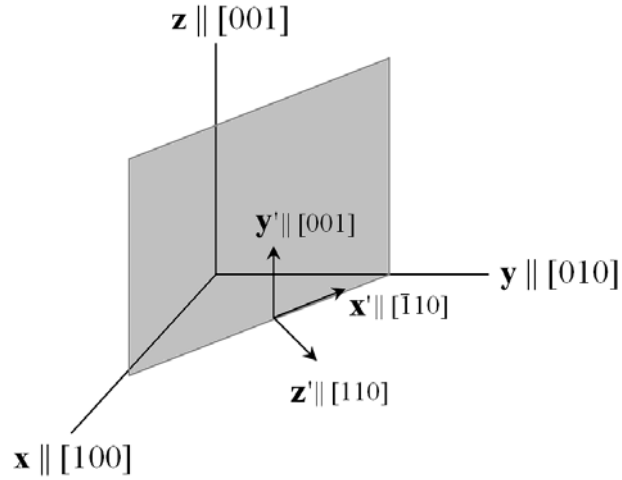


Figura A.3: Esquema del plano (110).

En cuanto al acoplamiento espín-órbita tipo Rashba, como han señalado otros autores [3, 4], el Hamiltoniano no depende de la orientación del pozo cuántico, ya que esta interacción depende de las propiedades de la heterointerfaz donde se forma el gas de electrones bidimensional.

Bibliografía

- [1] H. Golstein, C. Poole y J. Safko, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Massachusetts, 1980).
- [2] R. Eppenga y M.F.H. Schuurmans, “Effect of bulk inversion asymmetry on [001], [110], and [111] GaAs/AlAs quantum wells”, *Phys. Rev. B* **37**, 10923 (1988).
- [3] T. Hassenkam, S. Pedersen, K. Baklanov, A. Kristensen, C.B. Sorensen, P.E. Lindelof, F.G. Pikus y G.E. Pikus, “Spin splitting and weak localization in (110) GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells”, *Phys. Rev. B* **55**, 9298 (1997).
- [4] I. Zutic, J. Fabian y S. Das Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications”, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).

Apéndice B

Tensor de susceptibilidad de espín

En el Capítulo 4 se obtuvieron las expresiones del tensor de susceptibilidad de espín $\chi_{ij}(\omega)$, el cual tiene una parte real $\chi'_{ij}(\omega)$ y una parte imaginaria $\chi''_{ij}(\omega)$. En este apéndice se muestran los cálculos realizados para obtener las expresiones (4.63) y (4.66) de dicha susceptibilidad.

Parte real de la susceptibilidad de espín

De la ecuación (4.62) se puede identificar que $\chi'_{ij}(\omega)$ está dada por

$$\chi'_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m'_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega_{+-}}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) - \pi m''_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) \right], \quad (\text{B.1})$$

donde \mathcal{P} denota la integral del valor principal, $\hbar\omega_{+-} = 2k\Delta(\theta)$ y los elementos de matriz $M_{ij}(\theta) = m'_{ij}(\theta) + i m''_{ij}(\theta)$ están dados por (4.56). La prima en la integral indica que la integración está restringida a la región entre los contornos de Fermi $k_F^+(\theta) < k < k_F^-(\theta)$ con $0 < \theta < 2\pi$, para la cual se cumple que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+(\mathbf{k})$.

El primer término en el lado derecho de (B.1) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m'_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega_{+-}}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) \right] &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(2\pi)^2} m'_{ij}(\theta) \left[\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{4k^2 \Delta(\theta)}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} \right] \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\pi^2} m'_{ij}(\theta) \Delta(\theta) \left[\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k^2}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

De la expresión anterior realizamos sólo la integral en k dada por

$$\begin{aligned}
\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} &= \frac{1}{4\Delta^2(\theta)} \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \left[1 + \frac{[\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2} \right] \\
&= \frac{1}{4\Delta^2(\theta)} \left\{ \frac{2m^*\Delta(\theta)}{\hbar^2} + \left[\frac{\hbar\omega}{2\Delta(\theta)} \right]^2 \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2} \right\} \\
&= \frac{m^*}{2\Delta(\theta)\hbar^2} + \frac{(\hbar\omega)^2}{16\Delta^4(\theta)} \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2}. \quad (\text{B.3})
\end{aligned}$$

Nótese que el segundo término en (B.3) es una integral de la forma

$$\int \frac{dx}{x^2 - a^2} = \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right| + C, \quad (\text{B.4})$$

entonces

$$\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2} = \frac{\Delta(\theta)}{\hbar\omega} \mathcal{P} \left[\ln \left| \frac{k - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]}{k + [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]} \right| \right]_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)}. \quad (\text{B.5})$$

El valor principal está definido como $\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\infty}^{x_0 - \delta} f(x) dx + \int_{x_0 + \delta}^{\infty} f(x) dx \right\}$, donde x_0 es una singularidad. Al evaluar el valor principal en (B.5) da

$$\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2} = \frac{\Delta(\theta)}{\hbar\omega} \ln \left| \frac{[\hbar\omega + 2k_F^+(\theta)\Delta(\theta)][\hbar\omega - 2k_F^-(\theta)\Delta(\theta)]}{[\hbar\omega + 2k_F^-(\theta)\Delta(\theta)][\hbar\omega - 2k_F^+(\theta)\Delta(\theta)]} \right|. \quad (\text{B.6})$$

Sustituyendo (B.6) en (B.3), se obtiene

$$\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} = \frac{m^*}{2\Delta(\theta)\hbar^2} + \frac{(\hbar\omega)^2}{16\Delta^4(\theta)} \left[\frac{\Delta(\theta)}{\hbar\omega} \ln \left| \frac{[\hbar\omega + \hbar\Omega_+(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)]}{[\hbar\omega + \hbar\Omega_-(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)]} \right| \right]. \quad (\text{B.7})$$

donde $\hbar\Omega_{\pm}(\theta) \equiv 2k_F^{\pm}(\theta)\Delta(\theta)$. Ahora se sustituye (B.7) en (B.2), lo que conduce a la expresión

$$\frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m'_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega_{+-}}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) \right] = \chi_{ij}(0) + \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{m'_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega + \hbar\Omega_+(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)]}{[\hbar\omega + \hbar\Omega_-(\theta)][\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)]} \right|, \quad (\text{B.8})$$

donde el primer término en (B.8) es el valor estático de la susceptibilidad de espín dado

por el promedio angular

$$\chi_{ij}(0) = \frac{m^*}{2\pi^2\hbar^2} \int_0^{2\pi} d\theta m'_{ij}(\theta) . \quad (\text{B.9})$$

En lo que sigue, evaluamos el segundo término en (B.1) y lo definimos como $I'_{ij}(\omega)$, esto es

$$\begin{aligned} I'_{ij}(\omega) &= -\frac{\pi}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} m''_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int' d\theta m''_{ij}(\theta) \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(2k\Delta(\theta) - \hbar\omega) , \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

al integrar en k se obtiene

$$\begin{aligned} I'_{ij}(\omega) &= -\frac{1}{4\pi} \int' d\theta m''_{ij}(\theta) \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k}{2\Delta(\theta)} \delta(k - \hbar\omega/2\Delta(\theta)) \\ &= -\frac{1}{8\pi} \int' d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta(\theta)} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(k - \hbar\omega/2\Delta(\theta)) \\ &= -\frac{1}{8\pi} \int' d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta(\theta)} \left(\frac{\hbar\omega}{2\Delta(\theta)} \right) \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)] \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

por lo que $I'_{ij}(\omega)$ se reduce a

$$I'_{ij}(\omega) = -\frac{\hbar\omega}{16\pi} \int d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)] . \quad (\text{B.12})$$

De esta manera, juntando (B.8) y (B.12) se obtiene la ecuación (4.63).

Parte imaginaria de la susceptibilidad de espín

De la ecuación (4.62) se puede identificar que $\chi''_{ij}(\omega)$ está dada por

$$\chi''_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left[m''_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) + \pi m'_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) \right] . \quad (\text{B.13})$$

El segundo término en (B.13) se puede escribir como

$$\frac{\pi}{\hbar} \int' \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} m'_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) = \frac{1}{4\pi} \int' d\theta m'_{ij}(\theta) \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(2k\Delta(\theta) - \hbar\omega) . \quad (\text{B.14})$$

Nótese que al sustituir $-m''_{ij}$ por m'_{ij} en (B.10) se obtiene la ecuación (B.14). De tal forma que la integración en k da un resultado similar a (B.12), esto es

$$\frac{\pi}{\hbar} \int' \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} m'_{ij} \delta(\omega_{+-} - \omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi} \int d\theta \frac{m'_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_-(\theta)] . \quad (\text{B.15})$$

Por último, evaluamos el primer término en (B.13) y lo definimos como $I''_{ij}(\omega)$,

$$\begin{aligned} I''_{ij}(\omega) &= \frac{1}{\hbar} \int' \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left[m''_{ij} \mathcal{P} \left(\frac{2\omega}{\omega_{+-}^2 - \omega^2} \right) \right] \\ &= \frac{\hbar\omega}{2\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta m''_{ij}(\theta) \left[\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} \right] , \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

donde la integral en k está dada por

$$\begin{aligned} \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k}{[2k\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} &= \frac{1}{4\Delta^2(\theta)} \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k}{k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2} \\ &= \frac{1}{8\Delta^2(\theta)} \mathcal{P} \left[\ln \left| k^2 - [\hbar\omega/2\Delta(\theta)]^2 \right| \right]_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \\ &= \frac{1}{8\Delta^2(\theta)} \ln \left| \frac{[2k_F^-(\theta)\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2}{[2k_F^+(\theta)\Delta(\theta)]^2 - [\hbar\omega]^2} \right| . \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

Al sustituir (B.17) en (B.16), se obtiene

$$I''_{ij}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{m''_{ij}(\theta)}{\Delta^2(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_-(\theta)]^2}{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_+(\theta)]^2} \right| . \quad (\text{B.18})$$

Por lo tanto, con (B.15) y (B.18) se obtiene la expresión (4.66).

Apéndice C

Cálculo de los elementos de matriz

En el Capítulo 6 se obtuvieron las expresiones (6.1) y (6.16) de los elementos de matriz $M_{ij}(\mathbf{k})$ de los casos con interacción espín-órbita tipo R+D[001] y R+D[110], respectivamente. En este apéndice se muestran los cálculos realizados para llegar a tales expresiones.

Rashba+Dresselhaus[001]

Si se considera el caso de un GE2D con acoplamiento R+D[001], los espinores $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ están dados por

$$|\lambda\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}, \quad \lambda = \pm 1 \quad (\text{C.1})$$

donde $\phi(\mathbf{k})$ está definido como $\tan \phi(\mathbf{k}) = (\beta_{[001]}k_y - \alpha k_x)/(\alpha k_y - \beta_{[001]}k_x)$. Primero calculamos los elementos de matriz considerando la matriz de Pauli σ_x de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \langle -\lambda\mathbf{k} | \sigma_x | \lambda\mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{2} (1 - \lambda e^{-i\phi}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \lambda \frac{1}{2} \underbrace{(e^{i\phi} - e^{-i\phi})}_{2i \sin \phi} \\ &= \lambda \frac{1}{2k\Delta(\theta)} [2i (\beta_{[001]}k_y - \alpha k_x)] . \end{aligned}$$

Es posible escribir la expresión anterior en coordenadas polares como

$$\langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_x | \lambda \mathbf{k} \rangle = -\lambda \frac{i}{\Delta(\theta)} (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta) . \quad (\text{C.2})$$

Realizando un procedimiento similar para la matriz de Pauli σ_y , se obtiene

$$\begin{aligned} \langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_y | \lambda \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{2} (1 - \lambda e^{-i\phi}) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= -\lambda \frac{1}{2} \underbrace{(ie^{-i\phi} + ie^{i\phi})}_{2i \cos \phi} \\ &= -\lambda \frac{i}{\Delta(\theta)} (\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta) . \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Finalmente calculamos los elementos de matriz para la matriz de Pauli σ_z ,

$$\begin{aligned} \langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_z | \lambda \mathbf{k} \rangle &= \frac{1}{2} (1 - \lambda e^{-i\phi}) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} (1 - \lambda e^{-i\phi}) \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ &= 1 . \end{aligned} \quad (\text{C.4})$$

Usando (C.2), (C.3) y (C.4), para realizar el producto $M_{ij}(\mathbf{k}) = \langle -\mathbf{k} | \sigma_i | +\mathbf{k} \rangle \langle +\mathbf{k} | \sigma_j | -\mathbf{k} \rangle$, se obtiene que los elementos de matriz, escritos en coordenadas polares, están dados por

$$\begin{aligned} M_{ij}(\theta) &= \delta_{ij} \left[\frac{1}{\Delta^2(\theta)} (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta)^2 \delta_{ix} + \frac{1}{\Delta^2(\theta)} (\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta)^2 \delta_{iy} + \delta_{iz} \right] \\ &+ (1 - \delta_{ij}) \left[(1 - \delta_{iz})(1 - \delta_{jz}) \frac{1}{\Delta^2(\theta)} (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta)(\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta) + \right. \\ &\left. + i \frac{1}{\Delta(\theta)} (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta) \epsilon_{yij} - i \frac{1}{\Delta(\theta)} (\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta) \epsilon_{xij} \right] . \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker, ϵ_{ijk} es el tensor de Levi-Civita y $M_{ij}(\theta) = m'_{ij}(\theta) + i m''_{ij}(\theta)$.

Los únicos términos en el tensor de susceptibilidad de espín $\chi_{ij}(\omega)$ que dependen de $m''_{ij}(\theta)$ son las integrales $I'_{ij}(\omega)$ e $I''_{ij}(\omega)$ dadas por (4.64) y (4.67), respectivamente. De (C.5) se puede identificar que $m''_{ii}(\theta) = 0$ y $m''_{xy}(\theta) = m''_{yx}(\theta) = 0$, por lo tanto las

integrales $I'_{ij}(\omega)$ e $I''_{ij}(\omega)$ son idénticamente cero en todos estos casos.

Por otro lado, de (C.5) también se puede identificar que $m''_{zx}(\theta) = -m''_{xz}(\theta) = (\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta)/\Delta(\theta)$ y $m''_{zy}(\theta) = -m''_{yz}(\theta) = (\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta)/\Delta(\theta)$, de modo que al sustituir estos elementos de matriz en (4.64) y (4.67), se obtienen las expresiones

$$I'_{zx}(\omega) = -I'_{xz}(\omega) = -\frac{\hbar\omega}{16\pi} \int d\theta \frac{\alpha \cos \theta - \beta_{[001]} \sin \theta}{\Delta^3(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega], \quad (\text{C.6})$$

$$I''_{zx}(\omega) = -I''_{xz}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\alpha \sin \theta - \beta_{[001]} \cos \theta}{\Delta^3(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_-(\theta)]^2}{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_+(\theta)]^2} \right|. \quad (\text{C.7})$$

Al evaluar numéricamente estas dos expresiones se obtiene que $I'_{zx}(\omega) = I''_{zx}(\omega) = 0$. Por lo tanto, en general las integrales $I'_{ij}(\omega)$ e $I''_{ij}(\omega)$ son cero en todos los casos.

Rashba+Dresselhaus [110]

En el caso de un GE2D con acoplamiento R+D[110], los espinores son

$$\psi_\lambda(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\Delta(\theta) + \lambda \beta_{[110]} \cos \theta}{2 \Delta(\theta)}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi(\mathbf{k})} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (\text{C.8})$$

donde $\tan \varphi(\mathbf{k}) = \tan(\theta + \pi/2) = -k_x/k_y$. Calculamos los elementos de matriz para σ_x ,

$$\begin{aligned} \langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_x | \lambda \mathbf{k} \rangle &= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left(e^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} + e^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda \Delta(\theta)}{\alpha} \right) \\ &= \frac{1}{2\Delta(\theta)} \left[\lambda \Delta(\theta) \underbrace{(e^{-i\varphi} - e^{i\varphi})}_{-2i \sin \varphi} + \beta_{[110]} \cos \theta \underbrace{(e^{-i\varphi} + e^{i\varphi})}_{2 \cos \varphi} \right], \end{aligned}$$

tomando en cuenta que $\sin \varphi = \sin(\theta + \pi/2) = \cos \theta$ y $\cos \varphi = \cos(\theta + \pi/2) = -\sin \theta$, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_x | \lambda \mathbf{k} \rangle &= \lambda \frac{1}{\Delta(\theta)} [\Delta(\theta) (-i \cos \theta) + \lambda \beta_{[110]} \cos \theta (-\sin \theta)] \\ &= -\lambda \frac{\cos \theta}{\Delta(\theta)} [\lambda \beta_{[110]} \sin \theta + i \Delta(\theta)]. \end{aligned} \quad (\text{C.9})$$

Similarmente para la matriz σ_y , se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle -\lambda\mathbf{k}|\sigma_y|\lambda\mathbf{k}\rangle &= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left(1 \quad e^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left(ie^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} - ie^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \right) \\
&= \frac{1}{2\Delta(\theta)} \left[\lambda\Delta(\theta) \underbrace{(ie^{-i\varphi} + ie^{i\varphi})}_{2i \cos \varphi} + \beta_{[110]} \cos \theta \underbrace{(ie^{-i\varphi} - ie^{i\varphi})}_{2\text{sen } \varphi} \right],
\end{aligned}$$

por lo tanto

$$\langle -\lambda\mathbf{k}|\sigma_y|\lambda\mathbf{k}\rangle = \lambda \frac{1}{\Delta(\theta)} [\lambda\beta_{[110]}\cos^2\theta - i\Delta(\theta)\text{sen } \theta] . \quad (\text{C.10})$$

Por último calculamos los elementos de matriz para σ_z ,

$$\begin{aligned}
\langle -\lambda\mathbf{k}|\sigma_z|\lambda\mathbf{k}\rangle &= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left(1 \quad e^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left(1 - e^{-i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta + \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\varphi} \frac{\beta_{[110]} \cos \theta - \lambda\Delta(\theta)}{\alpha} \end{pmatrix} \\
&= \frac{\alpha}{2\Delta(\theta)} \left[1 + \frac{1}{\alpha^2} (\Delta^2(\theta) - \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta) \right], \quad (\text{C.11})
\end{aligned}$$

recordando que $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta$, la ecuación anterior se reduce a

$$\langle -\lambda\mathbf{k}|\sigma_z|\lambda\mathbf{k}\rangle = \frac{\alpha}{\Delta(\theta)} . \quad (\text{C.12})$$

Utilizando (C.9), (C.10) y (C.12), para calcular $\langle -\mathbf{k}|\sigma_i|+\mathbf{k}\rangle\langle +\mathbf{k}|\sigma_j|-\mathbf{k}\rangle$, se obtiene que

$$\begin{aligned}
M_{ij}(\theta) &= \frac{1}{\Delta^2(\theta)} \delta_{ij} \left[\alpha^2 \delta_{iz} + (\beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta + \alpha^2 \cos^2 \theta \delta_{ix} + \alpha^2 \text{sen}^2 \theta \delta_{iy}) (1 - \delta_{iz}) \right] (\text{C.13}) \\
&+ (1 - \delta_{ij}) \left\{ (1 - \delta_{iz})(1 - \delta_{jz}) [\alpha^2 \text{sen } \theta \cos \theta - i\beta_{[110]} \Delta(\theta) \cos \theta \epsilon_{zij}] + \right. \\
&\quad (1 - \delta_{iy})(1 - \delta_{jy}) [-\alpha\beta_{[110]} \text{sen } \theta \cos \theta + i\alpha\Delta(\theta) \cos \theta \epsilon_{yij}] + \\
&\quad \left. (1 - \delta_{ix})(1 - \delta_{jx}) [\alpha\beta_{[110]} \cos^2 \theta - i\alpha\Delta(\theta) \text{sen } \theta \epsilon_{xij}] \right\} . \quad (\text{C.14})
\end{aligned}$$

De la expresión anterior se puede identificar que $m''_{ii}(\theta) = 0$, de tal forma que

$I'_{ii}(\omega) = I''_{ii}(\omega) = 0$. Además, de (C.14) se puede identificar que $m'_{zy}(\theta) = m'_{yz}(\theta) = \alpha\beta_{[110]} \cos^2 \theta / \Delta^2(\theta)$ y $m''_{zy}(\theta) = -m''_{yz}(\theta) = -\alpha \sin \theta / \Delta(\theta)$, de modo que al sustituir estos elementos de matriz en (4.64) y (4.67), se obtienen las expresiones

$$I'_{zy}(\omega) = -I'_{yz}(\omega) = -\frac{\hbar\omega}{16\pi} \alpha \int d\theta \frac{\sin \theta}{\Delta^3(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega], \quad (\text{C.15})$$

$$I''_{zy}(\omega) = -I''_{yz}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \alpha \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\sin \theta}{\Delta^3(\theta)} \ln \left| \frac{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_-(\theta)]^2}{[\hbar\omega]^2 - [\hbar\Omega_+(\theta)]^2} \right|. \quad (\text{C.16})$$

Al evaluar numéricamente se obtiene que $I'_{zy}(\omega) = I''_{zy}(\omega) = 0$, lo mismo ocurre para el resto de los elementos de matriz. Por lo tanto, en general se obtiene que $I'_{ij}(\omega) = I''_{ij}(\omega) = 0$.