



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

Espintrónica y efecto espín Seebeck

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:
FÍSICO

P R E S E N T A :
GUILLERMO REYES VALENCIA

DIRECTOR DE TESIS:
M. EN C. JOSÉ LUIS DEL RÍO VALDÉS



2014



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Hoja de datos del jurado

Datos del alumno	
Apellido paterno	Reyes
Apellido materno	Valencia
Nombre	Guillermo
Teléfono	57580920
Universidad Nacional Autónoma de México	
Facultad de Ciencias	
Carrera	Física
Número de cuenta	301038351
Datos del tutor	
Grado	M. en C.
Apellido paterno	del Río
Apellido materno	Valdés
Nombre	José Luis
Datos del sinodal 1	
Grado	Dr.
Apellido paterno	García
Apellido materno	García
Nombre	Ramiro
Datos del sinodal 2	
Grado	Fís
Apellido paterno	Porta
Apellido materno	Contreras
Nombre	Andrés Valentín
Datos del sinodal 3	
Grado	Dr.
Apellido paterno	Camarillo
Apellido materno	García
Nombre	Enrique
Datos del sinodal 4	
Grado	M. en C.
Apellido paterno	Angeles
Apellido materno	Uribe
Nombre	Fernando

Índice general

1. Introducción	9
1.1. El concepto de espín	9
1.2. Procesos fundamentales en la espintrónica	10
1.3. Corrientes de espín	11
1.4. Desarrollo e importancia de la espintrónica.	11
1.4.1. Descubrimiento de la magnetorresistencia gigante (GMR).	12
1.5. Aplicaciones de la espintrónica	13
1.6. Estado actual de la espintrónica	13
1.7. Termoelectricidad	16
1.8. Efecto espín Seebeck	17
2. Inyección de espines	18
2.1. Procesos de difusión	18
2.1.1. Procesos estocásticos	18
2.2. Procesos de Markov	20
2.2.1. Función de transición	21
2.3. Ecuaciones de difusión	23
2.4. Difusión y arrastre de partículas	24
2.4.1. Difusión y arrastre de espines	28
2.5. Potenciales cuasiquímicos	31
2.6. Inyección de espines en una unión entre un conductor no magnético y un ferromagnético	36
2.6.1. Metal no magnético	37
2.6.2. Ferromagnético	37
2.6.3. Región de contacto	38
3. Interacción espín órbita	41
3.1. Origen de la interacción	41
3.2. Interacción espín órbita en semiconductores.	42
3.3. Estructura de bandas de semiconductores	45
3.3.1. Aproximación k-p	45
3.3.2. Aproximación de la función envolvente	47
3.4. Interacción espín órbita de Bychkov-Rashba y Dresselhaus.	54

4. Dinámica de la magnetización.	57
4.1. Conceptos básicos en magnetismo	57
4.1.1. Momento dipolar magnético	57
4.1.2. Magnetización	58
4.1.3. Inducción magnética	58
4.1.4. Permeabilidad magnética y susceptibilidad	59
4.2. Naturaleza magnética de los materiales	59
4.2.1. Diamagnéticos	59
4.2.2. Paramagnetismo	60
4.3. Ecuaciones de movimiento de la magnetización	61
4.3.1. Energía de Zeeman.	61
4.3.2. Precesión de Larmor	62
4.3.3. Ondas de espines	64
4.3.4. Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert	64
4.4. Ecuaciones de Bloch	66
5. Efecto espín-Seebeck	67
5.1. Fluctuaciones térmicas	67
5.1.1. Fluctuaciones en el tiempo	69
5.1.2. Tratamiento espectral de fluctuaciones	70
5.2. Susceptibilidad generalizada	71
5.3. Teorema de la fluctuación disipación	75
5.4. Efecto espín Seebeck en uniones F/N.	75
6. Resultados	80
6.1. Corriente de espines generada en la unión	80
6.2. Yttrium Iron Garnet (YIG)/Au	83
6.3. YIG/Pt	89
6.4. Permalloy(Py)/Au	90
6.5. Py/Pt	91
6.6. Cálculo factores de magnetización	93
6.7. YIG función Brillouin y campo de desmagnetización	95
A. Conceptos matemáticos	100
A.1. σ -álgebra	100
A.2. Álgebra de Borel	100
A.3. Espacios de Hausdorff	100
A.4. Función de Transición	102
B. Coeficientes de Clebsch-Gordan	104
B.1. Relaciones de ortonormalidad	105
B.2. Relaciones de recurrencia	105
C. Efecto espín Hall	106
D. Algoritmo computacional utilizado	107

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	5
E. Tablas de datos	112

Índice de figuras

1.1.	Procesos fundamentales en la espintrónica a)inyección de espines de un material ferromagnético en uno no magnético b) manipulación de espines c) detección por medio del acoplamiento espín carga[1]	10
1.2.	Óxido de Europio	12
1.3.	Magnetorresistencia gigante en multicapas.[2]	12
1.4.	Diagrama que muestra la estructura de una válvula de espín[3]	14
1.5.	Junta magnética de efecto túnel[3]	15
1.6.	Ilustración del efecto Peltier y del efecto Seebeck	17
2.1.	Ejemplo de como ocurre un proceso de difusión físicamente.[4]	24
2.2.	Ilustración del camino libre medio de una partícula.[5]	25
2.3.	Problema del caminante al azar con probabilidad de moverse a la izquierda o a la derecha	25
2.4.	Esquema del problema del caminante al azar para el caso de electrones con espín	30
2.5.	Niveles de energía ocupados en los distintos tipos de polarización	30
2.6.	Esquema de la unión F/N [1]	36
3.1.	Modelo vectorial de la interacción espín órbita	42
3.2.	Diagrama E vs k sólido con simetría espacial (izquierda) sólido sin simetría espacial(derecha)	43
3.3.	Esquema del pozo de potencial propuesto	45
3.4.	Esquema de la estructura de bandas de un semiconductor III-V dentro del modelo de Kane (c) indica la banda de conducción, (hh) indica los huecos pesados, (lh) huecos ligeros y (so) las bandas separadas debido al espín.	52
3.5.	Comportamiento del transistor de Datta Das	56
4.1.	Inducción magnética debido a una corriente.	59
4.2.	Orientación de los momentos en un material ferromagnético.	60
4.3.	Esquema del fenómeno del antiferromagnetismo	61
4.4.	Evolución de una partícula con espín bajo la acción de un campo magnético a) sin amortiguamiento, b) con amortiguamiento de Gilbert.	65

5.1. Forma del contorno C'	74
5.2. a)Efecto Seebeck b)efecto espín Seebeck	76
5.3. Región de estudio para el efecto espín Seebeck	77
6.1. Gráfica que representa el comportamiento del coeficiente espín Seebeck con el espesor de una placa de YIG	83
6.2. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 40 nm	85
6.3. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 80 nm	86
6.4. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 100 nm	87
6.5. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 150 nm	89
6.6. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Pt, con espesor de la capa de YIG de 150 nm	90
6.7. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión Py/Au	91
6.8. Gráfica del voltaje espín Hall en una unión Py/Pt	92
6.9. Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con campo magnético aplicado de $0.5 T$	95
6.10. Gráfica de campo de desmagnetización a lo largo de la dirección x campo magnético $0.5 T$	96
6.11. Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda $300 K$ campo aplicado $0.5 T$	96
6.12. Gráfica campo de desmagnetización en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda $300 K$ campo aplicado $0.5 T$	97
6.13. Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda $900 K$ campo aplicado $0.5 T$	97
6.14. Gráfica campo de desmagnetización en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda $900 K$ campo aplicado $0.5 T$	98

Resumen

La electrónica ha constituido uno de los pilares del desarrollo humano logrado a lo largo del siglo XX, el desarrollo de dispositivos como el diodo y el transistor, lograron toda una revolución tecnológica, ya que lograron un gran cambio en el estilo de vida de la humanidad.

A pesar de este desarrollo sin precedentes, la electrónica ha encontrado algunas limitaciones para su avance, por ejemplo, la velocidad de transmisión de la información.

Debido al descubrimiento del fenómeno de la magnetorresistencia gigante en, surge la espintrónica, que es un campo emergente de la física en la que los electrones pueden ser manipulados por medio de su espín. La espintrónica plantea el desarrollo de dispositivos análogos a los diodos y transistores, cuyo funcionamiento este basado en la capacidad de manipular el espín de los electrones. En la actualidad el fenómeno de la magnetorresistencia gigante ha sido aprovechado para el almacenamiento de información, sin embargo el enfoque actual de las investigaciones en la espintrónica se basa en el desarrollo de materiales en los que los espines puedan ser manipulados a temperatura ambiente.

Este trabajo de tesis en el capítulo 1 presenta un panorama general de la espintrónica, en el que se describe como surge la espintrónica, se analiza el concepto de espín y sus implicaciones, se describen los procesos fundamentales en la espintrónica de forma general, así como algunos de los retos actuales que enfrenta. En el capítulo 2 se describe el proceso de inyección de espines como un proceso de difusión, por lo que se define matemáticamente como un proceso estocástico, así como las implicaciones de esto, se resuelven las ecuaciones de difusión para el caso de una corriente de espines. En el capítulo 3 se analiza la interacción espín-órbita como una forma de manipular una corriente de espines en semiconductores, se estudian los términos de Rashba y Dresselhaus. En el capítulo 4 se estudian conceptos fundamentales de la teoría electromagnética con la finalidad de obtener las ecuaciones que gobiernan la dinámica de la magnetización, como las ecuaciones de Bloch y la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert. En el capítulo 5 se analiza el efecto espín Seebeck que es el tema central de la tesis, se analiza como este se produce en la unión de un metal no magnético con un metal ferromagnético. En el capítulo 6 se obtiene el voltaje de espines producido en distintas uniones de materiales, con miras hacia un trabajo futuro se calculan los factores de desmagnetización, a futuro se planea obtener la corriente producida en forma de ondas de espines a lo largo del material en la dirección x y

Capítulo 1

Introducción

El objetivo del presente trabajo es la descripción de los procesos que originan una corriente de espines, en particular el proceso de inyección de espines como un proceso de difusión, que nos permite predecir el comportamiento de una corriente. Se analiza la interacción espín órbita como el proceso para controlar corrientes de espines, y que brinda la posibilidad de producir dispositivos espintrónicos como diodos o transistores. Finalmente se analiza la dinámica microscópica de la magnetización con la finalidad de simular y analizar el efecto espín Seebeck, con distintas condiciones así como las ecuaciones que gobiernan este efecto.

En este capítulo se estudian los procesos fundamentales de la espintrónica, la cual constituye un campo emergente en la física, el cual se basa en la manipulación del espín del electrón, que se manifiesta como un estado de energía que puede adquirir los valores $\frac{\hbar}{2}$ ó $-\frac{\hbar}{2}$, se considera que inicia en 1988 con el descubrimiento del fenómeno de la GMR (magnetorresistencia gigante).[6]

La espintrónica plantea el desarrollo de dispositivos que usen la propiedad del espín para su funcionalidad, debido a que pueden ser manipulados mas rápido y a menor costo que el electrón, tiene el potencial de incrementar la velocidad del procesamiento de datos y disminuir el consumo de potencia eléctrica.

1.1. El concepto de espín

El espín de una partícula se define como un momento magnético intrínseco, dicho concepto no tiene equivalente en la mecánica clásica y tiene propiedades que lo distinguen del momento angular clásico.

- Es una cantidad cuantizada y puede tener los valores $s = \frac{\hbar}{2}n$ donde n es cualquier entero no negativo.
- Una partícula puede tener espín semientero (fermiones) o entero (bosones), los fermiones siguen el principio de exclusión de Pauli, enunciado por Wolfgang Ernst Pauli en 1925, el cual establece que no puede haber

dos fermiones con todos sus números cuánticos idénticos (esto es, en el mismo estado cuántico de partícula individual) en el mismo sistema cuántico ligado.[7]

El espín puede ser representado por un operador, el cual cumple con la relación de conmutación

$$[S_j, S_k] = i\epsilon_{jkl}S_l$$

donde $S_{j,k,l}$ representa la proyección del espín en cada dirección, $j, k, l = 1, 2, 3$; i es la unidad imaginaria.

Se expresan en el caso del espín del electrón de valor $\frac{\hbar}{2}$ en forma de matrices de segundo orden como se muestra a continuación[8]:

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2}\sigma_x \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2}\sigma_y \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$$

donde:

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

1.2. Procesos fundamentales en la espintrónica

Dentro de la espintrónica existen tres procesos fundamentales, el primero y mas importante es llamado inyección de espines que consiste en la introducción de un espín desequilibrante en un conductor; una vez que se introduce un espín en el sistema se requiere manipularlo, esto se logra aplicando un campo magnético externo debido a la interacción del momento angular de espín y el momento angular orbital del conductor; por último el espín introducido tiene que sobrevivir el tiempo suficiente y viajar lo suficientemente lejos para transmitir información entre el punto de inyección y donde será detectado, ya que la transferencia es afectada por procesos de relajación de espín y desfaseamiento del espín.[1]

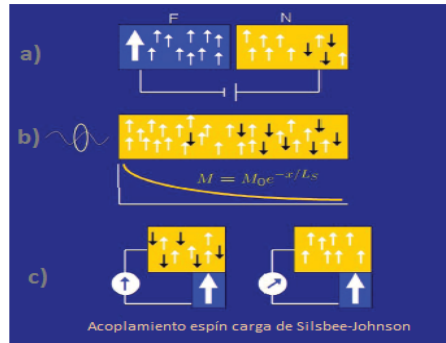


Figura 1.1: Procesos fundamentales en la espintrónica a) inyección de espines de un material ferromagnético en uno no magnético b) manipulación de espines c) detección por medio del acoplamiento espín carga[1]

1.3. Corrientes de espín

Se le llama corriente de espines a electrones en movimiento en los cuales la orientación del espín de los electrones se toma en cuenta. En esta tesis se analiza el proceso de inyección de espines con el fin de producir corrientes, este proceso es descrito a través de una ecuación de difusión y arrastre de espines.

Al ser un proceso de difusión este fenómeno es descrito como un proceso continuo de Markov que es un proceso estocástico en el que los estados anteriores del sistema no influyen en el futuro de este y que además está asociado a una función de transición continua.

La ecuación de difusión que describe este proceso es

$$J_{\uparrow,\downarrow} = \sigma_{\uparrow,\downarrow} \nabla \mu_{\uparrow,\downarrow}$$

donde la densidad de corriente J y la conductividad σ dependen de la orientación de los espines y como se supone que dentro de cada banda de espín los electrones están en equilibrio térmico entonces la difusión y arrastre de electrones pueden ser descritos por potenciales químicos independientes.[9]

El sentido de circulación de una corriente de espines depende de la polarización de espín es decir de la diferencia del número de partículas con espines orientados hacia arriba con respecto del número de partículas con espines orientados hacia abajo.

1.4. Desarrollo e importancia de la espintrónica.

La segunda mitad del siglo XX fue conocida como la era de la microelectrónica. Durante este periodo de 50 años el mundo atestiguó una revolución basada en la lógica digital de los electrones.

En años recientes ha crecido el interés en dispositivos magnetoelectrónicos, que usan el espín de los electrones en lugar de su carga, de ahí el término electrónica del espín o simplemente espintrónica.[10, 2].

En los dispositivos electrónicos actuales no se toma en cuenta la orientación de los espines de los electrones, sin embargo la espintrónica le da un tratamiento diferente a los electrones cuyo espín está orientado hacia arriba o hacia abajo, ya que en materiales magnéticos la población de electrones con orientaciones distintas es desigual, por lo que existe una mayor densidad de espines orientados hacia arriba o hacia abajo, por lo que se dice que el material tiene una polarización de espines y estos electrones además pueden ser manipulados mediante pequeños campos magnéticos, uno de los materiales que se consideran con gran potencial en el área de la espintrónica es el óxido de Europio (Eu_2O_3), que ha sido ampliamente usado como sustancia fluorescente en aparatos de televisión y como activador de otros fosforescentes basados en Itrio mostrado en la figura 1.2.[11]



Figura 1.2: Óxido de Europio

Los grandes retos en este campo incluyen la optimización del tiempo de vida de los espines, detección de la coherencia del espín, transporte de portadores espín polarizados a través de longitudes relevantes, la manipulación del espín nuclear y electrónico.

1.4.1. Descubrimiento de la magnetorresistencia gigante (GMR).

Se considera que la espintrónica nace con el descubrimiento de este fenómeno en 1988, fruto de investigaciones independientes por un equipo liderado por Peter Grünberg en capas cristalinas de Fe/Cr/Fe y en capas de Fe/Cr por el grupo de Albert Fert, por lo que ambos fueron galardonados en 2007 con el premio Nobel de Física.

El efecto se observa como un cambio significativo en la resistencia eléctrica dependiendo si la magnetización de la capa ferromagnética adyacente están alineadas de forma paralela o antiparalela. La resistencia total es relativamente baja para una alineación paralela, y relativamente alta para una alineación antiparalela. La dirección de la magnetización puede ser controlada por un campo magnético externo.

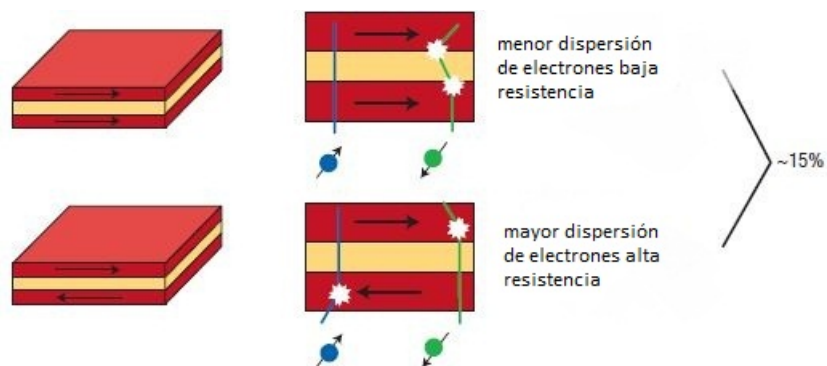


Figura 1.3: Magnetorresistencia gigante en multicapas.[2]

En las multicapas Fe/Cr que fueron estudiadas existe acoplamiento antiferromagnético entre las películas de Fe debido a las películas de Cr. Como resultado, los momentos magnéticos de otras capas de Fe son antiparalelas a cada una en campo cero. En la presencia de campo suficientemente fuerte se puede superar el acoplamiento antiferromagnético, por lo tanto todos los momentos magnéticos de las capas de Fe son forzados a apuntar en la misma dirección.[12].

En la figura 1.3 se muestra un material multicapa, que es un dispositivo GMR, donde en color amarillo se presenta un material no magnético entre dos capas de un ferromagnético, donde los electrones con una orientación dada de sus espines son más fuertemente dispersados que cuando viajan en un ferromagnético con la mayoría de sus electrones en su estado opuesto de espines. En magnetizaciones paralelas el espín mostrado en la figura de color azul tiene poca dispersión, mientras que el mostrado en verde es más fuertemente dispersado. Para el caso de magnetizaciones antiparalelas, ambos tienen algún grado de dispersión. Esto lleva a corrientes distintas, y a un cambio de la resistencia de alrededor del 15 % de su valor para este caso.

1.5. Aplicaciones de la espintrónica

Debido a las propiedades del espín, este puede ser usado para transportar información, y además como se mencionó anteriormente debido a la presencia de la interacción espín órbita, la orientación de el espín puede ser manipulada mediante la aplicación de un campo magnético externo, de la misma manera que ocurre con la magnetorresistencia gigante, este efecto es aprovechado en el desarrollo de medios de almacenamiento de datos.

Una propiedad del espín que vislumbra grandes posibilidades de ser aprovechada con el progreso de la espintrónica, es que el tiempo de relajación es grande, es decir, una vez que se crea tiende a permanecer de la misma forma por un tiempo largo, al contrario de los estados de las corrientes de carga que son fácilmente destruidas por efectos de dispersión o colisiones con defectos, impurezas e incluso otras cargas.

Con estas características se abre la posibilidad de desarrollar dispositivos mas pequeños y que consuman menor electricidad y permitan el desarrollo mas rápido de cálculos comparados con los procesadores usados en la actualidad. Uno de los dispositivos propuestos a futuro es el transistor de Datta Das. Otros dispositivos que pueden ser creados mediante el uso de la espintrónica es el spin-LED, spin-RTD (dispositivo de efecto túnel resonante), moduladores, encoders, decoders incluso el manejo de los bits cuánticos que harán posible la computación cuántica.

1.6. Estado actual de la espintrónica

En la actualidad puede observarse una gran cantidad de aplicaciones derivadas del descubrimiento de el efecto GMR mencionado anteriormente, como

el desarrollo de nuevos materiales que permiten que el fenómeno se produzca a temperatura ambiente.

Se han desarrollado válvulas de espín basadas en el fenómeno de GMR, que posee dos capas ferromagnéticas¹, generalmente aleaciones de níquel, hierro y cobalto entre las cuales se coloca una capa delgada de metal no magnético usualmente cobre, la magnetización en una de las capas ferromagnéticas es relativamente insensible a campos magnéticos de intensidad moderada, a lo que se le llama fijación. La otra capa ferromagnética es llamada capa libre, la magnetización de esta puede variar en la presencia de un campo magnético relativamente pequeño. Como la magnetización en las dos capas cambia de alineación paralela a antiparalela, la resistencia de la válvula se eleva de 5 a 10 % de su valor

La fijación se logra mediante el uso de una capa antiferromagnética en contacto con la capa fija. Las dos películas forman una interfase que actúa para resistir los cambios de la capa de magnetización fija.



Figura 1.4: Diagrama que muestra la estructura de una válvula de espín[3]

Una innovación en el desarrollo de válvulas de espín, es el uso de una nanocapa de óxido, la cual reduce la resistencia debida a dispersión en la superficie del dispositivo, reduciendo así la resistencia de fondo, por lo que aumenta la magnetorresistencia de la estructura.

En resumen, en una válvula de espín cuando una capa magnética se polariza, los portadores de carga negativa alinean sus espines con el campo magnético externo. Cuando un potencial excite a través de una válvula de espín, los electrones espín polarizados conservan su alineación mientras se mueven a través del dispositivo. Si estos electrones se encuentran un material con un campo magnético apuntando en la dirección opuesta, estos deben cambiar sus espines para encontrar un nivel de energía vacío en el nuevo material. Este cambio requiere energía adicional que causa que el dispositivo tenga una resistencia más alta que cuando los materiales magnéticos son polarizados en la misma dirección.

¹Se profundizará sobre la naturaleza magnética de distintos materiales en el capítulo 4

Una junta magnética de efecto túnel, es un dispositivo en el que una capa fija y una capa libre, están separadas por una capa muy delgada aislante, generalmente óxido de aluminio.

La resistencia de efecto túnel se modula por un campo magnético de la misma manera que la resistencia de una válvula de espín, esta estructura muestra un cambio entre 20 y 40 % de la magnetorresistencia.

Las aplicaciones de estas estructuras incluye sensores de campo magnético, cabezas lectoras de discos duros, aislantes galvánicos y memorias de acceso aleatorio magnetorresistivas.

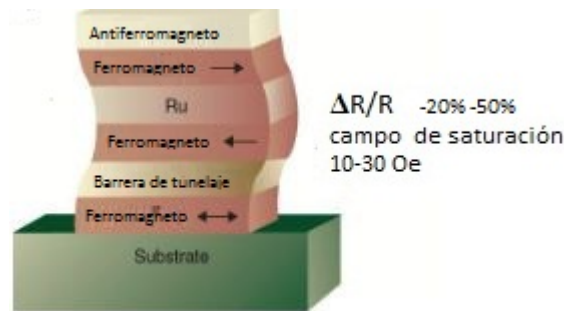


Figura 1.5: Junta magnética de efecto túnel[3]

La búsqueda de materiales semiconductores con propiedades ferromagnéticas se ha vuelto muy complicada. La ventaja de estos materiales es que tiene un gran potencial como fuente de portadores con polarización de espines y una fácil integración dentro de dispositivos semiconductores. Se tiene además en mente que estos materiales tengan temperaturas de Curie² por encima de la temperatura ambiente. Uno de los semiconductores ferromagnéticos más estudiados es el antes mencionado Europio y los compuestos que forma, sin embargo no es útil en la práctica debido a que su temperatura de Curie es mucho menor que la temperatura ambiente.

A pesar de estos inconvenientes, el desarrollo de nuevos materiales con aplicaciones espintrónicas continúa aumentando. Por ejemplo, investigadores japoneses han descubierto la existencia de ferromagnetismo a temperatura ambiente en TiO_2 que es sometido a ablación láser co dopado 6 a 8 %, mediante el uso de métodos de síntesis combinatoria. Otro material de reciente desarrollo con propiedades semiconductoras aplicables a dispositivos espintrónicos, es el CaB , con lo que se puede notar que el desarrollo de nuevos materiales continuará con la finalidad de lograr el desarrollo de los dispositivos propuestos ya teóricamente mencionados anteriormente.[3]

²Temperatura a la cual un material ferromagnético se comporta como un material paramagnético.

1.7. Termoelectricidad

Existen fenómenos asociados con las corrientes producidas por el movimiento de las cargas, se quiere encontrar el análogo para las corrientes de espines, para lo cual se verá el caso del efecto Seebeck y el efecto Peltier.

El efecto Peltier se define como la absorción o emisión de calor en la unión de dos conductores a través de los cuales circula una corriente directa. La absorción o emisión de calor depende de la dirección de circulación de la corriente y se define como

$$Q_{\Pi} = (\Pi_1 - \Pi_2) \vec{J} \quad (1.1)$$

donde Π_i es el coeficiente de Peltier de cada material que forma la unión respectivamente y depende de cada material, esta cantidad se define en términos del cambio de flujo de arrastre de calor el cual se expresa de la forma[13]

$$\vec{q}_{dr} = \Pi \vec{J} \quad (1.2)$$

Esta ecuación se obtiene considerando una estructura isotérmica. Por lo cual los flujos térmicos están ausentes en la estructura, solo están presentes los flujos debidos a la corriente eléctrica. Para mantener el estado isotérmico en este caso es necesario incluir un baño térmico externo en las consideraciones. El baño térmico se encarga del calentamiento de la unión cuando esta se enfría y el enfriamiento de la unión cuando esta se calienta.

Sin embargo de manera mas general el efecto Peltier puede existir en un sistema adiabático. Debido al principio de Le Chatelier-Braun es que aparece una inhomogeneidad en la temperatura en ausencia de interacción del sistema con los alrededores, este principio afirma: Una influencia externa que cambia al sistema de algún estado termodinámico, estimula procesos en este mismo sistema que tienden a reducir los estados dentro de la influencia; por lo tanto aplicando esta idea a este caso, el estado termodinámico del sistema cambia debido a variaciones en el flujo de arrastre de calor en la ecuación 1.2, que de acuerdo con este principio deben de ser compensados por otros flujos térmicos dirigidos en oposición al flujo de arrastre, lo cual devuelve al sistema al estado inicial, estos flujos crean la inhomogeneidad de la temperatura en la estructura, que pueden ser los flujos de difusión térmica [14]. Este fenómeno ocurre en uniones de semiconductores p-n en general.

Otro efecto termoeléctrico importante es el efecto Seebeck el cual describe la generación de voltaje como resultado de aplicar un gradiente de temperatura, su magnitud se determina por el coeficiente de Seebeck S y se define en términos del campo eléctrico generado $E_{Seebeck} = -S\nabla T$. El coeficiente de Seebeck generalmente varía en función de la temperatura, además el signo del coeficiente de Seebeck indica la dirección del flujo de corriente, es decir si S es positivo entonces el extremo con la temperatura más alta tiene el menor voltaje y viceversa.

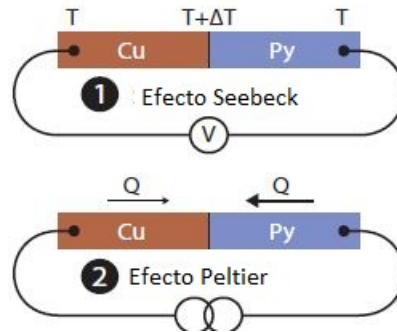


Figura 1.6: Ilustración del efecto Peltier y del efecto Seebeck

El efecto Seebeck suele usarse con la finalidad de desarrollar termopares como sensores de temperatura.

1.8. Efecto espín Seebeck

El efecto espín Seebeck es un efecto análogo al mencionado en la sección anterior, con la diferencia que la corriente generada debido al gradiente de temperatura es una corriente de espines. Este efecto ocurre en la unión de un material ferromagnético con un material no magnético, en la presencia de un campo magnético externo, este campo magnético provoca fluctuaciones térmicas en la unión, por lo que ocurre intercambio de energía entre los dos materiales, debido a esto es que se genera un gradiente de temperatura entre la unión, y se produce un intercambio de espines .

Capítulo 2

Inyección de espines

A lo largo de este capítulo se estudian procesos aleatorios dependientes del tiempo, es decir, procesos estocásticos, con el propósito de definir un proceso de difusión a partir de un proceso continuo de Markov, con esta información se pueden encontrar las ecuaciones de difusión; que serán resueltas para diferentes condiciones en el problema del caminante al azar. Con estas soluciones se analiza el fenómeno de la inyección de espines, que es un proceso por el cual se puede producir una corriente de espines, el proceso de inyección se analiza dentro de una unión entre un conductor no magnético y un ferromagnético.

2.1. Procesos de difusión

Un proceso de difusión modela el movimiento de muchos individuos en un medio, con esto se puede hablar de partículas, bacterias moléculas o incluso rumores.[15] Para comprender estos procesos se requiere de algunas definiciones previas.

2.1.1. Procesos estocásticos

Para definir un proceso estocástico, se considera un sistema que puede caracterizarse por estar en cualesquiera de un conjunto de estados previamente especificado. Si el sistema evoluciona a lo largo del tiempo de acuerdo con alguna ley de movimiento, y sea X_t el estado del sistema al tiempo t . Si se considera que la forma en la que el sistema evoluciona no es determinista, sino provocada por algún mecanismo azaroso, entonces puede considerarse que X_t es una variable aleatoria para cada valor del índice t . A este conjunto de variables aleatorias se le llama proceso estocástico, y representan la evolución de un proceso aleatorio a lo largo del tiempo. Formalmente se puede definir un proceso estocástico considerando un espacio de probabilidad (Ω, \mathcal{F}, P) , donde Ω es el espacio muestral, que esta formado por el conjunto de todos los posibles resultados individuales de un experimento aleatorio, \mathcal{F} es una σ -álgebra sobre

Ω y P es una función que va de \mathcal{F} al intervalo $[0, 1]$ [16, 17]

Definición 2.1 *Un proceso estocástico es una colección de variables aleatorias $\{X_t : t \in T\}$ parametrizada por un conjunto T , llamado espacio parametral, en donde las variables toman valores en un conjunto S llamado espacio de estados*

En casos sencillos se considera que el espacio parametral es el conjunto discreto $\{T = 0, 1, 2, \dots\}$ el cual generalmente se considera es el tiempo; en este caso se dice que el proceso es a tiempo discreto y se denotara por $\{X_n : n = 0, 1, 2, \dots\}$.

También puede considerarse que el espacio parametral es el conjunto continuo $T = [0, \infty)$, en tales casos se dice que el proceso es a tiempo continuo y se denota por $\{X_t : t \geq 0\}$.

Se hablará de estados como los posibles valores que puede tomar la variable aleatoria [18] y al conjunto de todos estos valores se le llama espacio de estados de la variable y será denotado por S . Para poder hablar del conjunto de variables aleatorias con valores en el conjunto de estados S es necesario asociar a este conjunto una σ -álgebra. Como S es un subconjunto de \mathfrak{R} puede tomarse la σ -álgebra de Borel de \mathfrak{R} restringida a S , es decir $S \cap \mathcal{B}$.

Cuando se habla de álgebra de Borel restringida a los reales se habla de una σ -álgebra en la cual se define la medida de Borel. Dada una variable aleatoria real en un espacio de probabilidad, su distribución de probabilidad es, por definición, también una medida en el álgebra boreliana. El álgebra de Borel también es la mínima σ -álgebra sobre \mathbb{R} que contiene a los subconjuntos cerrados de \mathbb{R} , a los intervalos abiertos o cerrados, a los intervalos semiabiertos de la forma $(a, b]$, o a los intervalos de la forma $(-\infty, b]$. Se define la medida de Borel de la siguiente manera. [19]

Definición 2.2 *Sea X un espacio de Hausdorff localmente compacto y sea $\mathcal{B}(X)$ la σ -álgebra que contiene los conjuntos abiertos de X (σ -álgebra de Borel). Cualquier medida μ definida en la σ -álgebra de conjuntos de Borel es llamada una medida de Borel.*

En el caso de los reales con su topología usual se define usualmente la medida $\mu([a, b]) = b - a$ para todo intervalo $[a, b]$.

También se puede considerar que un proceso estocástico es una función definida como

$$X : T \times \Omega \rightarrow S$$

lo que significa que a la pareja (t, ω) se le asocia el valor $X(t, \omega)$, lo cual también se simboliza como $X_t(\omega)$. Para cada valor de t en T , el mapeo $\omega \rightarrow X_t(\omega)$ es una variable aleatoria, mientras que para cada ω en Ω fijo la función $t \rightarrow X_t(\omega)$ es llamada una trayectoria o realización del proceso.

Por los fenómenos que serán analizados se requiere definir algunos procesos estocásticos:

Se dice que un proceso estocástico a tiempo continuo $\{X_t : t \geq 0\}$ es un proceso Gaussiano si para cualesquiera colección finita de tiempos t_1, \dots, t_n el vector $\{X_{t_1}, \dots, X_{t_n}\}$ tiene distribución normal o Gaussiana multivariada.

2.2. Procesos de Markov

Los procesos de Markov son procesos estocásticos en los que se supone conocido el estado presente del sistema, y ocurre que los estados anteriores no influyen en los estados futuros del sistema. Esta propiedad se conoce como propiedad de Markov y se puede expresar de la siguiente forma: para cualesquiera estados x_0, x_1, \dots, x_{n-1} (pasado), x_n (presente), x_{n+1} (futuro) se cumple la igualdad

$$P(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_0 = x_0, \dots, X_n = x_n) = P(X_{n+1} = x_{n+1} \mid X_n = x_n).$$

De esta manera la probabilidad del evento futuro solo depende del evento presente.

Se hablará más a fondo de los procesos de Markov, ya que se requiere conocer sus propiedades para definir los procesos de difusión, estos se caracterizan por cumplir con la propiedad de Markov, lo que significa que el predecir el movimiento subsecuente de una partícula, conociendo su posición al tiempo t no depende de donde ha sido observada durante el intervalo $[0, t]$, como se mencionó anteriormente.

Dicho formalmente hay que considerar a la familia de variables aleatorias $\{Z_\lambda\}_{\lambda \in \Lambda}$, donde Λ es el espacio parametral.

$\sigma(Z_\lambda; \lambda \in \Lambda)$ es la σ -álgebra más pequeña, contenida en \mathcal{F} , con respecto a la cual todas las $\sigma(Z_\lambda)$ son medibles.

Si $\{X_t\}_{t \geq 0}$ es un proceso estocástico se definen tres sub-álgebras de \mathcal{F} de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\leq t} &= \sigma(X_s; 0 \leq s \leq t) \\ \mathcal{F}_{=t} &= \sigma(X_t) \\ \mathcal{F}_{\geq t} &= \sigma(X_s; t \leq s \leq \infty) \end{aligned}$$

Un evento en $\mathcal{F}_{\leq t}$ esta determinado por el comportamiento del proceso $\{X_s\}$ al tiempo t y un evento en $\mathcal{F}_{\geq t}$ es el comportamiento después del tiempo t .

Sea \mathcal{G} una sub σ -álgebra de \mathcal{F} la probabilidad condicional $P(B|\mathcal{G})$ de $B \in \mathcal{F}$ para una \mathcal{G} dada es una función \mathcal{G} medible en Ω la cual cumple que:

$$P(A \cap B) = \int_A P(B|\mathcal{G})(\omega) dP(\omega), \quad A \in \mathcal{G}$$

A partir de esto se define formalmente un proceso de Markov de la siguiente manera:

Definición 2.3 *Un proceso estocástico $\{X_t\}$ es llamado un proceso de Markov si una de las siguientes condiciones equivalentes se satisface*

- i) $P(A \cap B | \mathcal{F}_{=t}) = P(A | \mathcal{F}_{=t}) P(B | \mathcal{F}_{=t}), A \in \mathcal{F}_{\leq t}, B \in \mathcal{F}_{\geq t};$
- ii) $P(B | \mathcal{F}_{\leq t}) = P(B | \mathcal{F}_{=t}), B \in \mathcal{F}_{\geq t}.$

La condición (i) significa que dado el presente del proceso estocástico, el evento A y el B son condicionalmente independientes.

La condición (ii) significa que la probabilidad condicional de un evento B en el futuro dado el presente, es la misma que la probabilidad de B dado el presente y el pasado.

Se define de forma equivalente la propiedad de Markov considerando al pasado de la siguiente forma

Sea $\{\mathcal{F}_t\}_{t \geq 0}$ una familia de sub- σ -álgebras de \mathcal{F} tal que:

- a) Si $s < t$ entonces $\mathcal{F}_s \subset \mathcal{F}_t$;
- b) Para $t \geq 0$, la función X_t es $\mathcal{F}_t/\mathcal{B}$ medible

$$\{X_t \in E\} \in \mathcal{F}_t \text{ para todo } E \in \mathcal{B}$$

La propiedad (b) se expresa diciendo que el proceso está adaptado. Entonces de forma equivalente:

Definición 2.4 Sea $\{X_t\}_{t > 0}$ un proceso estocástico y $\{\mathcal{F}_t\}_{t > 0}$ una familia creciente de sub- σ -álgebras de \mathcal{F} . Se dice que $\{X_t\}_{t > 0}$ es un proceso de Markov con respecto a $\{\mathcal{F}_t\}_{t > 0}$ si satisface

- (i) $\{X_t\}_{t > 0}$ esta adaptado a $\{\mathcal{F}_t\}_{t > 0}$;
- (ii) $P(B|\mathcal{F}_t) = P(B|\mathcal{F}_{=t})$, $B \in P(B|\mathcal{F}_{\geq t})$.

Teniendo en mente el concepto de un proceso de Markov temporalmente homogéneo, para el cual la probabilidad del estado de una partícula no depende del tiempo, se puede decir que una partícula se mueve en el espacio K , el cual se considera un espacio métrico, separable, localmente compacto (generalización de un conjunto cerrado) hasta que llega al tiempo ∂ que es cuando se dice que “muere”; a ∂ se le conoce con el nombre de punto terminal.

$$\zeta(\omega) = \inf\{t \in [0, \infty]; X(\omega) = \partial\}$$

A la variable aleatoria ζ se le conoce como el tiempo de vida del proceso \mathcal{X} [20]

2.2.1. Función de transición

Para definir un proceso de Markov se requiere del concepto de la función de transición, ahora se hablará de forma más amplia acerca de esta, ya que las funciones de transición de procesos de Markov son muy importantes para poder definir un proceso de difusión.

Una función de transición expresa la probabilidad de la transición de una partícula que inicia en la posición X y que sea encontrada en E al tiempo t , donde $E \in \mathcal{B}_\partial$, y \mathcal{B}_∂ es una σ -álgebra en $K_\partial = K \cup \{\partial\}$, generada por \mathcal{B} , estas funciones deben cumplir algunas propiedades matemáticas, mencionadas en el apéndice A, particularmente deben cumplir la ecuación de Kolmogorov-Chapman

$$p_{t+s}(X, E) = \int_K p_t(X, dY) p_h(Y, E)$$

Se dice que una función de transición es normal si satisface:

$$\lim_{t \downarrow 0} p_t(X, K) = 1 \text{ para toda } X \in K$$

La ecuación de Kolmogorov Chapman, expresa que una transición desde la posición X al conjunto E en el tiempo $t+s$ está compuesta por una transición de X a alguna posición Y en tiempo t , seguido por una transición de Y al conjunto E en el tiempo restante s , esta transición tiene una probabilidad $p_s(Y, E)$.

Ahora se considera a $C(K)$ el espacio de funciones de valores reales, continuas en K ; $C(K)$ es un espacio de Banach con la norma suprema

$$\|f\| = \sup_{X \in K} |f(X)|$$

Con cada función de transición de Markov p_t en K , se asocia una familia $\{T_t\}_{t \geq 0}$ de operadores lineales que actúan en $B(K)$; la ecuación de Kolmogorov Chapman implica que esta familia forma un semigrupo.

Sea $C_0(K)$ el sub espacio de $C(K)$ de todas las funciones que satisfacen $\lim_{X \rightarrow \partial} f(X) = 0$; $C_0(K)$ es un sub espacio cerrado de $C(K)$. Ahora se imponen algunas condiciones en la medida $p_t(X, \cdot)$ relacionadas con la continuidad en $X \in K$, para toda $t \geq 0$ fija.

Ahora se requiere establecer condiciones para asegurar la continuidad de un proceso de Markov cuya función de transición tenga trayectorias que sean continuas. Un proceso de Markov $\mathcal{X} = (X_t, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, P_x)$ se dice que es continuo derecho si para toda $X \in K$ se tiene que

$$P_X\{\omega \in \Omega; \text{ el mapeo } t \rightarrow X_t(\omega) \text{ es una función continua derecha } [0, \infty) \text{ en } K_{\text{partial}}\} = 1$$

Ademas \mathcal{X} es continuo si para toda $X \in K$ existe

$$P_X\{\omega \in \Omega; \text{ el mapeo } t \rightarrow X_t(\omega) \text{ es una función continua derecha } [0, \zeta) \text{ en } K_{\text{partial}}\} = 1$$

Se dice ademas que una función de transición de Markov es estocástica y uniformemente continua en K si se satisface la condición de que para todo $\epsilon > 0$ y todo compacto $E \subset K$ se tiene que

$$\lim_{t \downarrow 0} \sup_{X \in E} [1 - p_t(X, U_\epsilon(X))] = 0$$

donde $U_\epsilon(X)$ es una vecindad de X .

Es necesario definir un proceso fuerte de Markov.

Definición 2.5 *Un proceso de Markov $\mathcal{X} = (X_t, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, P_X)$ se dice que tiene la propiedad fuerte de Markov si se cumple la siguiente coondición:*

Para todo $h \geq 0$, $X \in K$, $E \in \mathcal{B}_\partial$ y todos los tiempos de parado τ se tiene que

$$P_X\{X_{t+h} \in E | \mathcal{F}_\tau\} = p_h(X_\tau, E)$$

O de manera equivalente

$$P_X(A \cap \{X_{t+h} \in E\}) = \int_A p_h(X_{t(\omega)}(\omega), E) dP_X(\omega) \quad A \in \mathcal{F}_t$$

Se dice que un proceso fuerte de Markov continuo es un proceso de difusión, con la finalidad de comprender las definiciones presentadas en este capítulo se anexa el apéndice A de conceptos matemáticos.

2.3. Ecuaciones de difusión

Con un proceso de difusión definido como un proceso fuerte y continuo de Markov con las condiciones que esto implica, se requiere de leyes de movimiento para describirlo.

Para este análisis se considera una colección de partículas realizando una caminata al azar en una dimensión con escala espacial Δx y temporal Δt y sea $N(x, t)$ el número de partículas en la posición x al tiempo t . Cuando pasa el tiempo, la mitad de las partículas tiene la posibilidad de moverse a la izquierda y la otra mitad a la derecha. Como sólo la mitad de las partículas se mueve a la derecha, este movimiento queda representado por

$$-\frac{1}{2}[N(x + \Delta x, t) - N(x, t)] \quad (2.1)$$

El flujo de partículas J es la cantidad que atraviesa un elemento de área a durante un intervalo de tiempo Δt con esto se tiene que

$$J = -\frac{1}{2}\left[\frac{N(x + \Delta x, t)}{(a\Delta t)} - \frac{N(x, t)}{(a\Delta t)}\right] \quad (2.2)$$

Multiplicando y dividiendo por $(\Delta x)^2$ se obtiene

$$J = -\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}\left[\frac{N(x + \Delta x, t)}{(\Delta x)^2} - \frac{N(x, t)}{(\Delta x)^2}\right] \quad (2.3)$$

$\phi(x, t) = \frac{N(x, t)}{a\Delta x}$ se define como la concentración, que es el número de partículas por unidad de volumen. A la cantidad $\frac{(\Delta x)^2}{2\Delta t}$ se le llama la constante de difusión D con lo que la expresión anterior resulta ser

$$J = -D\left[\frac{\phi(x + \Delta x, t)}{\Delta x} - \frac{\phi(x, t)}{\Delta x}\right] \quad (2.4)$$

En el límite cuando $\Delta x \rightarrow 0$ se obtiene de la ecuación anterior la primera ley de Fick

$$J = -D \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.5)$$

Esta ecuación implica que el flujo de partículas es proporcional al gradiente de concentración en la dirección x .

Considerando que la densidad de partículas no depende solo de la dimensión x , sino de $\vec{r}(x, y, z)$ y usando la ecuación de continuidad $\frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot J = 0$ ya que se supuso que el flujo de partículas es una cantidad conservada .

Sustituyendo a J en la ecuación de continuidad, se obtiene

$$\frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla \phi(\vec{r}, t)) = 0 \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial \phi(\vec{r}, t)}{\partial t} - D \nabla^2 \phi(\vec{r}, t) = 0 \quad (2.7)$$

La ecuación 2.7 es la ecuación de difusión, la cual describe procesos como los mencionados en la sección anterior, en algunos casos se le llama segunda ley de Fick.[15] Cabe mencionar que esta ecuación cumple la ecuación de Chapman Kolmogorov.[17]

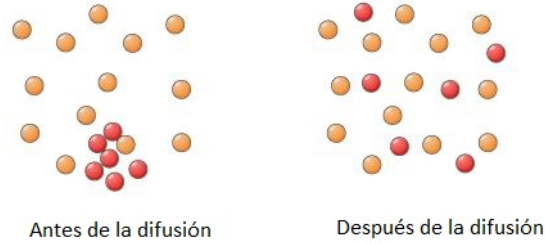


Figura 2.1: Ejemplo de como ocurre un proceso de difusión físicamente.[4]

2.4. Difusión y arrastre de partículas

Se plantea el problema del caminante al azar en una dimensión, considerando el caso de electrones. Los cuales se mueven una distancia l con velocidad v antes de cambiar de dirección, el tiempo que tarda este proceso es $\tau = \frac{l}{v}$. Ahora suponiendo que se aplica un campo eléctrico que no acelere a las partículas de forma significativa.

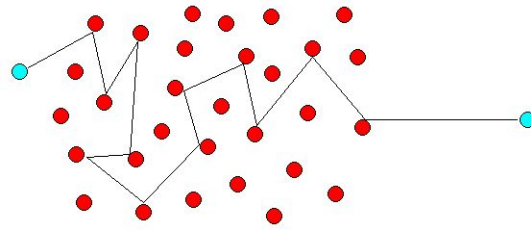


Figura 2.2: Ilustración del camino libre medio de una partícula.[5]

Ahora se considera a $n(x, t)$ la densidad de partículas en x al tiempo t , a N_0 el número de electrones, a partir de esto se define la condición de normalización

$$N_0 = \int_{-\infty}^{\infty} n(x, t) dx.$$

El esquema del problema se muestra en la figura 2.3 donde se puede observar que la densidad de electrones en la posición x depende de los electrones que se encuentran en la posición $x - l$ y tienen probabilidad de moverse a la derecha P_+ y los que se encuentran en la posición $x + l$ y se pueden mover a la izquierda lo cual tiene una probabilidad P_- al tiempo $t - \tau$, de acuerdo con la teoría de la probabilidad $P_+ + P_- = 1$.

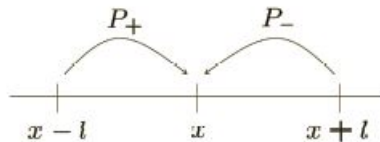


Figura 2.3: Problema del caminante al azar con probabilidad de moverse a la izquierda o a la derecha

Teniendo esto en consideración se dice que la densidad de partículas en la posición x al tiempo t esta dada por

$$n(x, t) = n(x + l, t - \tau)P_- + n(x - l, t - \tau)P_+ \tag{2.8}$$

Expandiendo 2.8 en series de Taylor alrededor de (x, t) y definiendo $\Delta P = P_+ - P_-$ se obtiene

$$n(x, t) = n(x, t) + l \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} P_- - l \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} P_+ + \frac{1}{2} l^2 \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - \tau \frac{\partial n(x, t)}{\partial t}$$

y simplificando

$$\begin{aligned} n(x, t) &= n(x, t) - l \Delta P \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} + \frac{1}{2} l^2 \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - \tau \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} \\ -\tau \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} &= \frac{1}{2} l^2 \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - l \Delta P \frac{\partial n(x, t)}{\partial x}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Se define la cantidad

$$D = \frac{1}{2} \frac{l^2}{t} = \frac{1}{2} v^2 \tau, \quad (2.10)$$

que corresponde a la tasa de difusión de electrones, se dice que el segundo término de la ecuación 2.9 es el arrastre de electrones, por lo que se define a v_d de la siguiente forma

$$v_d = \frac{1}{\tau} \Delta P, \quad (2.11)$$

Bajo la consideración de que $\Delta P \ll 1$ se puede reescribir la ecuación 2.9

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n(x, t)}{\partial x^2} - v_d \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \quad (2.12)$$

Ahora se mostrará que el segundo término de la ecuación puede ser considerado el arrastre de electrones, 2.12 ya que la existencia de este término, implicaría que todos los electrones se mueven a velocidad v_d a partir del valor esperado de la posición

$$\bar{x} = \frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} x n(x, t) dx \quad (2.13)$$

$$\dot{\bar{x}} = \frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dx \quad (2.14)$$

sustituyendo de 2.9 , $\frac{\partial n(x, t)}{\partial t}$ y evaluando esta integral por partes bajo la consideración de que en ∞ y $-\infty$ la densidad de partículas es 0 se obtiene

$$\dot{\bar{x}} = \frac{D}{N_0} \left[x \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial n}{\partial x} dx \right] - \frac{v_d}{N_0} \left[x n(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} n(x, t) dx \right] \quad (2.15)$$

Los tres primeros términos se anulan y por definición el último miembro de la ecuación es N_0 por lo que el valor que se obtiene es v_d como se había planteado.

Ahora se puede analizar en que región se pueden mover los electrones calculando las fluctuaciones de la posición

$$\sigma^2 = \overline{x^2} - \bar{x}^2, \quad (2.16)$$

primero se calcula \bar{x}^2 .

$$\bar{x}^2 = \left(\frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} xn(x, t) dx \right)^2 \quad (2.17)$$

$$= \left(\int_0^t \frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dx \right)^2 dt \quad (2.18)$$

$$= \left(\int_0^t v_d dt \right)^2 \quad (2.19)$$

$$= (v_d t)^2 \quad (2.20)$$

Ahora se realiza el cálculo $\overline{x^2}$

$$\overline{x^2} = \frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 n(x, t) dx,$$

para realizar este cálculo se deriva la expresión anterior con respecto del tiempo obteniendo:

$$\dot{\overline{x^2}} = \frac{1}{N_0} \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \frac{\partial n(x, t)}{\partial t} dx$$

se sustituye de la ecuación (2.11) $\frac{\partial n(x, t)}{\partial t}$ en la expresión anterior e integrando por partes obteniendo

$$\dot{\overline{x^2}} = \frac{D}{N_0} \left[x^2 \frac{\partial n}{\partial x} \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2 \int_{-\infty}^{\infty} x \frac{\partial n}{\partial x} dx \right] - \frac{v_d}{N_0} \left[x^2 n(x, t) \Big|_{-\infty}^{\infty} - 2 \int_{-\infty}^{\infty} xn(x, t) dx \right]$$

El primer y tercer términos se hacen 0, mediante integración del segundo y cuarto términos y se obtiene

$$\dot{\overline{x^2}} = 2D + 2v_d^2 t, \quad (2.21)$$

se toma el tiempo como variable de integración 2.21 y se obtiene $\overline{x^2} = 2Dt + v_d^2 t^2$ con toda la información anterior se calcula σ^2 de la siguiente manera:

$$\sigma^2 = 2Dt + (v_d t)^2 - (v_d t)^2 \quad (2.22)$$

$$= 2Dt. \quad (2.23)$$

Se propone para la ecuación de difusión una solución del estilo:

$$n(x, t) = \frac{N_0}{\sqrt{t}} f\left(\frac{x}{\sqrt{t}}\right) \quad (2.24)$$

se hace el cambio de variable $\zeta = \frac{x}{\sqrt{t}}$ y se toma la condición de normalización $\int_{-\infty}^{\infty} f(\zeta) d\zeta = 1$ y sustituyendo en la ecuación 2.12

$$f'' + \frac{1}{2}\zeta f' + f = 0 \quad (2.25)$$

con $f(0) = 1$, de 2.25 con esto se obtiene la solución a la ecuación de difusión para la densidad de electrones como

$$n(x, t) = \frac{N_0}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \quad (2.26)$$

La velocidad v_d está relacionada con el campo eléctrico dicha relación se expresa por

$$v_d = \frac{-e\tau}{m} E \quad (2.27)$$

se dice que coeficiente de proporcionalidad $\frac{e\tau}{m}$, es la movilidad electrónica, μ_e , representa la facilidad que tienen los electrones para moverse en el medio propuesto. Con esto se representa la ecuación 2.12 de la siguiente manera

$$\frac{\partial n(x, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[-\mu_e E n(x, t) - D \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} \right] = 0 \quad (2.28)$$

Al término entre corchetes se le llama J , y por las hipótesis de conservación asumidas cumple la ecuación de continuidad, por lo que a J se le considera como una corriente de electrones.

2.4.1. Difusión y arrastre de espines

Se plantea de manera análoga el problema del caminante al azar para electrones, solo que esta vez los electrones son distinguibles por su espín el cual puede tener orientación hacia arriba o hacia abajo. La densidad total de electrones viene dada por

$$n = n \uparrow + n \downarrow \quad (2.29)$$

Mientras que la densidad de espines se expresa mediante

$$s = n \uparrow - n \downarrow, \quad (2.30)$$

Se considera ahora que los espines pueden cambiar de orientación en un tiempo τ , y que la probabilidad de cambio de orientación es ω , por lo que se puede escribir la densidad de partículas $n(x, t) \uparrow$

$$n(x, t) \uparrow = n \uparrow(x-l, t-\tau)P_+(1-\omega) + n \uparrow(x+l, t-\tau)P_-(1-\omega) + \quad (2.31)$$

$$n \downarrow(x-l, t-\tau)P_+(\omega) + n \downarrow(x+l, t-\tau)P_-(1-\omega) \quad (2.32)$$

la cantidad $1 - \omega$ representa la probabilidad de que no haya cambio en la orientación del espín por lo cual los electrones que ya tienen espín orientado hacia arriba no necesitan cambiar. Ahora se hace un desarrollo en series de Taylor tal como en el caso de los electrones que no podían ser etiquetados por su espín obteniendo, el tratamiento matemático es similar por lo cual se llega a que

$$\frac{\partial n \uparrow(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n \uparrow(x, t)}{\partial x^2} - v_d \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \omega(n \uparrow - n \downarrow), \quad (2.33)$$

análogamente para los espines orientados hacia abajo se obtiene

$$\frac{\partial n \downarrow(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 n \downarrow(x, t)}{\partial x^2} - v_d \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \omega(n \downarrow - n \uparrow), \quad (2.34)$$

al combinar ambas ecuaciones se obtiene una ecuación que expresa el arrastre y difusión de espines

$$\frac{\partial s(x, t)}{\partial t} = D \frac{\partial^2 s(x, t)}{\partial x^2} - v_d \frac{\partial n(x, t)}{\partial x} - \frac{s}{\tau_s} \quad (2.35)$$

donde $\tau_s = \frac{2\omega}{\tau}$ que es el tiempo de relajación del espín.

Como en el caso de electrones sin distinguir por espín se define a J_s como

$$J_s = -\mu E s - D \frac{\partial s}{\partial x}, \quad (2.36)$$

esta ecuación representa la corriente de espines.

En este caso la ecuación de continuidad se escribe de la siguiente manera

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial J_s}{\partial x} = -\frac{s}{\tau_s} \quad (2.37)$$

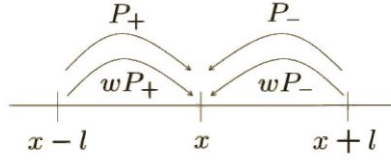


Figura 2.4: Esquema del problema del caminante al azar para el caso de electrones con espín

En un dispositivo espintrónico, debe generarse una población de electrones espín- polarizados, es decir, un grupo de electrones, en el que exista un exceso de estos que tenga su con espín orientado hacia abajo o hacia arriba. Esta polarización se escribe como

$$P = \frac{n \uparrow - n \downarrow}{n}, \tag{2.38}$$

en un metal paramagnético $P = 0$.

P puede tener un valor máximo de +1, cuando $n \downarrow = 0$, y un valor mínimo de -1 cuando $n \uparrow = 0$, en estos casos se dice que la polarización es completa. Para cualquier otro valor de P se dice que la polarización es parcial, con la polarización aparece una magnetización espontánea.[21]

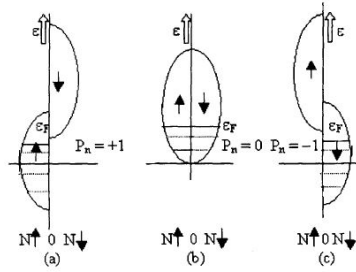


Figura 2.5: Niveles de energía ocupados en los distintos tipos de polarización

Con las condiciones iniciales $s(x, 0) = S_0 \delta(x)$ con tratamiento análogo al de la sección anterior

$$s(x, t) = \frac{S_0}{\sqrt{(4\pi Dt)}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} e^{-\frac{t}{\tau_s}} \tag{2.39}$$

Para obtener la distancia máxima a la que se difunden los espines, se considera como fluctúa la posición de estos análogamente como en el caso 2.21 para el tiempo $t = \tau_s$, (que es el tiempo de relajación) $\sigma = \sqrt{2D\tau_s} = \sqrt{2}L_s$, a la cantidad $L_s = \sqrt{D\tau_s}$ se le llama longitud de difusión de espines, y se define como la distancia en que los espines pueden mantener su orientación[22].

Cabe mencionar que si en la ecuación 2.35 de espines solo se considerara el término de difusión, estos pueden ser transportados por distancias del orden de $100\mu m$. [23]

2.5. Potenciales cuasiquímicos

Ahora se considera el caso de un material conductor, el cual debido a la abundancia de electrones libres en su último nivel de energía puede pensarse como un gas de Fermi en equilibrio donde la densidad de electrones esta dada por

$$\int_0^\infty \frac{d\epsilon g(\epsilon)}{e^{\frac{\epsilon-\eta}{k_B T}} - 1}, \quad (2.40)$$

donde η es el potencial químico y $g(\epsilon)$ es la densidad de estados del gas de Fermi.

Se introducen condiciones que generan una leve perturbación del estado de equilibrio, se aplica un campo eléctrico estático $E = -\nabla\phi$ que no provoca flujo de corrientes, la situación es unicamente hipotética, ya que esto no es posible en un conductor, pero si esto ocurriera la densidad de electrones cambiaría debido a la presencia del campo eléctrico de esta forma

$$\int_0^\infty \frac{d\epsilon g(\epsilon)}{e^{\frac{\epsilon-\eta-e\phi}{k_B T}} - 1}, \quad (2.41)$$

la corriente eléctrica se puede escribir como

$$J = \sigma E - D\nabla n \quad (2.42)$$

dado que $n = n(\eta + \phi)$

$$J = \sigma\nabla\phi - D\frac{\partial n_0}{\partial\eta}e^2\nabla\phi \quad (2.43)$$

donde n es la densidad de electrones, como se impuso la condición de que no exista flujo de corrientes, esta cantidad debe valer 0, por lo tanto de aquí se obtiene la relación de Einstein

$$\sigma = e^2 D \frac{\partial n_0}{\partial \eta}, \quad (2.44)$$

que es la forma general de dicha relación.

Ahora se considera que la corriente fluye, pero se considera que la distribución de la densidad de espines solo depende de su energía, pero el potencial químico deja de ser uniforme tomando la siguiente forma

$$\eta \rightarrow \eta + e\mu(x) \quad (2.45)$$

donde μ es una adición al potencial químico, por lo que la densidad de partículas se escribe ahora como

$$n(x) = n_0(\eta + e\mu + e\phi) \quad (2.46)$$

y se considera que la relación de Einstein en el caso de equilibrio se cumple dado que se considera un régimen lineal donde la corriente es proporcional E y ∇n , la corriente de espines adquiere la forma de la ley de Ohm donde

$$J = \sigma E - D \nabla n \quad (2.47)$$

$$J = \sigma \nabla \mu \quad (2.48)$$

μ se conoce como el potencial cuasiquímico.

Un material puede tener distinta conductividad dependiendo si los electrones tienen espín hacia arriba o hacia abajo, que puede ser descrita por la siguiente ecuación

$$\begin{bmatrix} \sigma_{\uparrow} \\ \sigma_{\downarrow} \end{bmatrix} = 0.5\sigma \left[1 + \beta \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \right]$$

donde σ se define como la conductividad efectiva, β como la selectividad de espines, σ_s se define como la diferencia

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow} \\ \beta &= \frac{\sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow}}{\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow}} \\ \sigma_s &= \sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow} \end{aligned}$$

asumiendo que dentro de cada banda los electrones, se encuentran en equilibrio térmico. Como resultado, la difusión y arrastre de electrones pueden ser descritos por el potencial cuasiquímico dependiente del espín μ_{\uparrow} y μ_{\downarrow} , y se pueden definir a partir de los potenciales de carga y de espín

$$\begin{bmatrix} \mu_{\uparrow} \\ \mu_{\downarrow} \end{bmatrix} = \mu \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \mu_s \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix},$$

el potencial de carga μ describe el arrastre y acumulación de carga, mientras que el potencial de espín μ_s describe la difusión y acumulación de espines. En términos de los potenciales dependientes de espín, se enuncia la ley de Ohm de forma similar a 2.48 que describe el arrastre y difusión de electrones

$$\vec{J}_{\uparrow,\downarrow} = \sigma_{\uparrow,\downarrow} \nabla \mu_{\uparrow,\downarrow}$$

donde $\vec{J}_{\uparrow,\downarrow}$ y $\sigma_{\uparrow,\downarrow}$ corresponden a la corriente y a la conductividad para electrones con espín hacia abajo o hacia arriba respectivamente.

El flujo de carga y el flujo de espines son descritos por la carga y corriente de espines, y se pueden calcular mediante la siguiente expresión

$$J = \vec{J}_{\uparrow} + \vec{J}_{\downarrow} = \sigma \nabla \mu + \sigma_s \nabla \mu_s$$

$$J_s = \vec{J}_{\uparrow} - \vec{J}_{\downarrow} = \sigma_s \nabla \mu + \sigma \nabla \mu_s$$

de la misma manera se construye el coeficiente de difusión dependiente del espín y el coeficiente de difusión de carga como [9]

$$D = \frac{1}{2}(D_{\uparrow} + D_{\downarrow})$$

$$D_s = \frac{1}{2}(D_{\uparrow} - D_{\downarrow})$$

en términos del coeficiente de difusión puede conocerse el potencial cuasi-químico

$$\mu_{\uparrow,\downarrow} = \left(\frac{eD_{\uparrow,\downarrow}}{\sigma_{\uparrow,\downarrow}} \right) \delta n_{\uparrow,\downarrow} - \phi \quad (2.49)$$

con $\delta n_{\uparrow,\downarrow} = n_{\uparrow,\downarrow} - n_{0\uparrow,\downarrow}$ definido como el cambio en la densidad de electrones del valor de equilibrio para espín hacia arriba o hacia abajo.

En estado estacionario la ecuación de continuidad dependiendo del espín se escribe como

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \vec{J}_{\uparrow} &= e \left[-\frac{n_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} + \frac{n_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} \right] \\ \nabla \cdot \vec{J}_{\downarrow} &= e \left[-\frac{n_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}} + \frac{n_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} \right] \end{aligned}$$

Se define además la densidad de estados en el nivel de Fermi como g_{\uparrow} y g_{\downarrow}

$$\begin{aligned} g &= g_{\uparrow} + g_{\downarrow} \\ g_s &= g_{\uparrow} - g_{\downarrow} \end{aligned}$$

se considerará el caso de conductores degenerados, debido a las complicaciones que aparecen en el caso no degenerado. Expresando la relación de Einstein en términos de variables dependientes del espín, esta toma la siguiente forma

$$\sigma_{\uparrow,\downarrow} = e^2 g_{\uparrow,\downarrow} D_{\uparrow,\downarrow}$$

De la ley de Gauss, el campo eléctrico debe cumplir que

$$\nabla \cdot E = \frac{1}{\epsilon_0} (n_{\uparrow} + n_{\downarrow})$$

Y por la ecuación de la continuidad se tiene que

$$\nabla \cdot (\vec{J}_{\uparrow} + \vec{J}_{\downarrow}) = 0 \quad (2.50)$$

Al combinar 2.47 con 2.50 se obtiene

$$\nabla^2 \begin{bmatrix} n_{\uparrow} \\ n_{\downarrow} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \kappa_{\uparrow}^2 + \frac{1}{D_{\uparrow}\tau_{\uparrow\downarrow}} & \kappa_{\uparrow}^2 - \frac{1}{D_{\uparrow}\tau_{\downarrow\uparrow}} \\ \kappa_{\downarrow}^2 + \frac{1}{D_{\downarrow}\tau_{\uparrow\downarrow}} & \kappa_{\downarrow}^2 - \frac{1}{D_{\downarrow}\tau_{\downarrow\uparrow}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_{\uparrow} \\ n_{\downarrow} \end{bmatrix}$$

donde $\kappa_{\uparrow,\downarrow}^2 = \frac{e^2 g_{\uparrow,\downarrow}}{\epsilon_0}$

Se considera el caso en que el espín hacia arriba y hacia abajo no están acoplados esto es cuando $\frac{1}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{1}{\tau_{\downarrow\uparrow}} = 0$, donde $\tau_{\downarrow\uparrow}$ representa el tiempo que tarda en cambiar la orientación del espín de un electrón cuyo estado, es espín hacia abajo, a espín hacia arriba, $\tau_{\uparrow\downarrow}$ representa el tiempo del otro cambio de orientación posible. Se obtienen los eigenvalores de la matriz para este caso, la ecuación de eigenvalores es

$$\lambda^2 - (\kappa_{\uparrow}^2 + \kappa_{\downarrow}^2)\lambda = 0$$

obteniéndose eigenvalores y eigenvectores para la carga y para el espín que son los modos de carga y de espín

$$v_Q = \begin{bmatrix} \gamma_{\uparrow} \\ \gamma_{\downarrow} \end{bmatrix} (\lambda_Q)^2 = \kappa_{\uparrow}^2 + \kappa_{\downarrow}^2$$

$$v_s = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} (\lambda_s^2) = 0$$

Esto implica que en el límite de no acoplamiento, el modo de espín no tiene densidad de carga neta y además no decae en el espacio. Como la divergencia del modo de carga es 0 la carga no lleva ninguna corriente.[24]

A partir de la condición para que los espines no estén acoplados, se tiene que

$$\frac{g_{\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow}} = \frac{g_{\downarrow}}{\tau_{\downarrow\uparrow}}$$

con lo que la ecuación de continuidad toma la forma

$$\nabla \cdot \vec{J}_{\lambda} = \lambda e^2 \frac{g_{\uparrow}g_{\downarrow}}{g_{\uparrow} + g_{\downarrow}} \frac{\mu_{\lambda} - \mu_{-\lambda}}{\tau_s}$$

donde el valor de λ depende de la orientación del espín si este es hacia arriba o hacia abajo puede ser 1 y -1 respectivamente $\tau_s = \frac{\tau_{\uparrow\downarrow}\tau_{\downarrow\uparrow}}{\tau_{\uparrow\downarrow} + \tau_{\downarrow\uparrow}}$ es el tiempo de relajación de espín. Con la polarización de corriente de espín definida como

$$P_J = \frac{J_{\uparrow} - J_{\downarrow}}{J_{\uparrow} + J_{\downarrow}}$$

y dado que J_s puede ser expresada como

$$J_s = \beta + 4 \frac{\nabla \mu_s \sigma_{\uparrow} \sigma_{\downarrow}}{\sigma}$$

$$P_J = \beta + \frac{1}{J} 4 \nabla \mu_s \frac{\sigma_{\uparrow} \sigma_{\downarrow}}{\sigma}$$

De la ecuación 2.49 y de la relación de Einstein se encuentra que μ_s

$$\begin{aligned} \mu_s &= \left(\frac{eD_{\uparrow}}{\sigma_{\uparrow}} \right) \delta n_{\downarrow} - \left(\frac{eD_{\downarrow}}{\sigma_{\downarrow}} \right) \delta n_{\downarrow} \\ &= \left(\frac{eD_{\uparrow}}{e^2 g_{\uparrow} D_{\uparrow}} \right) \delta n_{\uparrow} - \left(\frac{eD_{\downarrow}}{e^2 g_{\downarrow} D_{\downarrow}} \right) \delta n_{\downarrow} \\ &= \frac{1}{e} \left(\frac{g_{\uparrow} + g_{\downarrow}}{g_{\uparrow} g_{\downarrow}} \right) (\delta n_{\uparrow} - \delta n_{\downarrow}) \end{aligned}$$

a esta cantidad se le conoce como acumulación de espines.

Se escribe la ecuación de la continuidad de acuerdo con 2.37 de la siguiente manera

$$\nabla \cdot \vec{J}_s = e \frac{s}{\tau_s}$$

Para un conductor esta ecuación puede ser modificada por

2.6.1. Metal no magnético

Un metal no magnético se define como un material conductor en el cual la conductividad es independiente de la polarización del espín $\beta = 0$, por lo que $\sigma_{N\uparrow} = \sigma_{N\downarrow} = \frac{\sigma_N}{2}$ donde N se utiliza como subíndice para identificar se está hablando del material no magnético, de estas condiciones se tiene que

$$P_{JN}(0) = \frac{1}{J} \sigma_N \nabla \mu_{sN}(0)$$

Por lo que se resuelve para este caso la ecuación 2.51 que adquiere la forma

$$\nabla^2 \mu_{sN} = \frac{1}{L_{sN}^2} \mu_{sN}$$

con la condición de frontera $\mu_{sN}(\infty) = 0$ obteniendo como solución

$$\mu_{sN} = \mu_{sN}(0) e^{\frac{-x}{L_{sN}}}$$

Se calcula el gradiente con la finalidad de encontrar la polarización

$$\begin{aligned} \nabla \mu_{sN} &= -\frac{1}{L_{sN}} \mu_{sN} \\ P_{JN}(0) &= -\frac{1}{J} \frac{\mu_{sN}(0)}{R_N} \end{aligned}$$

donde $R_N = \frac{L_{sN}}{\sigma_N}$ es la resistencia efectiva, de forma análoga a la ley de Ohm, la acumulación de espines en términos de la polarización se escribe como

$$\mu_{sN}(0) = -JP_{JN}(0)R_N \quad (2.52)$$

de donde se concluye, que mientras mas grande es la longitud de difusión mayor será la acumulación de espines.

2.6.2. Ferromagnético

En el caso del material ferromagnético de la unión, la polarización de corriente P_J es

$$P_J(0) = \beta_F + \frac{1}{J} 4 \frac{\sigma_{F\uparrow} \sigma_{F\downarrow}}{\sigma_F} \nabla \mu_{sF}(0)$$

De la ecuación 2.51 con el fin de obtener $\mu_{sF}(0)$ para el ferromagnético es

$$\nabla^2 \mu_{sF} = \frac{1}{L_{sF}^2} \mu_{sF}$$

De forma análoga la solución obtenida con la condición de frontera que $\mu_{sF}(-\infty) = 0$

$$\begin{aligned} \mu_{sF} &= \mu_{sF}(0) e^{\frac{x}{L_{sF}}} \\ \nabla \mu_{sF} &= \frac{\mu_{sF}}{L_{sF}} \end{aligned}$$

Por lo que la forma de la polarización queda como

$$P_{JF}(0) = \beta_F + \frac{1}{J} \frac{\mu_{sF}(0)}{R_F}$$

a R_F se le llama la resistencia efectiva y está dada por

$$R_F = \frac{\sigma_F}{4\sigma_{F\uparrow}\sigma_{F\downarrow}}$$

Las propiedades de la difusión de espines en el material ferromagnético y en el conductor no magnético son similares, sin embargo la longitud de difusión es más corta en el metal ferromagnético debido a la acumulación de carga a lo largo de la dirección del flujo de la corriente de espines, y el campo eléctrico inducido por esta acumulación de carga.

2.6.3. Región de contacto

Para la región de contacto se requiere encontrar la diferencia entre los potenciales químicos entre las regiones antes mencionadas, con el fin de encontrar la polarización de la corriente de espines, por lo que esta se escribe de la siguiente manera

$$\begin{aligned} J_{\uparrow} &= \Sigma_{\uparrow N} [\mu_{\uparrow}(0) - \mu_{\uparrow F}(0)] = \Sigma_{\uparrow} \Delta \mu_{\uparrow}(0) \\ J_{\downarrow} &= \Sigma_{\downarrow N} [\mu_{\downarrow}(0) - \mu_{\downarrow F}(0)] = \Sigma_{\downarrow} \Delta \mu_{\downarrow}(0) \end{aligned}$$

donde Σ_{λ} es la conductancia dependiente del espín del punto de contacto y para un modelo de electrones libres se cumple que $\Sigma_{\uparrow} \neq \Sigma_{\downarrow}$.

En términos de la conductancia, se define la corriente de carga y la corriente de espines de la siguiente forma.

$$\begin{aligned} J &= \Sigma \Delta \mu(0) + \Sigma_s \Delta \mu_s(0) \\ J_s &= \Sigma_s \Delta \mu(0) + \Sigma \Delta \mu_s(0) \\ \Sigma &= \Sigma_{\uparrow} + \Sigma_{\downarrow} \\ \Sigma_s &= \Sigma_{\uparrow} - \Sigma_{\downarrow} \end{aligned}$$

de manera análoga al tratamiento realizado para la obtención de la polarización de la corriente de espines, se obtienen las siguientes cantidades

$$\begin{aligned} J_s &= \beta_\Sigma J + \frac{\Delta\mu_s}{R_C} \\ \beta_\Sigma &= \frac{\Sigma_\uparrow - \Sigma_\downarrow}{\Sigma} \\ R_C &= \frac{\Sigma}{4\Sigma_\uparrow\Sigma_\downarrow} \\ P_{JC} &= \beta_\Sigma + \frac{1}{J} \frac{\Delta\mu_s}{R_C} \end{aligned}$$

Para poder determinar la polarización de manera única, se considera que la corriente de espines es continua en la región de contacto, es decir

$$P_J = P_{JF}(0) = P_{JN}(0) = P_{JC}$$

con estas condiciones de continuidad en cuenta se calcula P_J

$$\begin{aligned} P_{JC} &= \beta_\Sigma + \frac{1}{J} \frac{(\mu_{\uparrow N}(0) - \mu_{\uparrow F}(0)) - (\mu_{\downarrow N}(0) - \mu_{\downarrow F}(0))}{R_C} \\ P_{JC} &= \beta_\Sigma + \frac{1}{J} \frac{\mu_{sN}(0) - \mu_{sF}(0)}{R_C} \end{aligned}$$

ahora como $P_{JF}(0) = P_{JN}(0)$ se obtienen $\mu_{sF}(0)$ y $\mu_{sN}(0)$

$$\begin{aligned} \beta_F + \frac{1}{J} \frac{\mu_{sF}}{R_F} + \frac{1}{J} \frac{\mu_{sN}}{R_N} &= 0 \\ \mu_{sF} &= -JR_F\beta_F + \frac{R_F}{R_N}\mu_{sN} \end{aligned}$$

sustituyendo 2.52

$$\mu_{sF} = -JR_F\beta_F + JR_F P_{JN}(0)$$

sustituyendo en J_C y teniendo en cuenta que $P_{JN}(0) = P_J$ y $P_{JC} = P_J$

$$\begin{aligned} P_{JC} &= P_\Sigma + \frac{1}{JR_C} (-JP_{JN}(0)R_N + JR_F P_{\sigma F} - JR_F P_{JN}(0)) \\ P_{JC} &= \frac{P_\Sigma R_C - P_{JN}(0)R_N + R_F P_{\sigma F} - R_F P_{JN}(0)}{R_C} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_J &= \frac{P_\Sigma R_C - P_J R_N + R_F P_{\sigma F} - R_F P_J}{R_C} \\
 (R_C + R_N + R_F)P_J &= P_\Sigma R_C - +R_F P_{\sigma F} \\
 P_J &= \frac{P_\Sigma R_C - +R_F P_{\sigma F}}{R_C + R_N + R_F}
 \end{aligned}$$

esta cantidad representa la eficiencia de la inyección de espines, por lo que es fundamental en el análisis del fenómeno.

Ahora se escribe la ecuación 2.52 como

$$\mu_{sN} = -JP_J R_N$$

si $J < 0$ los electrones fluyen de F a N, la acumulación de espines es positiva, el fenómeno se llama inyección de espines. Si $J > 0$ los electrones fluyen de N a F, el fenómeno recibe el nombre de extracción de espines.

De esta manera se ha encontrado la descripción de el flujo de una corriente de espines en una unión F/N que es donde se estudiará posteriormente el efecto espín Seebeck.

Capítulo 3

Interacción espín órbita

En este capítulo se analiza la interacción entre el momento angular orbital y el espín, como el mecanismo para controlar una corriente de espines, se estudia el origen de la energía de interacción. Se analiza el caso de las interacciones espín órbita de Rashba y Dresselhaus para diferentes estructuras de semiconductores.

3.1. Origen de la interacción

El origen de este fenómeno es relativista, se considera a un electrón que se mueve con velocidad $\mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{m_e}$ alrededor del núcleo, la carga presente en el núcleo genera un campo eléctrico \mathbf{E} . En el marco de referencia del electrón de acuerdo con la teoría de la relatividad, aparece un campo magnético \mathbf{B}' dado por

$$\mathbf{B}' = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (3.1)$$

el momento magnético intrínseco del electrón $\mathbf{M}_s = q\mathbf{S}/m_e$, interactúa con el campo \mathbf{B}' . La energía de interacción entre estos se escribe como

$$W' = -\mathbf{M}_s \cdot \mathbf{B}' \quad (3.2)$$

El campo electrostático se puede expresar como $-\frac{1}{q} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}$, donde $V(r) = -\frac{e^2}{r}$ es la energía electrostática del electrón a una distancia r del núcleo, sustituyendo esta en la ecuación 3.1, se obtiene

$$\mathbf{B}' = \frac{1}{qc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m_e} \times \hat{\mathbf{r}} \quad (3.3)$$

Como en notación de operadores

$$\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{r}} = -\hat{\mathbf{L}} \quad (3.4)$$

donde $\hat{\mathbf{L}}$ representa el operador de momento angular orbital.

Se combina la ecuación 3.4 y 3.3, en la ecuación 3.2 con lo que se obtiene

$$W' = \frac{e^2}{m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (3.5)$$

La ecuación 3.5, representa la energía debida al acoplamiento del momento angular orbital y el momento de espín.

Cabe señalar que en general el momento angular orbital y el espín no son una cantidad conservada; sin embargo el momento angular total $J = L + S$ se conserva cuando $L = \hat{r} \times \hat{p}$.

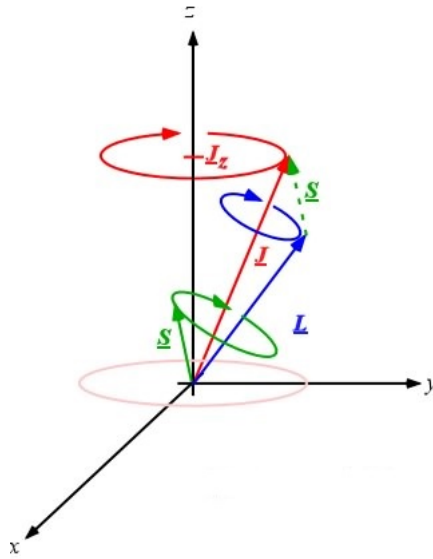


Figura 3.1: Modelo vectorial de la interacción espín órbita

3.2. Interacción espín órbita en semiconductores.

De acuerdo con el teorema de la degeneración de Kramer, los estados de energía de sistemas con un número impar de electrones permanecen al menos doblemente degenerados en la presencia de campos puramente eléctricos.

La existencia de degeneración en los estados de energía de un sistema cuántico, cuando esta degeneración no es consecuencia de los valores numéricos de los parámetros del sistema, está relacionado a la invariancia o propiedades de simetría del sistema. Si el Hamiltoniano del sistema es invariante bajo alguna operación, entonces realizar esta operación sobre una eigenfunción del Hamiltoniano dará origen a una nueva función que es también una eigenfunción del Hamiltoniano correspondiente al mismo eigenvalor de la energía; por lo que la invariancia del Hamiltoniano implica la degeneración de los estados de energía. [25]

Cabe mencionar que la simetría de inversión temporal preserva la degeneración de Kramer, entre una función de onda y su conjugada y en cualquier punto de la zona de Brillouin se cumple que

$$E(k, \uparrow) = E(-k, \downarrow), \quad (3.6)$$

la simetría a la reversión temporal, se refiere a la solución en que las partículas tienen el mismo movimiento si se cambia t por $-t$ en el Hamiltoniano.

Si un sistema de partículas tiene simetría espacial, es decir, que la operación de cambiar r por $-r$ no modifica el sistema, entonces las energías cumplen que

$$E(k, \uparrow) = E(-k, \uparrow) \quad (3.7)$$

$$E(k, \downarrow) = E(-k, \downarrow), \quad (3.8)$$

en el caso de un cristal que tiene simetría de regresión temporal y espacial, la estructura de bandas cumple que

$$E(k, \uparrow) = E(k, \downarrow), \quad (3.9)$$

lo cual quiere decir que la energía no depende del espín del electrón, como se ilustra en la figura 3.2.

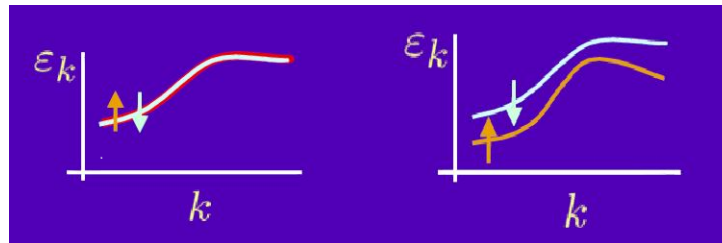


Figura 3.2: Diagrama E vs k sólido con simetría espacial (izquierda) sólido sin simetría espacial(derecha)

Se analiza la forma en que se produce el acoplamiento espín órbita en una heteroestructura semiconductor, se considera un pozo cuántico semiconductor parcial que crece en la dirección z , como se muestra en la figura 3.3, en dichas estructuras aparece una interacción espín órbita debida a la presencia de campos eléctricos.

Se considera la sub banda del pozo cuántico más baja, donde se puede demostrar que el valor promedio del campo eléctrico es 0 independientemente de la posición. De acuerdo con la relación de Ehrenfest, el promedio de la fuerza sobre un estado ligado es 0, lo cual se traduce en la siguiente expresión

$$\langle \dot{p}_z \rangle_c = \langle \psi_c | \dot{p}_z | \psi_c \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_c | [p_z, \hat{H}_c] | \psi_c \rangle = 0 \quad (3.10)$$

debido a que $|\psi_c\rangle$ son estados ligados, lo que implica que son funciones cuadrado integrables, y \hat{H}_c es un operador hermitiano. El Hamiltoniano del pozo cuántico es[26]

$$\hat{H}_c = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*} + eV_c(z) \quad (3.11)$$

$$\langle \psi_c | \dot{p}_z | \psi_c \rangle_c = \frac{1}{i\hbar} \langle \psi_c | [p_z, H_c] | \psi_c \rangle_c = \frac{e}{i\hbar} \langle \psi_c | [p_z, V_c(z)] | \psi_c \rangle \quad (3.12)$$

$$= - \left\langle \psi_c \left| e \frac{\partial V_c(z)}{\partial z} \right| \psi_c \right\rangle_c = \langle \psi_c | eE_c(z) | \psi_c \rangle_c \quad (3.13)$$

como $\langle \dot{p}_z \rangle_c = 0$ el campo eléctrico en cualquier punto es 0.

Debido a que en algunos semiconductores la masa efectiva m^* depende de la posición, el Hamiltoniano se expresa de distinta manera debido esta variación

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right) + eV(z) \quad (3.14)$$

de manera análoga al caso anterior con la finalidad de calcular el valor esperado de la fuerza

$$\begin{aligned} \langle \psi_c | \dot{p}_z | \psi_c \rangle_c &= \left\langle \psi_c \left| \frac{1}{i\hbar} \frac{\hbar}{i} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial z} \right) + eV(z) \right) - \left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial z} \right) + eV(z) \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] \right| \psi_c \right\rangle = 0 \\ &= \langle \psi_c | eE(z) | \psi_c \rangle + \langle \psi_c | F_m | \psi_c \rangle_c = 0 \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\langle \psi_c | F_m | \psi_c \rangle_c = \left\langle \psi_c \left| \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*} \right) \frac{\partial}{\partial z} \right] \right| \psi_c \right\rangle = -\frac{\hbar^2}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \left\| \frac{\partial \psi}{\partial z} \right\|^2 \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \right) dz$$

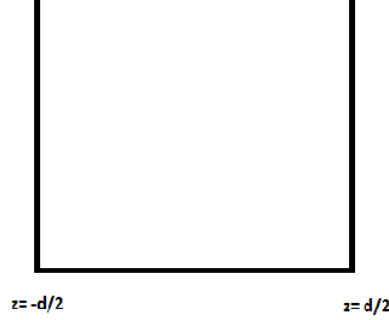


Figura 3.3: Esquema del pozo de potencial propuesto

Para el caso mostrado en la fig. 3.2 la masa efectiva que depende de la posición se escribe

$$m^*(z) = m^{*(l)}\Theta(-z - d/2) + m^{*(c)}\Theta(d/2 - |z|) + m^{*(r)}\Theta(z - d/2), \quad (3.16)$$

donde $\Theta(z)$ representa la función escalón de Heaviside, la función de onda debe de ser continua, por lo que las condiciones de frontera en los límites del pozo se expresan

$$\psi_c|_{z_{ij}^-} = \psi_c|_{z_{ij}^+}, \quad \frac{1}{m^{*(i)}} \frac{\partial \psi_c}{\partial z} \Big|_{z_{ij}^-} = \frac{1}{m^{*(j)}} \frac{\partial \psi_c}{\partial z} \Big|_{z_{ij}^+}; \quad i, j = l, r, c \quad (3.17)$$

aplicando las condiciones de frontera, se obtiene

$$\langle \psi_c | F_m | \psi_c \rangle_c = \frac{\hbar^2}{2} \left[\left(m^{*(c)} - m^{*(r)} \right) \left(\left| \frac{1}{m^*} \frac{\partial \Psi_c}{\partial z} \right|^2 \right) \Big|_{z=-\frac{d}{2}} - \left(m^{*(c)} - m^{*(l)} \right) \left(\left| \frac{1}{m^*} \frac{\partial \Psi_c}{\partial z} \right|^2 \right) \Big|_{z=\frac{d}{2}} \right] \quad (3.18)$$

y se obtiene que el valor esperado es distinto de 0, por lo que el campo eléctrico también es distinto de 0.

3.3. Estructura de bandas de semiconductores

Para el caso de un material semiconductor a continuación se presentan dos métodos para tratar con los términos de interacción debido a su estructura de bandas.

3.3.1. Aproximación k·p

En el método k·p se extrapola la estructura de bandas sobre la zona de Brillouin, de el gap de la zona central y elementos ópticos de matriz. Mediante

el uso de este método se pueden obtener expresiones analíticas para la dispersión de bandas y masas efectivas alrededor de puntos de alta simetría.

Se toma el caso de un cristal semiconductor con un potencial periódico por lo cual las funciones de onda pueden ser escritas en términos de las funciones de Bloch de tal manera que

$$\psi_{\nu k} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r) \quad (3.19)$$

donde ν representa el índice correspondiente a la banda de energía, \mathbf{k} representa el vector de onda en la zona de Brillouin. Una solución de esta forma se sustituye en la ecuación de Schrödinger para una partícula libre

$$\hat{H}\psi_{\nu k} = E_{\nu k}\psi_{\nu k} \quad (3.20)$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \quad (3.21)$$

$$(3.22)$$

por lo que la ecuación de Schrödinger con las funciones de Bloch como soluciones y el Hamiltoniano propuesto toma la forma

$$\begin{aligned} \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(r) \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r) &= E_{\nu k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r)) - i \frac{\hbar^2 \mathbf{k}}{2m} \nabla (e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r)) + V(r) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r) &= E_{\nu k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} U_{\nu k}(r) \\ \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \hat{p}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(r) \right] U_{\nu k} &= E_{\nu k} U_{\nu k} \end{aligned}$$

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k} \cdot \hat{p}}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(r) \right] |\nu k\rangle = E_{\nu k} |\nu k\rangle \quad (3.23)$$

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, consiste en expandir la solución general lejos del borde de la banda $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$, cuyas soluciones son conocidas.

En muchos semiconductores para la espintrónica, como el GaAs, el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción ocurren en el punto Γ^1 , donde $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Se expande alrededor de este punto la estructura de bandas de el semiconductor y se toma como base ortonormal el conjunto $\{|\nu k\rangle\}$, para incluir el grado de libertad de espín, se toma el producto tensorial entre el conjunto de estados representados por la función de onda y el conjunto de estados de espín

$$|\nu 0 \sigma\rangle = |\nu 0\rangle \otimes |\sigma\rangle \quad (3.24)$$

se usa la notación $|\nu 0 \sigma\rangle = |\nu \sigma\rangle$ de esta forma la solución general de la ecuación 3.23 es

¹Este símbolo representa el centro de la zona de Brillouin

$$|\nu k\rangle = \sum_{\nu'} \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} c_{\nu\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) |\nu'\sigma'\rangle \quad (3.25)$$

sustituyendo en la ecuación 3.23 y multiplicando por $\langle \nu''\sigma |$ se obtiene

$$\sum_{\nu'} \left\{ \left[E(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu''\nu} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{\nu''\nu'} \right\} c_{\nu\nu'\sigma}(\mathbf{k}) = E_{\nu\sigma}(\mathbf{k}) c_{\nu\nu''\sigma}(\mathbf{k}) \quad (3.26)$$

se desprecia la interacción con el espín en la mayoría de los casos por lo que $\mathbf{p}_{\nu''\nu'} = \langle \nu'' | \mathbf{p} | \nu' \rangle$.

Mediante el método de perturbaciones se obtiene una solución satisfactoria únicamente para valores pequeños de \mathbf{k} , por lo que otra alternativa consiste en diagonalizar un espacio de Hilbert reducido. La solución obtenida mediante el método de perturbaciones es [27]

$$E_{\nu}(\mathbf{k}) = E_{\nu}(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\nu}^*}, \quad (3.27)$$

$$\frac{m_0}{m_{\nu}^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\nu'} \frac{P_{\nu\nu'}^2}{E_{\nu}(0) - E_{\nu'}(0)} \quad (3.28)$$

3.3.2. Aproximación de la función envolvente

Se considera la generalización de la aproximación discutida en la sección anterior cuando existe la presencia de campos eléctricos y magnéticos que varían lentamente en la escala de la constante de red. A partir de la ecuación de Schrödinger

$$\left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + V_0(r) + V(r) + \frac{g_0 \mu_B}{2} \sigma \cdot \mathbf{B} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \mathbf{P} \cdot (\sigma \times \nabla V_0) \right] \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} \Psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (3.29)$$

El primer término contiene la energía cinética del electrón en la presencia de los campos donde $\mathbf{P} = \mathbf{p} + e\mathbf{A}(r)$, $V_0(r)$ constituye el potencial periódico del cristal, $V(r)$ cualquier otro potencial existente por ejemplo el potencial dependiente de la posición de los límites de las bandas en una heteroestructura o el potencial de campos externos, el cuarto término incluye la interacción que da origen al efecto Zeeman y el quinto es la interacción espín órbita.

Se usa como base, de la misma manera que en la sección anterior, el conjunto $\{|\nu\sigma\rangle\}$, sin embargo es más conveniente usar como base un conjunto diagonal por lo tanto se usará el conjunto compuesto por los vectores de estado $\{|m\rangle\}$.

$$u_m = |m\rangle = \sum_{\nu=S,X,Y,Z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m\nu\sigma} |\nu\sigma\rangle. \quad (3.30)$$

donde S,X,Y,Z representan los distintos orbitales y sus proyecciones corresponden a los orbitales de enlace y antienlace; se separa en dos subconjuntos los estados correspondientes a los estados S y a los estados P $\{|m\rangle_s\}$ y $\{|m\rangle_p\}$ expresados de la siguiente forma

$$|m\rangle_s = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{ms\sigma} |S\sigma\rangle \quad |m\rangle_p = \sum_{\nu=X,Y,Z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m\nu\sigma} |\nu\sigma\rangle \quad (3.31)$$

y los coeficientes cumplen con la relación

$$\sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m's\sigma}^* h_{ms\sigma} = \delta_{mm'}; \quad \sum_{\nu=X,Y,Z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m'\nu\sigma}^* h_{m\nu\sigma} = \delta_{mm'} \quad (3.32)$$

sustituyendo la expresión para P en la ecuación 3.29 y con

$$|n\mathbf{k}\rangle = \sum_m f_{nm}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) |m\rangle \quad (3.33)$$

siendo f_{nm} la función envolvente

$$\mathbf{P}^2 f_{nm} |m\rangle = \mathbf{p}^2 f_{nm} |m\rangle + 2(\mathbf{p} f_{nm}) \cdot (\mathbf{p} |m\rangle) + f_{nm} (\mathbf{p}^2 |m\rangle) + 2e f_{nm} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{p} |m\rangle) \quad (3.34)$$

$$\mathbf{P} \cdot (\sigma \times \nabla V_0) f_{nm} |m\rangle = \mathbf{P} \cdot (\sigma \times \nabla V_0) f_{nm} |m\rangle = + f_{nm} \mathbf{P} \cdot (\sigma \times \nabla V_0) |m\rangle \quad (3.35)$$

$$(\sigma \cdot B) f_{nm} |m\rangle = f_{nm} B \cdot (\sigma |m\rangle) \quad (3.36)$$

multiplicando por $\langle m'0|$ y sustituyendo las expresiones anteriores en 3.29

$$\sum_m \left\{ \left[\frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + V(r) \right] \delta_{m'm} + \frac{\mathbf{P}}{m_0} \cdot \mathbf{p}_{m'm} + \Delta_{m'm} + E_{m'm}^{(0)} + \frac{g_0 \mu_B}{2} (\mathbf{S}_{m'm} \cdot \mathbf{B}) \right\} f_{nm} = E_{n\mathbf{k}} f_{nm'}, \quad (3.37)$$

$$\mathbf{p}_{m'm} = \left\langle m' \left| \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\sigma \times \nabla V_0) \right| m \right\rangle \quad (3.38)$$

$$\Delta_{m'm} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle m' | \mathbf{p} \cdot (\sigma \times \nabla V_0) | m \rangle, \quad (3.39)$$

$$\mathbf{S}_{m'm} = \langle m' | \sigma | m \rangle \quad (3.40)$$

$$E_{m'm}^{(0)} = \langle m' | H_0 | m \rangle \quad (3.41)$$

H_0 es el Hamiltoniano que aparece en la ecuación 3.23 se desprecia el término $\left\langle m' \left| \frac{\hbar}{4m_0c^2} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0) \right| m \right\rangle$.

El elemento de matriz $E_{m'm}^{(0)}$ se calcula para los estados S y P de utilizando los estados propuestos en 3.30 en la expresión para el valor esperado de la energía y tomando en cuenta que $|\nu\sigma\rangle$ son eigenestados de H_0 con energía $E_\nu(0)$ obteniendo

$$E_{m'm}^{(0)} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m's\sigma}^* h_{ms\sigma} E_s(0) = E_s(0) \delta_{m'm} \quad (3.42)$$

$$E_{m'm}^{(0)} = \sum_{\nu=X,Y,Z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} h_{m'\nu\sigma}^* h_{m\nu\sigma} E_\nu(0) = E_P(0) \delta_{m'm} \quad (3.43)$$

con $E_P(0) = E_X(0) = E_Y(0) = E_Z(0)$ en el punto Γ con lo que sustituyendo las expresiones anteriores en 3.29 se obtiene

$$\sum_m \left\{ \left[E_m^{(0)} + \frac{\mathbf{P}^2}{2m_0} + V(r) \right] \delta_{m'm} + \frac{\mathbf{P}}{m_0} \cdot \mathbf{p}_{m'm} + \Delta_{m'm} + \frac{g_0 \mu_B}{2} (\mathbf{S}_{m'm} \cdot \mathbf{B}) \right\} f_{nm} = E_{n\mathbf{k}} f_{nm} \quad (3.44)$$

La interacción espín órbita es considerable solamente cerca de una red atómica donde ∇V_0 es apreciable y el potencial del cristal V_0 . Se puede escribir el Hamiltoniano para la interacción espín órbita como

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV_0}{dr} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \quad (3.45)$$

en este caso $\mathbf{L} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$. En este caso el Hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{H}_{SO} = \lambda \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.46)$$

para expresar esta cantidad se usa el momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ ya que $\mathbf{J}^2 = \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ de aquí se obtiene que

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\lambda}{2} (\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 + \mathbf{S}^2) \quad (3.47)$$

expresado de esta forma el Hamiltoniano se vuelve diagonal y el valor esperado del operador contiene en la diagonal el valor esperado de los operadores de espín, momento angular total y momento angular orbital

$$\langle H_{SO} \rangle = \frac{\lambda \hbar^2}{2} [j(j+1) - s(s+1) - l(l+1)] \quad (3.48)$$

Se pueden hallar las eigenfunciones de (\mathbf{J}^2, J_z) de la siguiente manera

$$|l s j m_j\rangle = \sum_{m_s=-s} (l s m_j - m_s m_s | j m_j) |l m_j - m_s\rangle \otimes |m_s\rangle \quad (3.49)$$

donde $|lm_j - m_s\rangle$ son los eigenestados de (\mathbf{L}^2, L_z) y $(lsm_j - m_s m_s |jm_j\rangle)$ son los coeficientes de Clebsch- Gordan. Cuando se trata de partículas que tienen espín $s = \frac{1}{2}$

$$\left|l \frac{1}{2} j m_j\right\rangle = \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} (l \frac{1}{2} m_j - m_s m_s |m_j\rangle) |lm_j - m_s j m_j\rangle \quad (3.50)$$

Los coeficientes de Clebsch Gordan pueden ser calculados para $j = l \pm \frac{1}{2}$ y $m_s = \pm \frac{1}{2}$ de las siguientes relaciones

$$\left(l m_j \mp \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} |l \pm \frac{1}{2} m_j\right) = \sqrt{\frac{l + m_j + 1/2}{2l + 1}} \quad (3.51)$$

$$\pm (l \frac{1}{2} m_j \pm \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} |l \pm \frac{1}{2} m_j) = \sqrt{\frac{l - m_j + 1/2}{2l + 1}} \quad (3.52)$$

Estos coeficientes son un conjunto de números que aparecen cuando se acoplan momentos angulares en mecánica cuántica.

Considerando un modelo de 8 bandas para el estado s ($l = 0$) y para el estado p ($l = 1$), es suficiente para determinar los elementos de la base especificar la banda y los números cuánticos j y m_j ; por lo que se suelen escribir los eigenestados $|l s j m_j\rangle$ como $|j m_j\rangle$; teniendo en cuenta que los estados s y p se escriben de la siguiente forma

$$|S\rangle = \phi_{0,0}; \quad |X\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_{1,-1} - \phi_{1,1}); \quad |Y\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}}(\phi_{1,-1} + \phi_{1,1}); \quad |Z\rangle = \phi_{1,0},$$

$$\phi_{0,0} = |S\rangle; \quad \phi_{1,1} = -\frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle + i|Y\rangle); \quad \phi_{-1,1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle - i|Y\rangle); \quad \phi_{1,0} = |Z\rangle$$

con $\phi_{l,m_l} = |lm_l\rangle$.

Este modelo de 8 bandas es conocido como el modelo de Kane, con las siguientes consideraciones[28]

1. Se asume que la interacción $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de la banda de valencia con la banda de conducción más baja en Γ de tal forma que requiera de un tratamiento exacto.
2. En Γ la banda de valencia sin espín debe de tener simetría Γ_{15} y la banda de conducción sin espín debe de tener simetría Γ_1 , esta suposición ocurre en los materiales tipo III-V con simetría de esfalerita o blenda.
3. La interacción de las bandas de valencia y de conducción con las bandas restantes, que reciben el nombre de remotas, se asume pequeña, de tal modo que pueda ser analizada mediante la teoría de perturbaciones.

Los 8 vectores base del modelo de de Kane pueden ser obtenidas a partir de las ecuaciones 3.50 3.51 3.52, y para los estados S ($l = 0$) que es el doblete para la banda de conducción Γ_{6c} .

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \phi_{0,0} \otimes |\uparrow\rangle,$$

$$\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \phi_{0,0} \otimes |\downarrow\rangle,$$

que corresponde a las bandas de conducción más bajas. Para los estados P ($l = 1$) que consiste del cuadruplete Γ_{8v}

$$\left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle = \phi_{1,1} \otimes |\uparrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \phi_{1,0} \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \phi_{1,1} \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \phi_{1,-1} \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \phi_{1,0} \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\left| \frac{3}{2} - \frac{3}{2} \right\rangle = \phi_{1,-1} \otimes |\downarrow\rangle,$$

y el doblete Γ_{7v}

$$\left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} \phi_{1,0} \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} \phi_{1,1} \otimes |\downarrow\rangle$$

$$\left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} \phi_{1,-1} \otimes |\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} \phi_{1,0}$$

En ausencia de la interacción espín órbita el cuadruplete Γ_{8v} describe los huecos pesados y ligeros; los huecos pesados son bandas con una masa efectiva muy grande mucho mayor que la de los ligeros. El doblete Γ_{7v} corresponde a estados degenerados en el punto Γ . Sin embargo cuando los efectos de la interacción son considerados $\langle \hat{H}_{SO} \rangle_{\Gamma_{8v}} = \hbar^2 \frac{\lambda}{2}$ y $\langle \hat{H}_{SO} \rangle_{\Gamma_{7v}} = -\hbar^2 \frac{\lambda}{2}$. Esto da origen a la división espín órbita, que ocurre cuando todos los niveles de energía excepto los niveles S dan origen a dobletes y los dos posibles estados tienen distintas energías de enlace; se define el parámetro fenomenológico Δ_0 del modelo de Kane a continuación

$$\Delta_0 = \langle \hat{H}_{SO} \rangle_{\Gamma_{8v}} - \langle \hat{H}_{SO} \rangle_{\Gamma_{7v}} = 3\hbar^2 \frac{\lambda}{2} \quad (3.53)$$

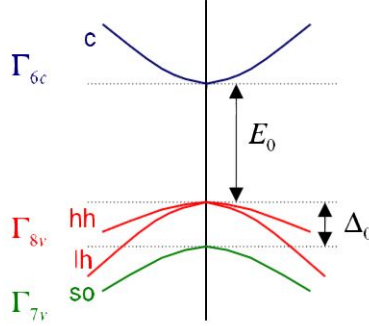


Figura 3.4: Esquema de la estructura de bandas de un semiconductor III-V dentro del modelo de Kane (c) indica la banda de conducción, (hh) indica los huecos pesados, (lh) huecos ligeros y (so) las bandas separadas debido al espín.

Banda	$ m\rangle$	Funciones Base
Γ_{6c}	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$ S \uparrow\rangle$
	$ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$ S \downarrow\rangle$
Γ_{8v}	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow\rangle$
	$ \frac{3}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow\rangle$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$
Γ_{7v}	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow\rangle$
	$ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY) \uparrow\rangle$

Cuadro 3.1 Funciones base del modelo de Kane

Usando como base las funciones del cuadro 3.1 la ecuación 3.44 toma la forma

$$\hat{H}f = Ef \quad (3.54)$$

donde $f = (f_{n1}, f_{n2}, \dots, f_{n8})^T$ y

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} H_c & H_{cv} \\ H_{vc} & H_v \end{bmatrix}$$

Tomando el 0 de la energía en el fondo de la banda de conducción, la matriz que describe esta banda (Γ_{6c}) y valencia (Γ_{8c} y Γ_{7v}) se puede escribir

$$H_c = \begin{bmatrix} \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(r) + \frac{g_0\mu_B}{2} B_z & \frac{g_0\mu_B}{2} B_- \\ \frac{g_0\mu_B}{2} B_+ & \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + V(r) - \frac{g_0\mu_B}{2} B_z \end{bmatrix}$$

$$H_v = [V(r) - E_0] \mathcal{I}_{6 \times 6} + g_0\mu_B \begin{bmatrix} \frac{1}{2}B_z & \frac{1}{2\sqrt{3}}B_- & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}}B_- & 0 \\ \frac{1}{2\sqrt{3}}B_+ & \frac{1}{6}B_z & \frac{1}{3}B_- & 0 & -\frac{\sqrt{2}}{3}B_z & \frac{1}{6}B_- \\ 0 & \frac{1}{3}B_+ & -\frac{1}{6}B_z & \frac{1}{2\sqrt{3}}B_- & -\frac{\sqrt{2}}{6}B_+ & -\frac{\sqrt{2}}{3}B_z \\ 0 & 0 & \frac{1}{2\sqrt{3}}B_+ & -\frac{1}{2}B_z & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}}B_+ & -\frac{\sqrt{2}}{3}B_z & -\frac{\sqrt{2}}{6}B_- & 0 & -\frac{\Delta_0}{g_0\mu_B} - \frac{1}{6}B_z & -\frac{1}{6}B_- \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{6}}B_+ & -\frac{\sqrt{2}}{3}B_z & -\frac{1}{\sqrt{6}}B_- & -\frac{1}{6}B_+ & -\frac{\Delta_0}{g_0\mu_B} + \frac{1}{6}B_z \end{bmatrix}$$

$$H_{cv} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z & \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- \\ 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z & \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z \end{bmatrix}$$

$$H_{vc} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\sqrt{2}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z & -\frac{1}{\sqrt{6}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- \\ \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_- \\ -\frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}\frac{P_0}{\hbar}\mathbf{P}_z \end{bmatrix}$$

usando la notación

$$B_{\pm} = B_x \pm iB_y \quad ; \quad P_{\pm} = P_x \pm iP_y$$

Para simplificar el problema de la obtención de la función envolvente correspondientes a los eigenestados de las bandas Γ_{6c} , Γ_{8v} y Γ_{7v} , dados por los conjuntos (f_{n1}, f_{n2}) , $(f_{n3}, f_{n4}, f_{n5}, f_{n6})$ y (f_{n7}, f_{n8}) respectivamente; el análisis se enfoca en los electrones de conducción, por lo que se obtienen las funciones envolventes f_{n1} y f_{n2} ; para esto se introduce la siguiente matriz.

$$U = \begin{bmatrix} 1_{2 \times 2} & -(H_c - E)^{-1}H_{cv} \\ -(H_v - E)H_{vc} & 1_{6 \times 6} \end{bmatrix}$$

Se puede escribir la identidad de la siguiente forma $\mathcal{I}_{8 \times 8} = UU^{-1}$ y sustituyendo esta expresión en 3.54

$$(H - E)UU^{-1}f = 0,$$

desarrollando el álgebra correspondiente se obtiene

$$(\tilde{H} - E)\tilde{f} = 0$$

$$\tilde{f} = U^{-1}f$$

$$\tilde{H} = E + (H - E)U = \begin{bmatrix} \tilde{H}_c & 0 \\ 0 & \tilde{H}_v \end{bmatrix},$$

$$\tilde{H}_c = H_c - H_{cv}(H_v - E)^{-1}H_{vc}$$

$$\tilde{H}_v = H_v - H_{vc}(H_c - E)^{-1}H_{cv}$$

Considerando la solución para la banda de conducción el sistema de ecuaciones diferenciales tiene la forma

$$\tilde{H}_c f_c = E f_c$$

que contiene solo las funciones envolventes $f_c = (f_{n1}, f_{n2})^T$; \tilde{H}_c requiere de la inversión de $(H_v - E)$, en la presencia de campo magnético puede volverse complicado hallar la inversa de dicha expresión, por lo que se descompone como $(H_v - E) = A - D$ donde A es una matriz no singular diagonal, con el fin de hallar la inversa de manera aproximada $H_v - E = A(\mathcal{I}_{6 \times 6} - A^{-1}D)$ por lo que la inversa es

$$(H_v - E)^{-1} = (\mathcal{I}_{6 \times 6} - A^{-1}D)^{-1}A^{-1} = [I_{6 \times 6} + A^{-1}D + (A^{-1}D)^2 + (A^{-1}D)^3 + \dots]A^{-1} \quad (3.55)$$

En este caso una buena elección para A es $A = \text{diag}[V(r) - E_0 - E, V(r) - E_0 - E, V(r) - E_0 - E, V(r) - E_0 - E, V(r) - E_0 - E - \Delta_0, V(r) - E_0 - E - \Delta_0]$.

3.4. Interacción espín órbita de Bychkov-Rashba y Dresselhaus.

En el vacío la interacción espín órbita está dada por

$$\hat{H}_{SO}(r) = \frac{e\hbar^2}{4m_0^2c^2} \sigma \cdot (\nabla V(r) \times \mathbf{k}) \quad (3.56)$$

que es pequeño para el caso no relativista, es decir, cuando $\hbar k \ll m_0 c$. En semiconductores donde el gap E_G y el parámetro Δ son de una magnitud comparable $E_G \sim \Delta \sim 1 \text{ eV}$, la interacción es aumentada en un factor de $\frac{m_0 c^2}{E_G}$. Los Hamiltonianos típicos para la interacción en cristales tridimensionales son los términos de Rashba (H_R) y Dresselhaus (H_D).[29]

El término de Rashba es típico de cristales hexagonales A_2B_6 es

$$H_R = \alpha(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \hat{z} \quad (3.57)$$

al ser lineal en \mathbf{k} este término puede ser tratado mediante la aproximación $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y α es el acoplamiento de Rashba, sin embargo se le dará un tratamiento más simple.

El efecto Rashba, asociado a este Hamiltoniano es un resultado directo de la ruptura de la simetría de inversión en la dirección perpendicular a un plano bidimensional²; para esto se considera la aparición de un término en el Hamiltoniano debida a la presencia de un campo eléctrico de la siguiente forma

$$\hat{H}_E = -E_0 z \quad (3.58)$$

debido a efectos relativistas un electrón moviéndose con velocidad v en el campo eléctrico experimentará un campo magnético \mathbf{B}

$$\mathbf{B} = \frac{(\mathbf{v} \times \mathbf{E})}{c^2} \quad (3.59)$$

el cual se acopla con el espín del electrón con lo que el Hamiltoniano toma la forma

$$\hat{H}_{SO} = \frac{g\mu_B}{2c^2} (\mathbf{v} \times \mathbf{E}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.60)$$

haciendo $\alpha = \frac{g\mu_B E_0}{2m_0 c^2}$, el Hamiltoniano que se obtiene es el que se muestra en la ecuación 3.57.

Con la aparición del término de Rashba en la ecuación de Schrödinger

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \mathbf{k}^2 + \alpha(\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \hat{z} \quad (3.61)$$

los eigenvalores de la energía son $E^\pm(k) = \frac{\hbar^2 k}{2m^*} \pm \alpha k$. [30]

Este Hamiltoniano se obtiene promediando el campo eléctrico total, por ejemplo a lo largo de una sub banda de un pozo de potencial. De acuerdo con el teorema de Ehrenfest mencionado con anterioridad, el promedio de la fuerza que actúa sobre un estado ligado es 0, debido a esto el parámetro de Rashba debe ser muy pequeño, por lo que para la interacción de Rashba en la banda de conducción α se relaciona al promedio del campo eléctrico en la banda de valencia sobre la banda de conducción, el potencial eléctrico en estas bandas es

$$V_v(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{in} + E_v(\mathbf{r}), \quad V_c(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + V_{in}(\mathbf{r}) + E_c(\mathbf{r}) \quad (3.62)$$

²Pequeñas variaciones en las condiciones iniciales determinan el estado final del sistema.

$E_v(\mathbf{r})$ y $E_c(\mathbf{r})$ son los bordes de las bandas de conducción y de valencia y $V_{ext}(\mathbf{r})$, $\mathbf{V}_{in}(\mathbf{r})$ son los potenciales electrostáticos externos e internos en las bandas de conducción y valencia. Ahora se dice que $V_{Coul}(\mathbf{r}) = V_{ext}(\mathbf{r}) + \mathbf{V}_{in}(\mathbf{r})$. De acuerdo con el teorema de Ehrenfest la fuerza neta es 0 por lo que $\langle \nabla V_{Coul} \rangle = -\langle \nabla E_c(\mathbf{r}) \rangle$. Si la razón de la banda de valencia y la banda de conducción es r_{vc} entonces

$$\langle \nabla V_v(\mathbf{r}) \rangle = \langle \nabla (V_{Coul}(\mathbf{r}) + r_{vc} E_c(\mathbf{r})) \rangle = (1 - r_{vc}) \langle \nabla V_{Coul}(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.63)$$

por lo tanto la interacción de Rashba es proporcional al promedio de la suma del campo eléctrico interno y externo.[31]

En el caso de la interacción de Dresselhaus es típica de cristales cúbicos del tipo A_3B_5 este término puede escribirse como

$$\hat{H}_D^{3D} = \beta_{3D}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}) \quad (3.64)$$

aparece en sistemas que carecen de simetría bajo la reflexión alrededor de un plano que contiene al menos un sitio de red en el cristal subyacente, con $\mathbf{K}_z = k_z(k_x^2 - k_y^2)$ y los otros componentes se obtienen por permutaciones cíclicas de x y y .

Este término puede obtenerse aplicando la teoría desarrollada en la sección anterior añadiendo la banda Γ_{7c} .

El término de Rashba es fundamental en la operación de dispositivos espintrónicos, como es el caso del transistor de espín Datta-Das; donde el canal de transporte de espines es un gas de electrones bidimensional, en un transistor convencional los efectos del campo eléctrico controlan la conductancia, de la misma forma el campo eléctrico controla la fuerza de la interacción de Rashba. Por lo tanto la aparición de estos términos y su manejo es de gran importancia para el control de dispositivos basados en la electrónica del espín ya que permite el entendimiento sobre como se comportan estos dispositivos.

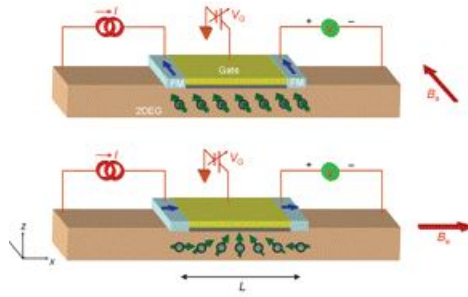


Figura 3.5: Comportamiento del transistor de Datta Das

Capítulo 4

Dinámica de la magnetización.

Debido a que los dispositivos espintrónicos pueden ser controlados mediante campos magnéticos externos, en este capítulo se realiza un análisis de la teoría y conceptos fundamentales en electromagnetismo, con la finalidad de encontrar una descripción adecuada para el comportamiento de los materiales ferromagnéticos mediante la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert.

4.1. Conceptos básicos en magnetismo

El término magnetismo se origina en la antigua Grecia, ya que fue observado por primera vez en la ciudad de Magnesia, por la existencia de algunas piedras que eran capaces de atraer el hierro, que ahora se les llama imanes naturales. A partir de esta época el estudio del magnetismo se ve relegado a conocer las propiedades de imanes, hasta que en 1820 Oersted descubrió que un campo magnético se podía originar a partir de la circulación de una corriente, con lo que se establece que existe una relación entre la electricidad y el magnetismo.

4.1.1. Momento dipolar magnético

Una vez que se logra entender que la electricidad y magnetismo son fenómenos ligados, se construye una teoría que los explica y surgen conceptos como el momento magnético $\vec{\mu}$, que puede ser entendido a partir de una espira donde circula una corriente, considerando una sección infinitesimalmente pequeña de área $d\vec{A}$, el momento magnético correspondiente se define como $d\vec{\mu} = I d\vec{A}$. Integrando sobre el área de la espira se puede calcular el momento asociado a un dipolo de forma equivalente en una espira finita de la siguiente manera[32]

$$\vec{\mu} = \int I d\vec{A} \quad (4.1)$$

4.1.2. Magnetización

Es llamada también polarización magnética, es un campo vectorial que expresa la densidad de momentos dipolares magnéticos en un material magnético, el origen de los momentos dipolares responsable de la magnetización puede ser a partir de corrientes microscópicas, como resultado del movimiento de los electrones en un átomo. De aquí que la magnetización se define como el momento magnético total por unidad de volumen, en vacío no ocurre magnetización

$$\vec{m} = \frac{N}{V} \vec{\mu} \quad (4.2)$$

donde N es el número de momentos dipolares magnéticos en el material, V es el volumen.[33]

4.1.3. Inducción magnética

La respuesta de un material ante la aplicación de un campo magnético externo \vec{H} , es llamada inducción magnética o densidad de flujo magnético \vec{B} , la forma en que estas variables están relacionadas depende de la naturaleza del material, de la siguiente forma

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} \quad (4.3)$$

donde μ_0 es la permeabilidad magnética del vacío. La permeabilidad magnética es una cantidad que mide la capacidad de una sustancia para ser atravesada por campos magnéticos, en el caso del vacío en unidades del SI el valor es $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{NA}^{-2}$.

Dentro de un material magnético \vec{B} y \vec{H} no coinciden en dirección debido a la aparición de la magnetización dicha relación está dada por

$$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{m})$$

Cuando un campo magnético se genera debido a la circulación de una corriente estacionaria la inducción magnética en la medida desde la posición \vec{r} se calcula por medio de la ley de Biot-Savart

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \int_C \frac{I d\vec{l} \times \hat{r}}{|\vec{r}|^2} \quad (4.4)$$

donde $d\vec{l}$ representa la trayectoria por la que circula la corriente I .

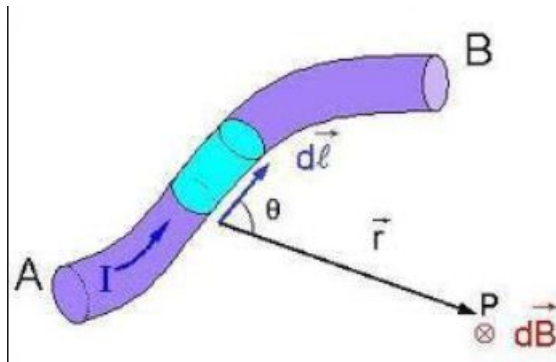


Figura 4.1: Inducción magnética debido a una corriente.

4.1.4. Permeabilidad magnética y susceptibilidad

La susceptibilidad magnética se representa por la letra griega χ , y es una constante que está relacionada con el grado de magnetización de un material en respuesta a un campo magnético aplicado, dicha cantidad es adimensional y se relaciona con la magnetización de la siguiente forma

$$\vec{m} = \chi \vec{H}$$

de esto aparece una relación entre la susceptibilidad y la densidad de flujo magnético

$$\vec{B} = \mu_0(1 + \chi) \vec{H}$$

a la cantidad $1 + \chi$ se le conoce como μ_r , o permeabilidad relativa, que es el grado de desmagnetización que un material obtiene en respuesta a la aplicación de un campo magnético. Cabe mencionar que dependiendo de la naturaleza del material, en general este valor no es una constante, sino un tensor, por lo que en general la magnetización y el campo magnético no son paralelos, en caso de que lo sean, el material es llamado material lineal.

4.2. Naturaleza magnética de los materiales

Dadas las propiedades magnéticas de un material estos pueden ser clasificados de la siguiente manera:

4.2.1. Diamagnéticos

En estos materiales un campo magnético externo provoca que los momentos dipolares se orienten en dirección antiparalela con respecto al campo externo, por lo que la susceptibilidad magnética es negativa.

4.2.2. Paramagnetismo

Es la tendencia de los momentos dipolares libres a alinearse de forma paralela al campo magnético, la susceptibilidad de materiales paramagnéticos se caracteriza por $\chi > 0$. Una condición crucial para la aparición del fenómeno es la existencia de momentos dipolares permanentes, la orientación de los momentos puede ser afectada por fluctuaciones térmicas.

En un material paramagnético se establece que la magnetización del material es directamente proporcional al campo magnético aplicado e inversamente proporcional a la temperatura.

$$\vec{m} = C \frac{\vec{B}}{T}$$

donde \vec{m} es la magnetización, \vec{B} es la inducción magnética T es la temperatura absoluta C es la constante de Curie específica del material.

Ferromagnetismo

Es un fenómeno físico en el que se produce ordenamiento de todos los momentos magnéticos, en la misma dirección y sentido, con lo cual se forman imanes permanentes.

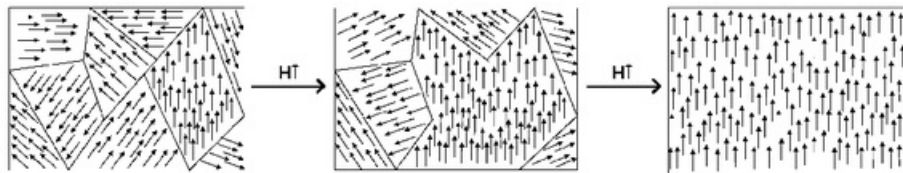


Figura 4.2: Orientación de los momentos en un material ferromagnético.

Se llama temperatura de Curie, o temperatura crítica a la temperatura en la que un material ferromagnético se comporta como un material paramagnético.

Antiferromagnetismo

Es el ordenamiento de todos los momentos magnéticos de una muestra durante la aplicación de un campo magnético, en la misma dirección. Al cesar el campo magnético externo la mitad de los momentos magnéticos de la muestra cambian en sentido inverso.

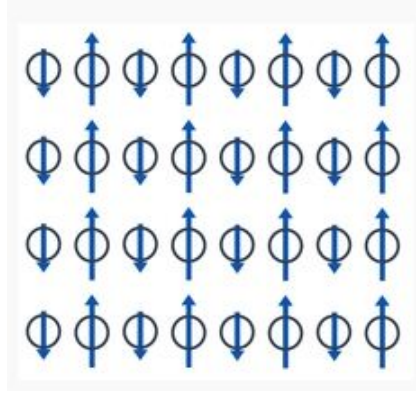


Figura 4.3: Esquema del fenómeno del antiferromagnetismo

4.3. Ecuaciones de movimiento de la magnetización

En la sección anterior la magnetización se describe como un fenómeno macroscópico, como el momento magnético total por unidad de volumen, sin embargo este fenómeno resulta de un número muy grande de interacciones microscópicas dentro de un material.

En el caso de un material ferromagnético que es expuesto a un campo magnético externo, el comportamiento dinámico de la magnetización es dominado por la precesión colectiva del ordenamiento de el material completo. Para la comprensión y análisis de la dinámica de este fenómeno se requiere de algunos conceptos previos.

4.3.1. Energía de Zeeman.

Cuando una partícula se encuentra en un campo electromagnético estacionario, la función de onda es

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{\frac{-i\epsilon t}{\hbar}} \quad (4.5)$$

sustituyendo en la ecuación de Schrödinger con el Hamiltoniano

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right]^2 + q\phi \quad (4.6)$$

por lo que $\psi(\mathbf{r})$ debe satisfacer

$$\frac{1}{2m} \left[\frac{\hbar}{i} \nabla - q\mathbf{A} \right]^2 \psi + q\phi\psi = \epsilon\psi \quad (4.7)$$

obteniendo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{\hbar}{i}\frac{q}{2m}[\nabla\cdot(\mathbf{A}\psi) + \mathbf{A}\cdot\nabla\psi] + \left[\frac{q^2}{2m}A^2 + q\phi\right]\psi = \varepsilon\psi \quad (4.8)$$

considerando que en la norma de Coulomb $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ por lo que

$$\nabla\cdot(\mathbf{A}\psi) = (\nabla\cdot\mathbf{A})\psi + \mathbf{A}\cdot\nabla\psi = \mathbf{A}\cdot\nabla\psi$$

Además para un campo magnético uniforme

$$\nabla\times(\mathbf{B}\times\mathbf{r}) = \mathbf{B}\nabla\cdot\mathbf{r} - \mathbf{r}\nabla\cdot\mathbf{B} + (\mathbf{r}\cdot\nabla)\mathbf{B} - (\mathbf{B}\cdot\nabla)\mathbf{r} \quad (4.9)$$

$$= (\nabla\cdot\mathbf{r})\mathbf{B} - (\mathbf{B}\cdot\nabla)\mathbf{r} \quad (4.10)$$

$$= [3\mathbf{B} - \mathbf{B}] \quad (4.11)$$

$$= 2\mathbf{B} \quad (4.12)$$

por lo tanto

$$\nabla\times\mathbf{A} = \frac{1}{2}\nabla\times(\mathbf{B}\times\mathbf{r})$$

ahora se puede simplificar la ecuación 4.8 usando las expresiones obtenidas

$$-\frac{\hbar}{i}\frac{q}{m}\mathbf{A}\cdot\nabla\psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{q}{2m}(\mathbf{B}\times\mathbf{r})\cdot\nabla\psi \quad (4.13)$$

$$= -\frac{q}{2m}\mathbf{B}\cdot\left[\mathbf{r}\times\left(\frac{\hbar}{i}\nabla\right)\right]\psi \quad (4.14)$$

$$= -\frac{q}{2m}\mathbf{B}\cdot(\mathbf{r}\times\mathbf{p})\psi \quad (4.15)$$

$$= -\frac{q}{2m}\mathbf{B}\cdot\mathbf{L} \quad (4.16)$$

$$= \mu\cdot\mathbf{B} \quad (4.17)$$

de acuerdo con esto se define la energía de Zeeman[34]

$$\varepsilon_z = -\mu\cdot\mathbf{B}.$$

4.3.2. Precesión de Larmor

Se analiza el caso de un electrón en un campo magnético uniforme en la dirección \hat{z} . Como se analizó en la sección 3.1, en la presencia de espín y de momento angular orbital, el momento angular total es $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, si se desprecia el movimiento orbital, el Hamiltoniano que representa la interacción del espín y el campo magnético es

$$\hat{H}_s = -\frac{gq}{2m}\mathbf{S}\cdot\mathbf{B}$$

donde g es el factor de Landé, que representa la razón del momento magnético de un átomo, con el magnetón de Bohr, por lo que en términos de las matrices de Pauli, el Hamiltoniano puede ser escrito como

$$\hat{H}_s = \frac{1}{2}\hbar\omega_0\sigma_z$$

ω_0 se define como la frecuencia de precesión de Larmor y se expresa como

$$\omega_0 = -\frac{gqB_0}{2m} = \frac{g\mu_B}{\hbar}$$

la solución general de la ecuación de Schrödinger para este Hamiltoniano es

$$\Psi(t) = c_1e^{-i\omega_0t/2}\chi_{\uparrow} + c_2e^{i\omega_0t/2}\chi_{\downarrow}$$

$\chi_{\uparrow\downarrow}$ corresponden a los eigenestados del espín

$$\chi_{\uparrow} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \chi_{\downarrow} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}$$

si se considera el caso en el que $c_1 = \cos\left(\frac{\theta}{2}\right)$ y $c_2 = \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ y se obtiene el valor de las proyecciones del espín

$$\begin{aligned} \langle S_x \rangle &= \psi^\dagger S_x \psi \\ &= \left(\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\omega_0t}{2}}\chi_{\uparrow}^T + \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i\omega_0t}{2}}\chi_{\downarrow}^T \right) \left(\cos\frac{\theta}{2}e^{\frac{-i\omega_0t}{2}}\chi_{\uparrow}^T + \sin\frac{\theta}{2}e^{\frac{i\omega_0t}{2}}\chi_{\downarrow}^T \right) \frac{\hbar}{2}\sigma_x \end{aligned}$$

al realizar la multiplicación se obtiene

$$\langle S_x \rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\cos(\omega_0t)$$

y de manera análoga para las otras componentes

$$\langle S_y \rangle = \frac{\hbar}{2}\sin\theta\sin(\omega_0t)$$

$$\langle S_z \rangle = \frac{\hbar}{2}\cos\theta$$

lo cual representa que bajo estas condiciones el espín forma un ángulo θ con el eje \hat{z} y precesa alrededor de él con velocidad angular ω_0 , a este fenómeno se le conoce como precesión de Larmor.

4.3.3. Ondas de espines

Las excitaciones elementales de sistemas acoplados de espines son llamadas ondas de espines, estas ondas pueden ser cuantizadas y reciben el nombre de magnones.

En su estado base un ferromagneto tiene todos sus espines paralelos. Se considera un sistema de N espines en una línea o anillo, considerando interacción de primeros vecinos, la energía de dicha interacción es descrita por medio del Hamiltoniano de Heisenberg

$$U = 2J \sum_{p=1}^N \mathbf{S}_p \cdot \mathbf{S}_{p+1}$$

J es la integral de intercambio de energía.

Un magnón es una excitación colectiva de los espines de los electrones en una red cristalina. Los magnones transportan una cantidad fija de energía y momento de red.

Como se mencionó anteriormente las ondas de espín se encuentran cuantizadas, la energía de un modo de frecuencia ω_k con n_k magnones es

$$\epsilon_k = (n_k + \frac{1}{2})\hbar\omega_k$$

4.3.4. Ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert

A temperaturas debajo de la temperatura crítica, la magnetización de equilibrio de un ferromagnético de bulto, se satura para un valor específico de cada material M_s , es decir un valor para el cual el material no puede ser magnetizado. Se dice que un ferromagneto es un estado de simetría rota, los restauradores de esta simetría son los modos de Goldstone, los cuales son ondas de espines que causan una magnetización transversal. En ferromagnetos itinerantes existen también excitaciones longitudinales, los modos de Stoner. Sin embargo como una variación macroscópica en $T \ll T_C$ requiere de mucha energía libre, se hace especial enfoque en el movimiento transversal de la magnetización dependiente de la posición $\mathbf{m} = \mathbf{M}/M_S$ con magnitud fija $|\mathbf{M}| = M_s$. [35]

Tradicionalmente para el estudio de la magnetización en un medio ferromagnético, se usa la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert.

Considerando la dinámica del momento angular de espín de un electrón libre bajo la acción de un campo magnético eterno dependiente del tiempo con el término de Zeeman

$$\hat{H}_s = -\frac{g\mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B}(t), \quad \mathbf{B}(t) = \mu_0 \mathbf{H}(t),$$

De la ecuación de Schrödinger se obtiene el valor esperado del operador de espín

$$\frac{d}{dt} \langle \mathbf{S}(t) \rangle = \frac{g\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{S}(t) \rangle \times \mathbf{B}(t) \quad (4.18)$$

Ahora se toma en cuenta la relación entre el momento angular clásico de un electrón moviéndose y el momento dipolar magnético de una espira de corriente inmersa en un campo magnético uniforme $\mathcal{M}_e = \frac{e}{2m} \mathbf{L}$. Análogamente se puede definir la magnetización $\mathcal{M} = \frac{q\mu_B}{\hbar} \langle \mathbf{S} \rangle = \gamma \langle \mathbf{S} \rangle$, considerando la magnetización por unidad de volumen \mathbf{M} puede escribirse 4.18 como

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma_0 [\mathbf{M}(t) \times \mathbf{H}(t)]$$

donde $\gamma_0 = \mu_0 \mathbf{H}$, que es la ecuación de Landau-Lifshitz.

Experimentalmente se ha observado que las curvas de histéresis de sustancias ferromagnéticas, claramente muestran que más allá de ciertos valores críticos del campo magnético aplicado, el material se satura como se mencionó anteriormente, se vuelve uniforme y se alinea paralelamente con el campo magnético, para lo cual se añade el término de Gilbert, de tal modo que la ecuación de movimiento se escribe

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = -\gamma \left(\mathbf{M} \times \mathbf{H} - \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \frac{d\mathbf{M}}{dt} \right)$$

que es la llamada ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert, donde α es el término de amortiguamiento y es característica de cada material.

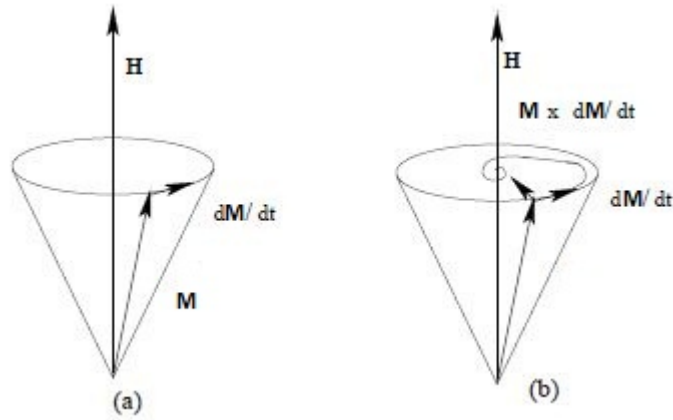


Figura 4.4: Evolución de una partícula con espín bajo la acción de un campo magnético a) sin amortiguamiento, b) con amortiguamiento de Gilbert.

Como se observa en la figura 4.4, mientras que la transferencia de momento angular, sobre un momento magnético debido a un campo magnético aplicado causa la precesión del momento alrededor del eje del campo, la rotación del momento en alineación con el campo ocurre a través de un proceso de amortiguamiento.

4.4. Ecuaciones de Bloch

Las ecuaciones de Bloch describen la interacción del vector de magnetización, estas ecuaciones son fenomenológicas y fueron introducidas por Feli Bloch en 1946.

$$\frac{dM_x}{dt} = \gamma(\mathbf{M}(t) \times \mathbf{B}(t))_x - \frac{M_x(t)}{T_2}$$

$$\frac{dM_y}{dt} = \gamma(\mathbf{M}(t) \times \mathbf{B}(t))_y - \frac{M_y(t)}{T_2}$$

$$\frac{dM_z}{dt} = \gamma(\mathbf{M}(t) \times \mathbf{B}(t))_z - \frac{M_z(t) - M_0}{T_1}$$

Donde T_1 es el tiempo de relajación y T_2 es el llamado tiempo de desfase el el primer término es la precesión de Larmor mencionada antes .

Usando las ecuaciones de Landau-Lifshitz-Gilbert junto con las ecuaciones de Bloch se tienen los elementos necesarios para la descripción del efecto espín Seebeck.

Capítulo 5

Efecto espín-Seebeck

En este capítulo se analiza el efecto espín Seebeck en una unión F/N, mediante el uso de una aproximación semiclásica, recurriendo a las ecuaciones de la magnetización mencionadas en el capítulo anterior. Se analiza el comportamiento de una corriente de espines producida por la acción de un campo magnético externo, se estudia la teoría de fluctuaciones y procesos de no equilibrio, con estos antecedentes, se resolverán estas ecuaciones.

5.1. Fluctuaciones térmicas

En mecánica estadística, las fluctuaciones térmicas son desviaciones aleatorias de un sistema de su estado de equilibrio. Las fluctuaciones se vuelven más frecuentes y más grandes cuando la temperatura aumenta.

En un sistema cerrado, sea x una cantidad física que describe un sistema o una parte de él, de ahora en adelante se considera que el valor medio \bar{x} se restó de x y se asume que $\bar{x} = 0$. [36]

La probabilidad de que una cantidad x tenga un valor en el intervalo entre x y $x + dx$ es proporcional a $e^{S(x)}$, donde $S(x)$ es la entropía vista como una función del valor exacto de x .

Con esta forma, la entropía tiene un máximo en $x = \bar{x} = 0$. Por lo que desarrollando $S(x)$ en series de Taylor se obtiene que

$$S(x) = S(0) - \frac{1}{2}\beta x^2$$

por lo tanto la distribución de probabilidad tiene la forma

$$w(x)dx = A e^{-\frac{1}{2}\beta x^2} dx$$

por la condición de normalización para una función de distribución, la constante A tiene el valor $A = \sqrt{\beta/2\pi}$.

Una distribución con estas características, es llamada distribución Gaussiana. Tiene un máximo cuando $x = 0$. La fluctuación media cuadrada de esta distribución es

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 w(x) dx = \frac{1}{\beta} \quad (5.1)$$

Esto se puede generalizar de una forma equivalente en el caso de funciones de más de una variable, considerando que la entropía depende de las cantidades x_1, \dots, x_n , con condiciones similares a las mencionadas anteriormente, se realiza una expansión de la entropía en serie de potencias

$$S - S_0 = -\frac{1}{2} \beta_{ik} x_i x_k$$

usando la convención de la suma para los índices repetidos. La distribución tiene la forma

$$w = A e^{-\frac{1}{2} \beta_{ik} x_i x_k}$$

la constante se determina mediante la condición de normalización, que en el caso de varias variables tiene la forma

$$\int w dx_1 \dots dx_n = 1$$

para efectuar esta integral se lleva a cabo la transformación lineal

$$x_i = a_{ik} x'_k$$

$$\beta_{ik} x_i x_k = x'_i x'_i = x'_i x'_k$$

la ecuación anterior con la condición

$$\beta_{ik} a_{il} a_{km} = \delta_{lm}$$

obteniendo los determinantes de estas matrices y llamando $\beta = |\beta_{ik}|$ y $a = |a_{ik}|$, la relación anterior se representa como $\beta a^2 = 1$. Con la transformación anterior, la integral de normalización se separa en un producto de n integrales idénticas, por lo que la forma de la distribución es

$$w = \frac{\sqrt{\beta}}{(2\pi)^{n/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \beta_{ik} x_i x_k\right)$$

5.1.1. Fluctuaciones en el tiempo

Se considera una cantidad física que describe un sistema cerrado en equilibrio termodinámico, o una parte de este sistema. Esta cantidad tiene pequeñas variaciones en el tiempo, y fluctúa alrededor de su valor medio.

Existe alguna correlación entre los valores de esta cantidad que depende del tiempo, (es decir $x(t)$) en distintos instantes; por lo que el valor de x en el instante t afecta la probabilidad de que esta cantidad tenga un valor en el instante t' , esta correlación se caracteriza por medio del producto $\langle x(t)x(t') \rangle$, este promedio se realiza sobre todos los posibles valores de la cantidad x en el periodo de tiempo transcurrido entre t y t' y tiene la forma

$$\phi(t' - t) = \langle x(t)x(t') \rangle$$

a esta expresión se le llama la función de correlación temporal, y también se puede escribir como

$$\phi(t) = \langle x(0)x(t) \rangle \quad (5.2)$$

además tiene la propiedad de

$$\phi(t) = \phi(-t).$$

Si la cantidad x al instante t tiene un valor grande comparado con la fluctuación media, por lo que el sistema no se encuentra en equilibrio, entonces se dice que el sistema se acercará al equilibrio termodinámico si x disminuye. Bajo estas consideraciones la razón de cambio de esta cantidad estará definida por el valor de x en ese instante, lo cual se expresa como $\dot{x} = \dot{x}(x)$. Si x es pequeña entonces su derivada temporal puede escribirse en series de potencias, y se mantiene únicamente el término lineal

$$\frac{dx}{dt} = -\lambda x$$

con λ una constante positiva; no se considera el término de orden cero, ya que la razón de cambio deber ser cero en equilibrio, esto es en $x = 0$. La constante $1/\lambda$ determina el tiempo de relajación es decir el tiempo que tarda el sistema en volver a su completo equilibrio.

Se define la cantidad $\xi_x(t)$ como el valor medio de x al instante $t > 0$, con la condición que tenga un valor dado en el instante $t = 0$, por lo que la función de correlación se escribe en términos de $\xi_x(t)$ de la siguiente manera

$$\phi(t) = \langle x\xi_x(t) \rangle.$$

Si el valor de ξ_x comparado con la fluctuación media, cumple con la condición

$$\frac{d\xi_x}{dt} = -\lambda\xi_x$$

con la condición inicial por definición de que $\xi_x(0) = x$ la solución de la ecuación es

$$\xi_x(t) = x e^{-\lambda t}$$

con lo que la función de correlación temporal para este caso es

$$\phi(t) = \langle x^2 \rangle e^{-\lambda t}$$

esta expresión es válida para $t > 0$ y debe ser una función par, por las propiedades que deben ser cumplidas la función de correlación, debe escribirse como

$$\phi(t) = \langle x^2 \rangle e^{-\lambda|t|} = \frac{1}{\beta} e^{-\lambda|t|}$$

5.1.2. Tratamiento espectral de fluctuaciones

En diversos problemas en los que una cantidad física fluctúa, puede usarse el método de resolución espectral, para esto se utiliza la fórmula de expansión de Fourier

$$x_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} x(t) e^{i\omega t} dt \quad (5.3)$$

$$x(t) = \int_{-\infty}^{\infty} x_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi} \quad (5.4)$$

sustituyendo estas expresiones en la definición de la función de correlación se obtiene

$$\begin{aligned} \phi(t' - t) &= \langle x(t') x(t) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \langle x_\omega x_{\omega'} \rangle e^{-i(\omega t + \omega' t')} \frac{d\omega d\omega'}{(2\pi)^2} \end{aligned}$$

como esta integral debe de ser función de $t - t'$ entonces el integrando debe contener una función $\delta(\omega + \omega')$

$$\langle x_\omega x_{\omega'} \rangle = 2\pi \langle x^2 \rangle_\omega \delta(\omega + \omega')$$

sustituyendo en la integral anterior se obtiene

$$\phi(t) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x^2 \rangle_\omega e^{-i\omega t} \frac{d\omega}{2\pi}$$

el caso particular $\phi(0)$ es

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x^2 \rangle_\omega \frac{d\omega}{2\pi} = \int_0^{\infty} 2 \langle x^2 \rangle_\omega \frac{d\omega}{2\pi}$$

a $(x^2)_\omega$ se le llama la densidad espectral de la fluctuación media cuadrada y se expresa en términos de la función de correlación

$$(x^2)_\omega = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(t) e^{i\omega t} dt.$$

Para una variable cuántica las expresiones 5.3, 5.4 deben relacionar un operador dependiente del tiempo $\hat{x}(t)$ y la densidad espectral se define como

$$\frac{1}{2} \langle \hat{x}_\omega \hat{x}_{\omega'} + \hat{x}_{\omega'} \hat{x}_\omega \rangle = 2\pi (x^2)_\omega \delta(\omega + \omega').$$

En el caso tratado en la sección 5.1.1 con el uso del método espectral se obtiene

$$(x^2)_\omega = \frac{1}{\beta} \left[\frac{1}{\lambda - i\omega} + \frac{1}{\lambda + i\omega} \right] = \frac{2\lambda}{\beta(\omega^2 + \lambda^2)}$$

Se recurre al método espectral con el objetivo de encontrar la solución de las ecuaciones involucradas, mencionadas anteriormente, usando la transformada de Fourier.

5.2. Susceptibilidad generalizada

En general no es posible hallar una fórmula para la distribución espectral de fluctuaciones arbitrarias, pero en muchos casos es posible relacionar las propiedades de fluctuaciones con cantidades que describen el comportamiento del cuerpo bajo ciertas interacciones. Dichas cantidades, tienen la propiedad de que para cada una de ellas existe una interacción externa, descrita por un operador perturbador del tipo

$$\hat{V} = -\hat{x}f(t)$$

\hat{x} es el operador relacionado con la cantidad física y f es una fuerza generalizada que es función del tiempo.

En ausencia de la perturbación, el valor medio de la cantidad física asociada a la variable x , es cero, ya que el sistema se encuentra en equilibrio. Sin embargo cuando la perturbación mencionada esta presente, este valor es distinto de cero, y puede escribirse como $\hat{\alpha}f$, donde α es un operador lineal que tiene efectos sobre la función f , esta forma viene dada por la expresión

$$\bar{x}(t) = \hat{\alpha}f = \int_0^{\infty} \alpha(\tau) f(t - \tau) d\tau$$

$\alpha(\tau)$ es una función del tiempo que depende de las propiedades del cuerpo. La cantidad \bar{x} es llamada la respuesta del sistema a la perturbación, y depende de los valores previos de f no de sus valores futuros.

Mediante la representación de series de Fourier, se puede escribir

$$\bar{x}_\omega = \alpha(\omega)f_\omega$$

donde $\alpha(\omega)$ está dada por

$$\alpha(\omega) = \int_0^\infty \alpha(t)e^{i\omega t} dt$$

Mediante esta función, el comportamiento del sistema bajo la perturbación está completamente determinado; $\alpha(\omega)$ es llamada la susceptibilidad generalizada, y es en general una función compleja, con componentes

$$\alpha(\omega) = \alpha'(\omega) + i\alpha''(\omega)$$

A partir de la definición se puede ver, que la parte real es una función par, mientras que la parte imaginaria es impar y que

$$\alpha(-\omega) = \alpha^*(\omega)$$

lo cual quiere decir que la respuesta del sistema, debe ser una función real para cualquier fuerza f . Si es una función real y puramente monocromática, aplicando el operador α se tiene que

$$f = \frac{1}{2} [f_0 e^{-i\omega t} + f_0^* e^{i\omega t}]$$

$$\bar{x} = \frac{1}{2} [\alpha(\omega)f_0 e^{-i\omega t} + \alpha(-\omega)f_0^* e^{i\omega t}].$$

El cambio que se produce en el sistema, por la acción de la fuerza, viene acompañado de absorción o disipación de energía, debido a la interacción con el exterior, y esta es convertida en calor después de la absorción y se expresa en términos de la cantidad α . Para esto se usa la expresión

$$\frac{dE}{dt} = \frac{\partial \bar{H}}{\partial t}$$

como en el Hamiltoniano del sistema sólo \hat{V} depende del tiempo de manera explícita, se escribe la ecuación anterior de la siguiente manera

$$\frac{dE}{dt} = -\hat{x} \frac{df}{dt}.$$

Sustituyendo las expresiones para \bar{x} y f y promediando sobre el tiempo, se llama a este valor Q , y se dice que esta es la energía media disipada por unidad de tiempo

$$Q = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2t} \int_0^t \left[\alpha f_0 e^{-i\omega t'} + \alpha^* f_0^* e^{i\omega t'} \right] \frac{1}{2} \left[-i\omega f_0 e^{-i\omega t'} + i\omega f_0^* e^{i\omega t'} \right] dt'$$

$$Q = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{4t} \int_0^t \left[-i\omega \alpha f_0^2 e^{-2i\omega t'} - i\alpha \omega f_0 f_0^* + i\alpha^* \omega f_0 f_0^* + i\omega \alpha^* f_0^{*2} e^{2i\omega t'} \right] dt'$$

$$Q = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{4t} \left[\frac{i\omega \alpha f_0^2}{2i\omega} e^{-2i\omega t'} \Big|_0^t - i\alpha \omega f_0 f_0^* t \Big|_0^t + i\alpha^* \omega f_0 f_0^* t \Big|_0^t + \frac{i\omega \alpha^* f_0^{*2}}{2i\omega} e^{2i\omega t'} \Big|_0^t \right]$$

$$Q = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{4} \left[\frac{\alpha f_0^2}{2} \left(\frac{e^{-2i\omega t} - 1}{t} \right) + (\alpha^* - \alpha) i\omega |f_0|^2 \frac{t}{t} + \frac{\alpha^* f_0^{*2}}{2} \left(\frac{e^{2i\omega t} - 1}{t} \right) \right]$$

como $e^{\pm 2i\omega t} = \cos(2\omega t) \pm i \sin(2\omega t)$ el valor en la rama principal es oscilante por lo cual si $t \rightarrow \infty$ $\frac{e^{\pm 2i\omega t}}{t}$ tiene un valor cercano a 0 de aquí

$$Q = \frac{1}{4} i\omega (\alpha^* - \alpha) |f_0|^2 = \frac{1}{4} i\omega \alpha''(\omega) |f_0|^2,$$

de esta expresión se puede notar que la parte imaginaria de la función de susceptibilidad determina la forma en que la energía es disipada.

La función $\alpha(\omega)$ puede ser determinada en base a sus propiedades, y mediante métodos utilizados en el análisis de funciones de variable compleja. Ya que $\alpha(t)$ es una función finita, entonces $\alpha(\omega)$ es una función regular y univaluada en el plano superior.

Ahora se demostrará, que la función $\alpha(\omega)$ no toma valores reales en cualquier punto finito en el plano superior, exceptuando el eje imaginario, donde decrece monótonamente de un valor positivo $\alpha_0 > 0$ en $\omega = i0$ a 0 en $\omega = i\infty$. Por lo tanto, se dice que la función no tiene ceros en el plano superior.

Para demostrar este teorema, se analizan los polos de la función α mediante la integral

$$\frac{1}{2\pi i} \int \frac{d\alpha(\omega)}{d\omega} \frac{d\omega}{\alpha(\omega) - a}$$

evaluada a lo largo de un contorno cerrado C , es igual al número de polos de la función $\alpha(\omega) - a$ en la región contenida en el contorno. a es un número real, y C es un contorno contenido en un semicírculo de radio infinito, en la mitad superior del plano complejo.

Para calcular la integral esta se escribe como

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{C'} \frac{d\alpha}{\alpha - a}$$

la integración se realiza alrededor del contorno C' que es un mapeo del plano C en el plano ω . El semicírculo es mapeado en el punto $\alpha = 0$, y el origen $\omega = 0$ es mapeado en el punto α_0 . Las mitades izquierda y derecha del eje real se mapean en el plano α en curvas de formas complicadas, que se intersectan entre sí entre las mitades superiores e inferiores respectivamente que se muestra en la Figura 5.1.

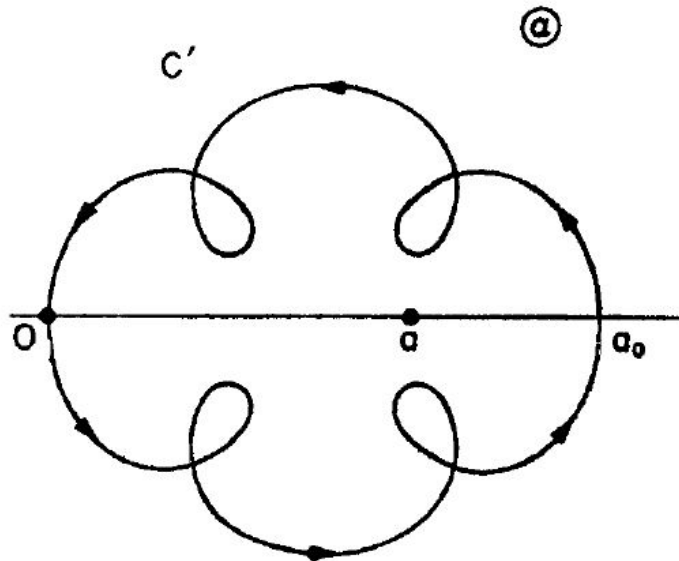


Figura 5.1: Forma del contorno C'

Como α no toma valores reales para cualquier real ω , el cambio total del argumento del número complejo $\alpha - a$ a lo largo de C' , es 2π , si a se encuentra entre 0 y α_0 . Por lo tanto, el valor de la integral es 1 si $0 < a < \alpha_0$, y 0 para cualquier otro caso.

De aquí se dice, que la función $\alpha(\omega)$ toma en la mitad superior del plano ω , cada valor real en este rango una vez únicamente, por lo tanto en el eje imaginario, donde la función $\alpha(\omega)$ es real no puede tener un máximo o mínimo ya que para esto debería poder tomar algunos valores al menos dos veces. por lo que α varía monótonamente en el eje imaginario.

De estas propiedades se puede establecer una relación entre las partes real e imaginaria de la función

$$\int_0^\infty \alpha(i\omega) d\omega = \int_0^\infty \alpha''(\omega) d\omega.$$

5.3. Teorema de la fluctuación disipación

Mediante este teorema, se puede encontrar una relación entre las fluctuaciones de una cantidad x con la susceptibilidad generalizada.

Sea $x(t)$ una cantidad observable de un sistema dinámico, con Hamiltoniano $H_0(x)$ y sujeto a fluctuaciones térmicas. La observable $x(t)$, fluctúa alrededor de su valor medio $\langle x \rangle_0$, fluctuaciones caracterizadas por $S_x(\omega) = \hat{x}(\omega)\hat{x}^*(\omega)$, que es llamado el espectro de potencia.

Suponiendo que se puede introducir un campo escalar $f(t)$ que altera el Hamiltoniano en $H(x) = H_0(x) + fx$. La respuesta de la observable $x(t)$ a un campo dependiente del tiempo $f(t)$, está caracterizada a primer orden por la función de susceptibilidad del sistema

$$\langle x(t) \rangle = \langle x \rangle_0 + \int_{-\infty}^t f(\tau)\alpha(t - \tau)d\tau.$$

El teorema de la fluctuación disipación relaciona el espectro de potencias de x con la parte imaginaria de la función de susceptibilidad $\alpha(\omega)$

$$S_x(\omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \alpha''(\omega). \quad (5.5)$$

El término de la izquierda de la ecuación 5.5 describe las fluctuaciones en x , mientras que el la derecha está relacionado con la energía disipada por el sistema, cuando aparece un campo oscilatorio de la forma

$$f(t) = F \text{sen}(\omega t + \phi).$$

5.4. Efecto espín Seebeck en uniones F/N.

En la sección 1.7 de este trabajo se habla de el efecto Seebeck, un efecto termoelectrico que relaciona, la aplicación de un gradiente de temperatura con la producción de una diferencia de potencial en una unión de materiales.

Análogamente en la sección 1.8 se hace mención del efecto espín Seebeck, que es el objeto de estudio del presente trabajo y la forma en que se produce en una unión F/N. Este fenómeno ha logrado atraer la atención en el campo de la espintrónica, ya que es un método para producir corrientes de espines que sustituyan a las corrientes de electrones, en las que no se considera este grado de libertad.

El efecto espín Seebeck permite que se genere una fuerza electromotriz a partir de un gradiente de temperatura, tal como ocurre en el efecto Seebeck.

Este efecto fue observado por primera vez por un grupo de investigación en una muestra de permalloy (aleación magnética de hierro y níquel), cuyas dimensiones eran del orden de milímetros, alineada con platino en sus bordes exteriores, a través de las cuales se aplicó un gradiente de temperatura, así como un campo magnético en la dirección del gradiente y hecho circular a través

de espiras de histéresis. El coeficiente de Seebeck convencional, es distinto dependiendo de el espín de los electrones implicados, por lo que se origina una diferencia de potencial dentro de cada electrodo de platino proporcional al gradiente de temperatura.

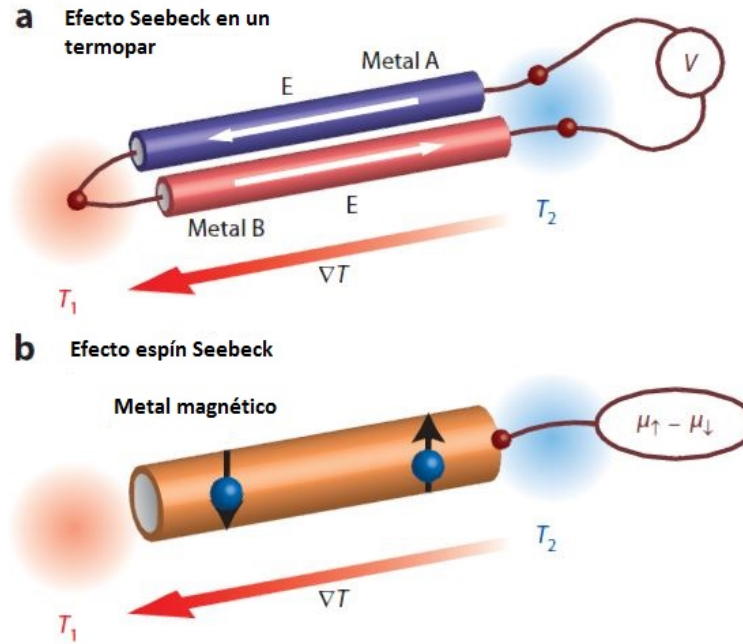


Figura 5.2: a)Efecto Seebeck b)efecto espín Seebeck

En la figura 5.2 se observa la diferencia entre el efecto Seebeck, y el efecto espín Seebeck, y puede observarse que este es producido debido a la diferencia entre los potenciales quasi químicos mencionados en la sección 2.3.

Tanto en el efecto Seebeck, como en el efecto espín Seebeck se considera irrelevante la participación de los electrones de conducción; sin embargo se considera que los magnones mencionados en la sección 4.2.3.

Considerando una estructura híbrida (figura 5.3) de un ferromagneto con una temperatura local (T_F) y un metal no magnético con una temperatura (T_N) los cuales interactúan débilmente a través de la interfase s-d dicha interacción se representa mediante J_{sd} , en la presencia de un campo magnético externo, en dirección perpendicular a la estructura. Se asume que esta región es lo suficientemente pequeña de tal forma que las variaciones espaciales de cualquier cantidad física puede ser despreciada. La cantidad física fundamental en la descripción del efecto espín Seebeck, es la corriente de espines producida por medio de un proceso de inyección el cual fue descrito en la sección 2.4.

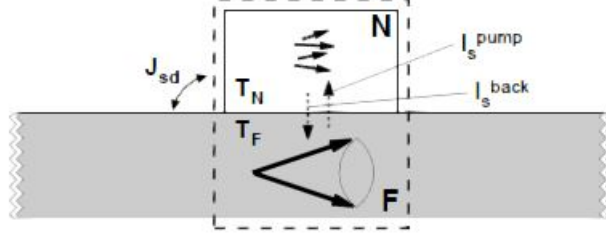


Figura 5.3: Región de estudio para el efecto espín Seebeck

El comportamiento del material ferromagnético se modela, mediante las ecuaciones de Landau-Lifshitz-Gilbert, obtenida en la sección 4.2.4, que en este caso toma la forma

$$\partial_t \mathbf{M} = \left[\gamma (\mathbf{H}_0 + \mathbf{h}) - \frac{J_{sd}}{\hbar} \mathbf{s} \right] \times \mathbf{M} + \frac{\alpha}{M_s} \mathbf{M} \times \partial_t \mathbf{M} \quad (5.6)$$

donde $\mathbf{H}_0 = H_0 \hat{\mathbf{z}}$ es el campo magnético externo \mathbf{h} incluye las fluctuaciones térmicas debidas a la magnetización del material M_s es la magnetización de saturación, que se define como el grado máximo de magnetización que puede tener un cuerpo, γ es la razón giromagnética, α es la constante de amortiguamiento.

Las fluctuaciones térmicas \mathbf{h} cumplen con las condiciones del teorema de la fluctuación disipación, por lo que cumple con el ensamble Gaussiano:

$$\langle h^\mu(t) \rangle = 0$$

$$\langle h^\mu(t) h^\nu(t') \rangle = \frac{2k_B T_F \alpha}{\gamma a_S^3 M_s} \delta_{\mu\nu} \delta(t - t')$$

donde $a_S^3 = \frac{\hbar \gamma}{M_s}$ es el volumen de celda del ferromagneto.

En el caso del material no magnético este puede ser descrito por las ecuaciones de Bloch mencionadas en la sección 4.3

$$\partial_t \mathbf{s} = -\frac{1}{\tau_{sf}} \left(\mathbf{s} - s_0 \frac{\mathbf{M}}{M_s} \right) - \frac{J_{sd}}{\hbar} \frac{\mathbf{M}}{M_s} \times \mathbf{s} + \mathbf{l} \quad (5.7)$$

donde τ_{sf} es el tiempo de relajación de los espines, \mathbf{s} es la densidad de espines, $s_0 = \chi_N J_{sd}$ que es la densidad de espines de equilibrio con χ_N la susceptibilidad paramagnética en el material no magnético, \mathbf{l} es ruido introducido como un ensamble Gaussiano es decir cumple las condiciones del teorema de fluctuación disipación y se puede escribir como

$$\langle l^\mu(t) \rangle = 0$$

$$\langle l^\mu(t)l^\nu(t') \rangle = \frac{2k_B T_N \chi_N}{\tau_{sf}} \delta_{\mu\nu} \delta(t-t')$$

en la región de producción de ondas de espines, el valor de la magnetización \mathbf{M} fluctúa alrededor del valor $M_s \hat{z}$ y $\frac{\mathbf{M}}{M_s} = \hat{z} + \mathbf{m}$, donde \mathbf{m} corresponde a las fluctuaciones del valor de la magnetización.

La corriente de espines se define como

$$I_s(t) = \frac{J_{sd}}{\hbar} \Im m \langle s^+(t) m^-(t') \rangle_{t' \rightarrow t}$$

donde $s^\pm = s^x \pm i s^y$ corresponde al operador de ondas de espín, y $m^\pm = m^x \pm i m^y$ corresponde al operador de magnetización. Recurriendo a la representación de Fourier $f(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} f_\omega e^{-i\omega t}$ la corriente de espines puede ser expresada como

$$I_s = \frac{J_{sd}}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \langle \langle s_\omega^+ m_{-\omega}^- \rangle \rangle$$

donde el promedio $\langle \langle \dots \rangle \rangle$ se define como $\langle s_\omega^+ m_{\omega'}^- \rangle = 2\pi \delta(\omega + \omega') \langle \langle s_\omega^+ m_{-\omega}^- \rangle \rangle$.

Para la resolución de las ecuaciones 5.6 y 5.7, se utiliza método espectral y a la representación de Fourier de los operadores de magnetización y de ondas de espín, donde se obtiene que la corriente de espines es proporcional a la diferencia de temperaturas entre el material magnético y el no magnético. Mediante el método espectral se obtiene que las soluciones a la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert son

$$s_\omega^+ = \frac{1}{-i\omega + \tau_{sf}^{-1}} \left(l_\omega^+ + \frac{s_0 \tau_{sf}^{-1}}{\omega_0 + \omega - i\alpha\omega} \gamma h_\omega^+ \right)$$

$$m_\omega^- = \frac{1}{\omega_0 - \omega - i\alpha\omega} \left(\gamma h_\omega^- + \frac{J_{sd}}{\hbar (-i\omega + \tau_{sf}^{-1})} l_\omega^- \right)$$

donde $\omega_0 = \gamma H_0$.

$$I_s = -G_s \frac{k_B}{\hbar} (T_F - T_N)$$

donde $G_S \approx J_{sd}^2 \chi_N \tau_{sf} / \hbar$.

Sin embargo el voltaje de espines puede detectarse mediante efecto espín Hall como se explicará posteriormente en el capítulo 6.

Se origina también una corriente de espines, en forma de ondas de espines, debidas al campo de intercambio, que se añade como un término adicional a \mathbf{h} , en la ecuación de Landau-Lifshitz-Gilbert, este se define como $\mathbf{H}_{ex} = A \nabla^2 \mathbf{M}$, donde \mathbf{M} es la magnetización y A es la rigidez de el material, para este cálculo se debe considerar el campo de desmagnetización, en el capítulo 6 se realizan

los cálculos de el campo de magnetización en la muestra de YIG, la corriente en forma de ondas de espines se define como $j_{sw} = \mathbf{M} \times \nabla \mathbf{M}$, el análisis de la corriente en forma de ondas de espines, sale de los alcances buscados en este trabajo por este hecho solo se realiza el cálculo del campo de magnetización con el proyecto de analizar el comportamiento de ondas de espines no solo en YIG, material en que se realiza el cálculo, sino en otros materiales candidatos a ser utilizados en la espintrónica.

Con el marco teórico presentado a lo largo de este trabajo, se tienen las herramientas para poder analizar el voltaje de espines producido en una unión F/N por un gradiente de temperatura. En este caso solo se analiza el voltaje producido a lo largo de la dirección z y no se estudia el caso de el voltaje producido en la dirección xy , por las fluctuaciones térmicas causadas por el campo magnético. Sin embargo se presenta un cálculo de los factores de desmagnetización a lo largo de una muestra, que es el primer paso en búsqueda de una solución de las ecuaciones de magnetización.

Capítulo 6

Resultados

Se realiza un procedimiento análogo al de la sección 2.4 con la finalidad de obtener la corriente de espines entre una unión de materiales, se analizarán en este capítulo distintas uniones F/N con sus correspondientes parámetros de conductividad longitud de relajación de espines. El estudio del voltaje producido en la unión por medio de efecto espín Hall, se realiza con la finalidad de desarrollar un método de detección del fenómeno.

Se calcula la función de Brillouin para el caso de YIG, ya que para este se dispone de toda la información necesaria, con ello se calcula el campo de desmagnetización. Este campo es importante en el caso de analizar las ondas de espines producidas en la dirección del gradiente de temperatura, sin embargo esto se calcula con miras hacia un trabajo posterior, y que permitirá disponer de información adicional para YIG

6.1. Corriente de espines generada en la unión

Se considera una placa rectangular de longitud L, en la cual se aplica un gradiente de temperatura en la dirección x, la temperatura aumenta de forma lineal con la distancia entre bordes de la placa. Se escribe de forma explícita la ecuación 2.16 con lo cual adquiere la forma

$$\nabla^2(\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) = \frac{1}{\lambda^2}(\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) \quad (6.1)$$

con $\mu_{\uparrow,\downarrow}$ el potencial electroquímico dependiente del espín para electrones de conducción.

En el material ferromagnético a partir de esta ecuación se puede obtener la corriente de espines como

$$\overline{J}_s = \frac{1}{e} \nabla(\sigma_{\uparrow}\mu_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow}\mu_{\downarrow}) + (\sigma_{\uparrow}S_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow}S_{\downarrow})(-\nabla T)$$

donde e es la carga del electrón, como se menciona en el capítulo 2 $\sigma_{\uparrow,\downarrow}$

es la conductividad dependiente de el espín y $S_{\uparrow,\downarrow}$ es el coeficiente de Seebeck dependiente del espín

La solución imponiendo condiciones de frontera de $\overline{\mathbf{J}}_{\mathbf{s}} = 0$ en los extremos de la placa es

$$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} = e\lambda(S_{\uparrow} - S_{\downarrow}) \frac{\sinh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T$$

Se muestra que es solución

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(e\lambda(S_{\uparrow} - S_{\downarrow}) \frac{\sinh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T \right) = e(S_{\uparrow} - S_{\downarrow}) \frac{\cosh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \left(e\lambda(S_{\uparrow} - S_{\downarrow}) \frac{\sinh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T \right) = \frac{e(S_{\uparrow} - S_{\downarrow})}{\lambda} \frac{\sinh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T = \frac{1}{\lambda} (\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow})$$

Esta solución será comparada con el caso en el que se agrega la contribución de la entropía, con el objetivo de conocer el momento en que esta contribución se vuelve significativa. Para lo cual se considera la relación

$$\nabla\mu_{\uparrow,\downarrow} = \frac{1}{N_{\uparrow,\downarrow}} \nabla n_{\uparrow,\downarrow} - e\nabla\phi$$

con $N_{\uparrow,\downarrow}$ la densidad de estados dependiente del espín, $n_{\uparrow,\downarrow}$ la densidad de portadores y ϕ el potencial electrostático, con lo que es necesario añadir el término de entropía incluida en el potencial químico dependiente del espín $\mu_{\uparrow,\downarrow}^c$, que se puede escribir como $\mu_{\uparrow,\downarrow} = \mu_{\uparrow,\downarrow}^c - e\phi$ donde $\mu_{\uparrow,\downarrow}^c$ depende de la temperatura y de la densidad $n_{\uparrow,\downarrow}$ por lo cual se puede escribir

$$\nabla\mu_{\uparrow,\downarrow} = \left(\frac{\partial\mu_{\uparrow,\downarrow}^c}{\partial T} \right)_{n_{\uparrow,\downarrow}} \nabla T + \left(\frac{\partial\mu_{\uparrow,\downarrow}^c}{\partial n_{\uparrow,\downarrow}} \right)_T \nabla n_{\uparrow,\downarrow} - e\nabla\phi$$

la cual se reduce a

$$= \left(\frac{\partial\mu_{\uparrow,\downarrow}^c}{\partial T} \right)_{n_{\uparrow,\downarrow}} \nabla T + \nabla\bar{\mu}_{\uparrow,\downarrow}$$

considerando que el gradiente de temperatura es uniforme

$$\mu_{\uparrow,\downarrow} = \left(\frac{\partial\mu_{\uparrow,\downarrow}^c}{\partial T} \right)_{n_{\uparrow,\downarrow}} (\nabla T)x + \bar{\mu}_{\uparrow,\downarrow} \quad (6.2)$$

$\bar{\mu}_{\uparrow,\downarrow}$ debe satisfacer la ecuación (6.1) por lo que combinando la ecuación 6.1 para $\bar{\mu}_{\uparrow,\downarrow}$ obteniendo

$$\nabla^2(\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) = \frac{1}{\lambda^2}(\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}) - \frac{e}{\lambda^2} S_S(\nabla T)x$$

donde la solución es

$$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} = eS_S(\nabla T)x - e\lambda [S_S - (S_{\uparrow} - S_{\downarrow})] \frac{\sinh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \nabla T$$

$$\bar{J}_S = \frac{\sigma_F}{2}(1 - p_c^2) [S_S - (S_{\uparrow} - S_{\downarrow})] \left[1 - \frac{\cosh\left(\frac{x}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{L}{2\lambda}\right)} \right] \nabla T$$

donde $\sigma_F = \sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow}$ y $p_c = \frac{\sigma_{\uparrow} - \sigma_{\downarrow}}{\sigma_{\uparrow} + \sigma_{\downarrow}}$ y S_S es el coeficiente espín Seebeck. Para el caso en el que $L \gg \lambda$ obteniendo

$$\bar{J}_S = \frac{\sigma_F}{2}(1 - p_c^2) [S_S - (S_{\uparrow} - S_{\downarrow})] \nabla T \quad (6.3)$$

$$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow} = eS_S(\nabla T)x \quad (6.4)$$

a lo largo de este capítulo, se suponen distintas combinaciones de materiales para analizar la manera en que se produce la corriente de espines y la forma en que esta puede ser detectada por medio de un fenómeno conocido como efecto espín Hall y se mostrara una comparación entre el voltaje obtenido por medio de los distintos parámetros involucrados en el efecto.

Esta corriente puede ser detectada por medio de un voltaje, producido por efecto espín Hall inverso(ver apéndice B) y se puede definir como

$$V_{ISHE} = -\frac{\theta\eta_{F/N}}{e} \frac{L_N}{d_N} \delta\mu \quad (6.5)$$

donde θ es el angulo espín Hall asociado con el metal no magnético, L_N es el largo de la placa no magnética y d_N es su espesor, $\eta_{F/N}$ es el parámetro de eficiencia de inyección de espines.

$$\eta_{F/N} = \frac{\frac{\sinh^2(d_N/2\lambda_N)}{\cosh(d_N/\lambda_N)}}{1 + \frac{\sigma_N\lambda_F \tanh(d_N/\lambda_N)}{\sigma_F\lambda_N \tanh(d_F/\lambda_F)}} \quad (6.6)$$

donde el subíndice N o F está relacionado con el material ferromagnético o con el no magnético, $\lambda_{F,N}$ es la longitud de difusión de espines. El voltaje espín Hall también puede expresarse como

$$V_{ISHE} = \theta \langle j_s \rangle d_N \rho_N e$$

De esta ecuación se puede ver que el voltaje producido debido a efecto espín Hall esta directamente relacionado con la corriente de espines producida entre la unión

6.2. Yttrium Iron Garnet (YIG)/Au

Debido a que YIG es uno de los materiales más estudiados con posibilidades espintrónicas es en el que más se enfatizará, ya que hay una gran cantidad de información disponible obtenida en experimentos, para este material en particular, se tiene el conocimiento de la dependencia del espesor de la muestra con el coeficiente espín Seebeck. YIG es un material ferromagnético cuya fórmula química es $Y_3Fe_5O_{12}$ tiene una estructura de tipo *bcc* .[37]

Considerando distintos espesores de YIG[38] :

Espesor[nm]	Coefficiente espín Seebeck $\frac{\mu V}{K}$
40.0	0.1147
80.0	0.2131
100.0	0.2199
130.0	0.2398
150.0	0.2563

Cuadro 6.1: Tabla de coeficientes espín Seebeck para YIG

Se muestra en la figura 6.1 la gráfica de comportamiento del coeficiente espín Seebeck para distintos espesores

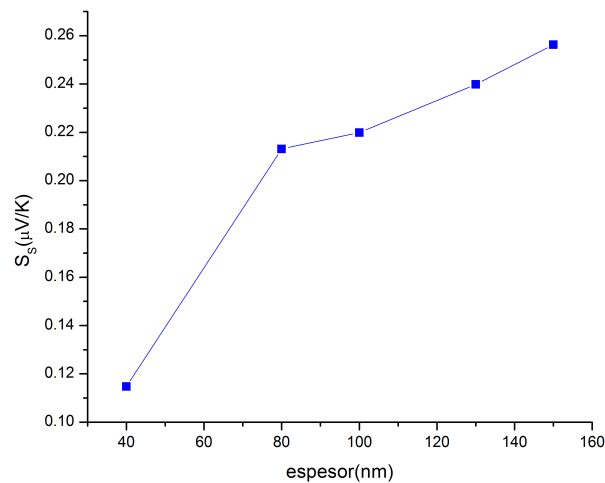


Figura 6.1: Gráfica que representa el comportamiento del coeficiente espín Seebeck con el espesor de una placa de YIG

Al considerar distintos espesores para la placa de YIG, esto influye en la magnitud del coeficiente espín Seebeck, y se plantea la hipótesis de que está asociado a una eficiencia distinta en el proceso de inyección de espines, además $\lambda_F = 5 \text{ nm}$, bajo la hipótesis de que la variación de la temperatura no es tan grande como para afectar la longitud de difusión; con las mismas condiciones para el caso del oro $\lambda_N = 80 \text{ nm}$, el espesor de la placa es de $d_N = 120 \text{ nm}$. La conductividad del oro es $\sigma_N = 27 \times 10^6 \frac{\text{S}}{\text{m}}$ y la del YIG es $1 \times 10^{-12} \frac{\text{S}}{\text{m}}$, [39, 40]obteniendo la siguiente tabla para la eficiencia de la inyección de espines haciendo uso de la ecuación (6.6)

Espesor YIG [nm]	Eficiencia $\eta_{YIG/Au}$
40.000	0.081
80.000	0.081
100.000	0.081
130.000	0.081
150.000	0.081

Cuadro 6.2: Eficiencia de inyección de espines para unión YIG/Au

En la tabla 6.2 se observa que la variación de la eficiencia debida al espesor de la placa de YIG no es significativa y con esta eficiencia se calcula el voltaje que se produce debido a efecto espín Hall usando la ecuación 6.5. Considerando un gradiente de temperatura de $3 \times 10^3 \frac{\text{K}}{\text{m}}$ en la dirección x de la placa, y combinando la ecuación 6.4 con la 6.5 obteniendo

$$V_{ISHE} = -\theta \eta_{F/N} \frac{L_N}{d_N} S_S (\nabla T) x \quad (6.7)$$

para el caso del oro $\theta = 0.0016$.

La siguiente tabla incluye los valores de V_{ISHE} a lo largo de la placa de YIG, considerando que $L_N = 4 \text{ mm}$, $x \in [0, 6] \text{ mm}$

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-1.488×10^{-6}	-5.512×10^{-26}
0.002	-2.976×10^{-5}	-1.102×10^{-25}
0.003	-4.436×10^{-5}	-1.654×10^{-25}
0.004	-5.591×10^{-5}	-2.205×10^{-25}
0.005	-7.439×10^{-5}	-2.756×10^{-25}
0.006	-8.927×10^{-5}	-3.307×10^{-25}

Cuadro 6.3: Voltaje espín Hall espesor YIG = 40 nm

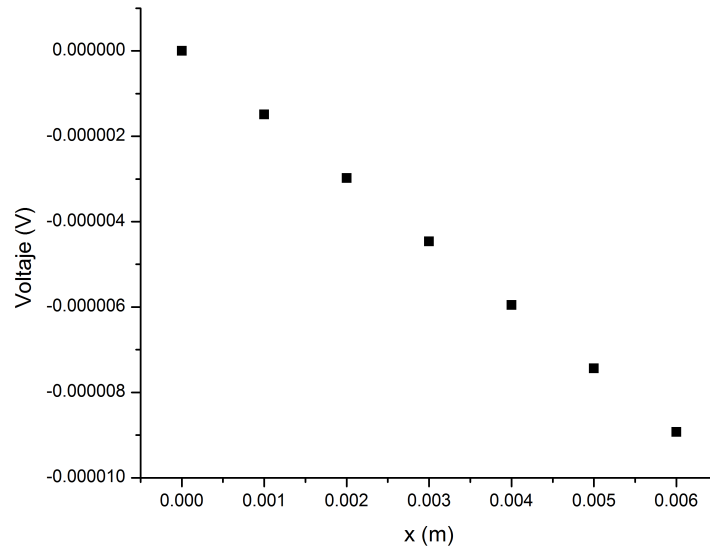


Figura 6.2: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 40 nm

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-2.764×10^{-6}	-8.651×10^{-24}
0.002	-5.528×10^{-6}	-1.730×10^{-23}
0.003	-8.292×10^{-6}	-2.595×10^{-23}
0.004	-1.106×10^{-5}	-3.460×10^{-23}
0.005	-1.382×10^{-5}	-4.325×10^{-23}
0.006	-1.658×10^{-5}	-5.190×10^{-23}

Cuadro 6.4: Voltaje espín Hall espesor YIG= 80 nm

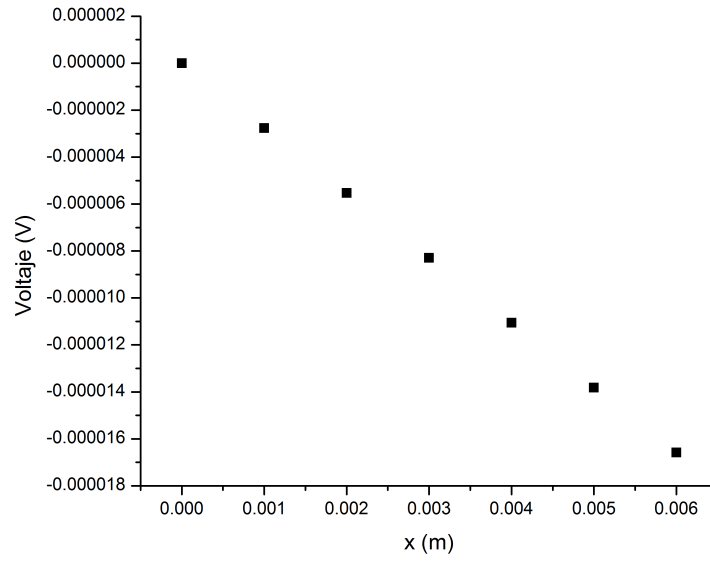


Figura 6.3: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 80 nm

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-3.110×10^{-6}	-1.057×10^{-25}
0.002	-6.221×10^{-6}	-2.114×10^{-25}
0.003	-9.331×10^{-6}	-3.171×10^{-25}
0.004	-1.244×10^{-5}	-4.227×10^{-25}
0.005	-1.555×10^{-5}	-5.284×10^{-25}
0.006	-1.866×10^{-4}	-6.341×10^{-25}

Cuadro 6.5: Voltaje espín Hall espesor YIG = 100 nm

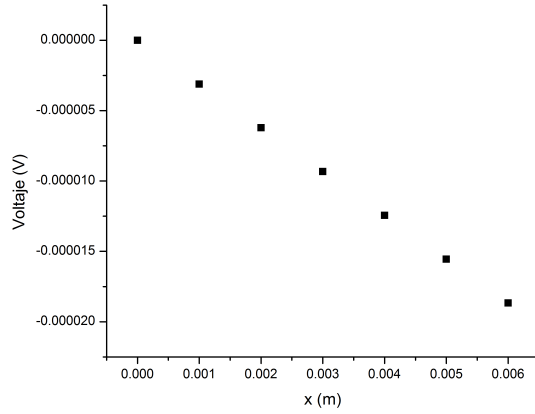
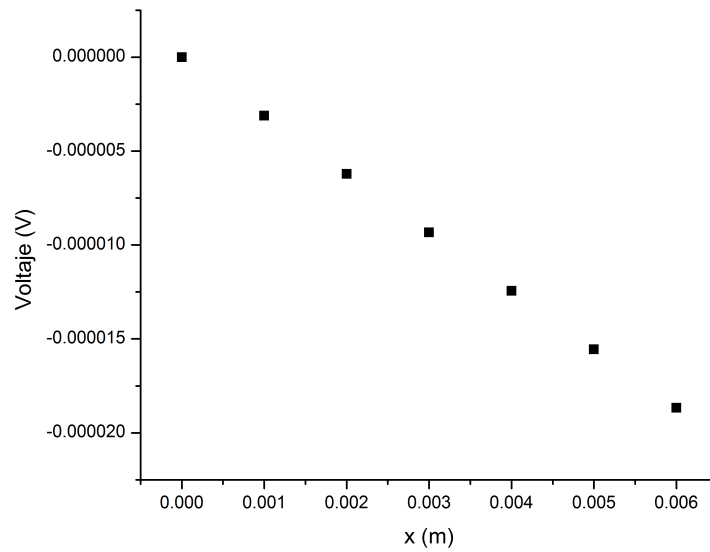


Figura 6.4: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 100 nm

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-3.325×10^{-6}	-1.152×10^{-25}
0.002	-6.221×10^{-6}	-2.305×10^{-25}
0.003	-9.331×10^{-6}	-3.457×10^{-25}
0.004	-1.244×10^{-5}	-4.610×10^{-25}
0.005	-1.555×10^{-5}	-5.762×10^{-25}
0.006	-1.866×10^{-5}	-6.915×10^{-25}

Cuadro 6.6: Voltaje espín Hall espesor YIG = 130 nm



Cuadro 6.7: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 130 nm

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-3.325×10^{-6}	-1.232×10^{-25}
0.002	-6.649×10^{-6}	-2.464×10^{-25}
0.003	-9.974×10^{-6}	-3.695×10^{-25}
0.004	-1.330×10^{-5}	-4.927×10^{-25}
0.005	-1.662×10^{-5}	-6.159×10^{-25}
0.006	-1.995×10^{-5}	-7.391×10^{-25}

Cuadro 6.8: Voltaje espín Hall espesor YIG = 150 nm

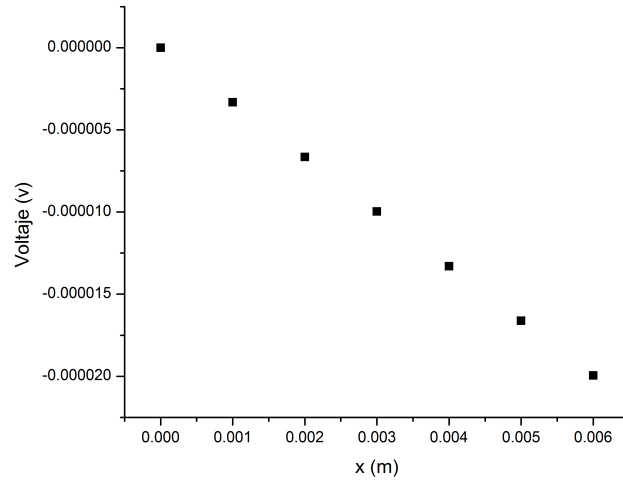


Figura 6.5: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Au, con espesor de la capa de YIG de 150 nm

6.3. YIG/Pt

Para el caso de esta unión se considera la unión de una placa de YIG de espesor de 150 nm, y una placa de platino de 10 nm, para el caso del platino $\lambda_{Pt} = 5 \text{ nm}$, $\theta_{Pt} = 0.0037$; el coeficiente espín Seebeck para el YIG de 150 nm $S_S = 0.2563 \frac{\mu V}{K}$, la conductividad para el platino es $\sigma_{Pt} = 1.1 \times 10^6 \frac{\Omega}{m}$. La eficiencia del proceso de inyección para la unión YIG/Pt es $\eta_{YIG/Pt} = 0.004$

x[m]	V_{ISHE} [V]	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ [V]
0	0	0
0.001	-1.949×10^{-6}	-1.232×10^{-25}
0.002	-3.897×10^{-6}	-2.464×10^{-25}
0.003	-5.846×10^{-6}	-3.695×10^{-25}
0.004	-7.795×10^{-6}	-4.927×10^{-25}
0.005	-9.743×10^{-6}	-6.159×10^{-25}
0.006	-1.169×10^{-5}	-7.391×10^{-25}

Cuadro 6.9: Voltaje espín Hall YIG/Pt

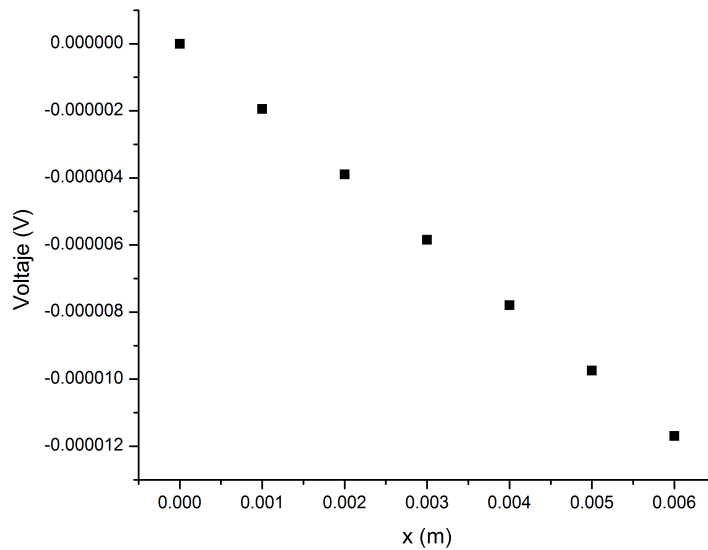


Figura 6.6: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión YIG/Pt, con espesor de la capa de YIG de 150 nm

6.4. Permalloy(Py)/Au

El Permalloy es una aleación magnética de hierro y níquel con cerca del 20 % de hierro y 80 % , aunque puede haber proporciones ligeramente distintas. Este material típicamente tiene una estructura *fcc*.

Para este caso se considera una unión entre una placa de Permalloy de 6 mm de largo en la dirección x , con un espesor de 20 nm y una placa de oro de 120 nm de espesor para este caso $\lambda_{Py} = 5nm$ la conductividad $\sigma_{Py} = 2.9 \times 10^6 \frac{S}{m}$ a partir de lo cual se calcula el voltaje espín Hall producido así como la eficiencia del proceso de inyección. de espines con estos parámetros se obtiene una eficiencia $\eta_{Py/Au} = 0.188$, el coeficiente espín Seebeck es $S_S = -18 \frac{\mu V}{K}$ para Permalloy.

$x[m]$	$V_{ISHE}[V]$	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}[V]$
0	0	0
0.001	5.413×10^{-4}	8.651×10^{-24}
0.002	1.083×10^{-3}	1.730×10^{-23}
0.003	1.624×10^{-3}	2.595×10^{-23}
0.004	2.165×10^{-3}	3.460×10^{-23}
0.005	2.707×10^{-3}	4.325×10^{-23}
0.006	3.248×10^{-3}	5.190×10^{-23}

Cuadro 6.10: Voltaje espín Hall Py/Au

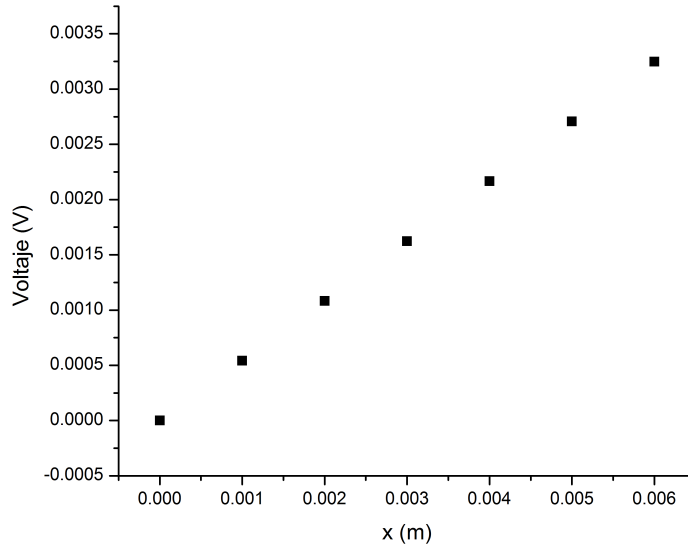


Figura 6.7: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión Py/Au

6.5. Py/Pt

Con los parámetros para estos materiales utilizados en las secciones anteriores se analiza el comportamiento de una unión de ellos, la eficiencia calculada para la unión es $\eta_{Py/Pt} = 0.269$, con lo cual el voltaje espín Hall obtenido se muestra en la tabla

$x[m]$	$V_{ISHE}[V]$	$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}[V]$
0	0	0
0.001	1.790×10^{-3}	8.651×10^{-24}
0.002	3.580×10^{-3}	1.730×10^{-23}
0.003	5.370×10^{-3}	2.595×10^{-23}
0.004	7.160×10^{-3}	3.460×10^{-23}
0.005	8.950×10^{-3}	4.325×10^{-23}
0.006	1.074×10^{-2}	5.190×10^{-23}

Cuadro 6.11: Voltaje espín Hall Py/Au

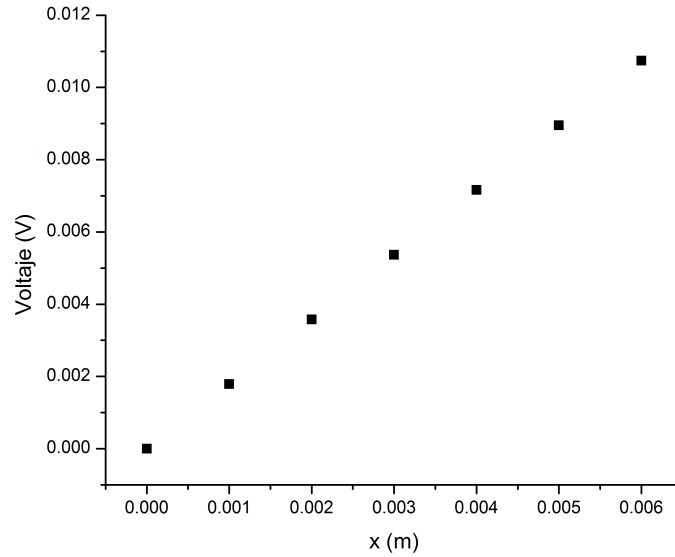


Figura 6.8: Gráfica del voltaje espín Hall en una unión Py/Pt

A partir de los datos de la tabla 6.1 se observa la variación del coeficiente espín Seebeck con respecto del espesor de una placa de YIG. Dado que en este caso $L_F \gg \lambda_F$ el espesor de la placa de YIG no afecta en gran medida la eficiencia de el proceso de inyección de espines, que se muestra en la tabla 6.2.

En las gráficas 6.2 a 6.5 se observa el voltaje producido en una placa de YIG unida con oro, la placa de YIG tiene distintos espesores, se observa una distribución lineal del voltaje a lo largo de la placa, además de que el voltaje es negativo, cabe señalar que el voltaje aumenta en la dirección del gradiente de temperatura; el hecho que el voltaje sea negativo indica que la diferencia

$\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ o acumulación de espines es positiva, que significa un mayor potencial de los espines orientados hacia arriba. La eficiencia del proceso de inyección es $\eta_{YIG/Au} = 0.081$.

En la gráfica 6.6 y la tabla asociada a esta gráfica se observa el comportamiento lineal de la misma forma de el voltaje espín Hall de la unión entre una placa de YIG y una placa de platino, la eficiencia del proceso de inyección en esta unión es de $\eta_{YIG/Pt} = 0.004$ por lo que para detectar la corriente de espines producida en YIG debida a un gradiente de temperatura, el oro es mejor material para detectar esta corriente al menos en YIG.

En el caso del Py el voltaje de espines es positivo lo cual supone un mayor potencial químico de los espines orientados hacia arriba. Se observa una mayor eficiencia en la detección si se usa platino ya que en este caso $\eta_{Py/Pt} = 0.269$ mientras que $\eta_{Py/Au} = 0.188$.

6.6. Cálculo factores de magnetización

En este trabajo se esbozará el método para calcular la corriente producida en el material ferromagnético en formas de espín, reservando para un trabajo futuro este cálculo.

Al aplicar un campo magnético, los momentos dipolares del material ferromagnético reaccionarán alineándose con el campo; con lo que se dice que el material esta magnetizado, sin embargo con el tiempo este material empezará a perder esta magnetización, este término debe ser incluido en la ecuación 5.6, sin embargo su signo debe ser negativo.

Este campo esta definido como [41]

$$H_d = NM$$

donde N corresponde al tensor de magnetización, que está relacionado con la geometría de la muestra y la magnitud de la magnetización esta dada por

$$M = N_S g J \mu_B \rho B_J$$

donde N_S es la densidad de espines, g es el factor de Landé, J el momento angular total, μ_B es el magnetón de Bohr, ρ la densidad del material y B_J es la función de Brillouin; la dirección de la magnetización es la dirección del campo.

La función de Brillouin es una medida de que tan magnetizable es un material de manera espontánea, lo cual influye en la manera en que se propagan las ondas de espín en el material ferromagnético. La función de Brillouin se define como

$$B_J = \frac{2J+1}{2J} \coth\left(\frac{2J+1}{2J}\chi\right) - \frac{1}{2J} \coth\left(\frac{1}{2J}\chi\right)$$

$$\chi = \frac{gJ\mu_B\mu_0 H}{k_B T} + \frac{3T_C J}{T(J+1)} B_J$$

donde T_C es la temperatura de Curie H es el campo aplicado y T la temperatura en cada posición. La función de Brillouin es una función trascendente por lo que se aplica el método de Newton para calcularla para los parámetros requeridos.

Para calcular los factores de magnetización se requiere dividir la muestra en celdas rectangulares, en este caso se toman 50 celdas, y se usa un método basado en la transformada rápida de Fourier, en el que el factor de desmagnetización se mide en el centro de cada celda, estos factores se expresan como

$$N_{ii}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} [\arctan f_i(x, y, z) + \arctan f_i(-x, y, z) + \arctan f_i(x, -y, z) + \arctan f_i(x, y, -z) + \arctan f_i(-x, -y, z) + \arctan f_i(x, -y, -z) + \arctan(-x, y, -z) + \arctan(-x, -y, -z)]$$

$$f_x(x, y, z) = \frac{(b-y)(c-z)}{(a-x) \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}}$$

$$f_y(x, y, z) = \frac{(a-x)(c-z)}{(b-y) \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}}$$

$$f_z(x, y, z) = \frac{(a-x)(b-y)}{(c-z) \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}}$$

$$N_{ij} = -\frac{1}{4\pi} \ln \left[\frac{F_{ij}(\mathbf{r}, a, b, c)F_{ij}(\mathbf{r}, -a, -b, c)F_{ij}(\mathbf{r}, a, -b, -c)F_{ij}(\mathbf{r}, -a, b, -c)}{F_{ij}(\mathbf{r}, a, -b, c)F_{ij}(\mathbf{r}, -a, b, c)F_{ij}(\mathbf{r}, a, b, -c)F_{ij}(\mathbf{r}, -a, -b, -c)} \right], i \neq j$$

$$F_{xy}(\mathbf{r}, a, b, c) = (c-z) + \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}$$

$$F_{yz}(\mathbf{r}, a, b, c) = (a-x) + \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}$$

$$F_{xz}(\mathbf{r}, a, b, c) = (b-y) + \left[(a-x)^2 + (b-y)^2 + (c-z)^2 \right]^{1/2}$$

donde a constituye la mitad del largo de la muestra en la dirección x , b corresponde la mitad del tamaño en la dirección y y c corresponde a la mitad del grosor en la dirección z .

Para esto se usa un programa desarrollado en el software Matlab que se incluye en el apéndice C

6.7. YIG función Brillouin y campo de desmagnetización

Se calcula la función de Brillouin para una muestra de YIG de 150 nm de espesor, 6 nm de largo y 6 nm de ancho, se calcula para YIG dado que se cuenta con todos los parámetros necesarios, se divide la muestra como se mencionó en 50 celdas, hay simetría en la dirección y, z , por lo que la función solo depende de x y habrá simetría en los factores de magnetización.

Se realizan las gráficas de la función de Brillouin en varios casos que se incluyen a continuación para una intensidad fija del campo magnético aplicado $B = 0.5\text{ T}$ y 5 T , cuando $T < T_C$ cuando la temperatura de la muestra es del orden de la temperatura de Curie y el caso en que $T \gg T_C$

Para el caso de YIG $T_C = 553\text{ K}$, $N_s = 3.83 \times 10^{24} \frac{\text{spines}}{\text{Kg}}$, el magnetón de Bohr tiene el valor $\mu_B = 9.274 \times 10^{-24} \frac{\text{J}}{\text{T}}$. y $J = \frac{5}{2}$

Para el primer caso se plantea que el centro de la celda con temperatura mas baja, tiene una temperatura de 30 K y el campo aplicado es 0.5 T , y solo se analiza la magnetización en la dirección x

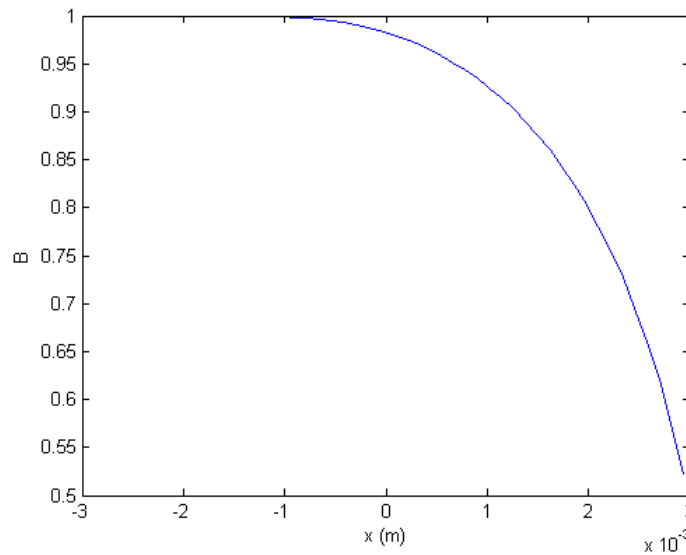


Figura 6.9: Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con campo magnético aplicado de 0.5 T

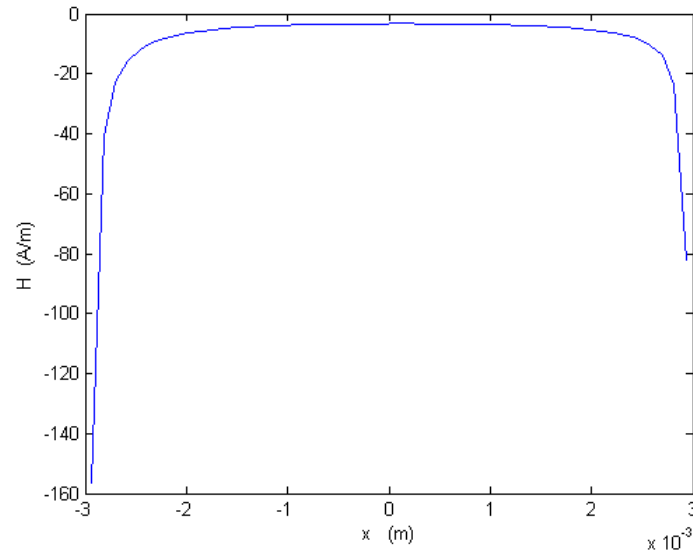


Figura 6.10: Gráfica de campo de desmagnetización a lo largo de la dirección x campo magnético $0.5 T$

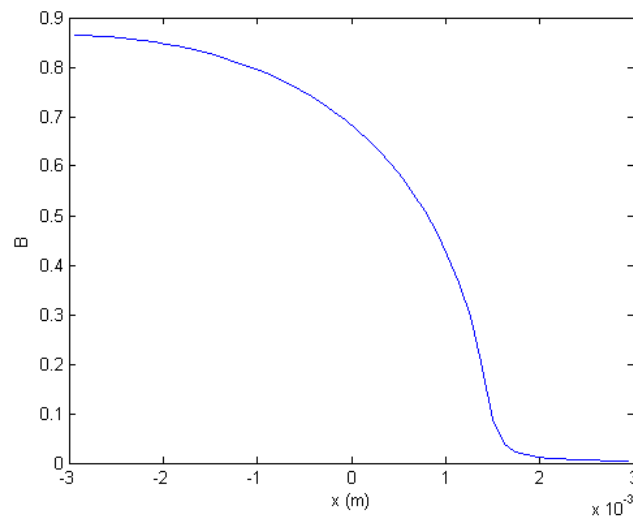


Figura 6.11: Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda $300 K$ campo aplicado $0.5 T$

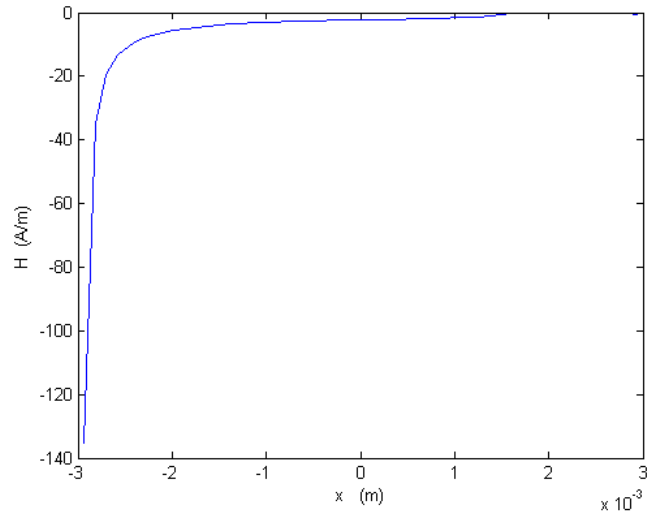


Figura 6.12: Gráfica campo de desmagnetización en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda 300 K campo aplicado 0.5 T

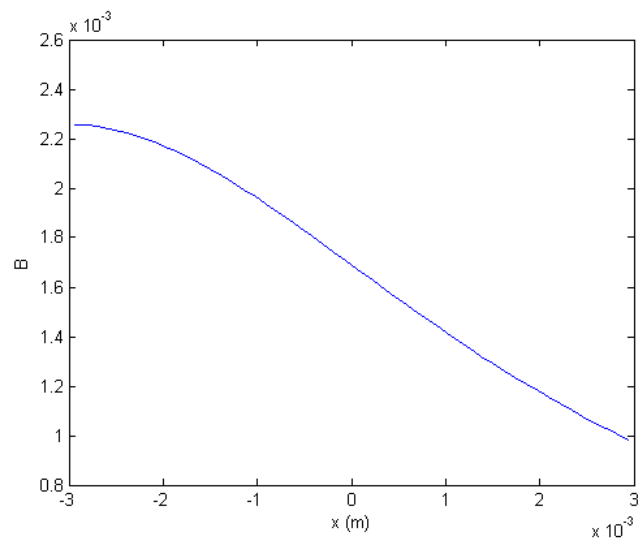


Figura 6.13: Gráfica función de Brillouin en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda 900 K campo aplicado 0.5 T

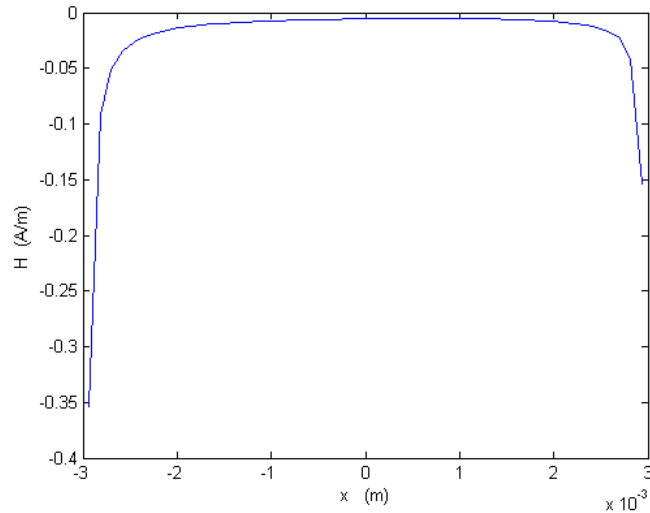


Figura 6.14: Gráfica campo de desmagnetización en cada posición de la placa con temperatura mas baja de la celda 900 K campo aplicado 0.5 T

En las gráficas que corresponden al caso en que la temperatura del centro de la celda mas fría es de 30 K , se observa que el valor de la función de Brillouin es 1 o muy cercano hasta la posición $x = 0.000660\text{ m}$, puede observarse en la gráfica 6.10 que el campo de desmagnetización tiende a aumentar negativamente en los bordes.

En el caso observado en la gráfica 6.12, cuando el valor de la temperatura de la muestra es cercano a la temperatura de Curie es cercano el campo de desmagnetización se vuelve muy pequeño y la función de Brillouin se acerca asintóticamente a 0, en el borde más caliente el campo de desmagnetización aumenta negativamente de forma casi imperceptible. En la gráfica 6.13 se observa que este comportamiento asintótico de la función de Brillouin continua, y en este caso la magnitud del campo de desmagnetización es muy pequeño, casi 0.

Conclusiones

Se puede decir que para la detección de voltaje de espines, por medio del efecto espín Hall; si la medición se realiza en YIG independientemente de su espesor, si está en unión con oro, existe una mayor eficiencia en el proceso de inyección.

Si la misma medición se realiza en Permalloy el platino es un mejor detector, ya que la eficiencia del proceso de inyección es mayor en unión con este material

Por medio de la información que proporciona la función de Brillouin en el caso de YIG, que nos dice que tan magnetizable es un material, el material tiene una magnetización espontánea mayor en el rango de 30 a 300 K, que con el objetivo de transmitir información por medio de ondas de espines lo que convierte al YIG en un material muy importante en el campo de la espintrónica, ya que incluso en el rango de temperatura ambiente sus propiedades magnéticas se mantienen.

El programa realizado deja la puerta abierta al análisis de otros materiales con posibilidades espintrónicas en el caso de los factores de desmagnetización y el campo producido debido a esta.

A partir de esta tesis se vislumbra un futuro trabajo del estudio de las ondas de espines en distintos materiales con propiedades espintrónicas como el Arseniuro de Gadolinio Manganeso, un material que ha mostrado propiedades interesantes para aplicaciones espintrónicas o el Gadolinium Galium Garnet.

La espintrónica es sin duda un campo de la física con muchos problemas abiertos, como la investigación de materiales en que el proceso de inyección de espines se produzca a temperatura ambiente de manera eficiente, mayor investigación de las propiedades de algunos materiales que son candidatos a ser utilizados para la construcción de dispositivos espintrónicos. Se contempla a la espintrónica como un detonante del desarrollo tecnológico de la humanidad de la misma manera que la electrónica lo hizo en el siglo pasado, la búsqueda de estos materiales se encuentra activa, y esta tesis solo es una muestra de todo el trabajo que puede realizarse para el estudio de materiales on miras a la espintrónica.

Apéndice A

Conceptos matemáticos

Se definen en este apéndice algunos conceptos matemáticos requeridos para la teoría de Markov.

A.1. σ -álgebra

Definición A.1 Una familia de subconjuntos de X representada por Σ es una σ -álgebra sobre X cuando se cumplen las siguientes propiedades:

- (i) El conjunto vacío está en Σ i.e. $\phi \in \Sigma$.
- (ii) Si E está en X también está su complemento.
- (iii) Si E_1, E_2, E_3, \dots es una sucesión de elementos de Σ entonces la unión contable de todos ellos también está en Σ .

A.2. Álgebra de Borel

Definición A.2 Un conjunto de Borel, es cualquier conjunto definido en un espacio topológico que puede ser formado con conjuntos abiertos, (o cerrados), a través de operaciones de unión contable, intersección contable y complemento relativo

Definición A.3 El álgebra de Borel sobre X es la mínima Σ -álgebra que contiene todos los abiertos, o todos los cerrados.

A.3. Espacios de Hausdorff

Definición A.4 Se dice que dos elementos x, y de un espacio topológico X cumplen la propiedad de Hausdorff si existen dos vecindades U_x de x y U_y de y tales que $U_x \cap U_y = \phi$

Definición A.5 Se dice que un espacio topológico es un espacio de Hausdorff si todo par de puntos distintos del espacio verifican la propiedad de Hausdorff

Dentro de este apéndice se definirá un nuevo tipo de procesos de Markov con la finalidad de ampliar la comprensión del capítulo 2

Definición A.6 *Se tiene*

1) *Un espacio métrico separable localmente compacto K y la σ -álgebra \mathcal{B} de todos los conjuntos de Borel en K . Un punto ∂ es adjunto a K como un punto en el infinito si K no es compacto; y si K es compacto se dice que :*

$$K_{\partial} = K \cup \{\partial\},$$

$\mathcal{B}_{\partial} = \sigma$ -álgebra en K_{∂} generada por \mathcal{B}

2) *El espacio Ω de todos los mapeos $\omega : [0, \infty] \rightarrow K_{\partial}$ tal que $\omega(\infty) = \partial$ y que si $\omega(t) = \partial$ entonces $\omega(s) = \partial$ para toda $s \geq t$ se dice que ω_{∂} es el mapeo constante $\omega(t) = \partial$ para toda $t \in [0, \infty]$.*

3) *Para toda $t \in [0, \infty]$, el mapa coordenado X_t definido por $X_t = \omega(t)$, $\omega \in \Omega$.*

4) *Para toda $t \in [0, \infty]$, un mapeo $\phi_t : \Omega \rightarrow \Omega$ con $\phi_t \omega(s) = \omega(t+s)$, $\omega \in \Omega$.*

Cabe mencionar que $\phi_{\infty} \omega = \omega_{\partial}$ y $X_t \circ \phi_s = X_{t+s}$ para toda $s, t \in [0, \infty]$.

5) *Una σ -álgebra \mathcal{F} en Ω y una familia creciente $\{\mathcal{F}_t\}_{0 \leq t \leq \infty}$ de sub- σ -álgebras de \mathcal{F}*

6) *Para toda $X \in K_{\partial}$, una medida de probabilidad P_X en (Ω, \mathcal{F}) .*

Se dice que estos elementos definen un proceso de Markov temporalmente homogéneo $\mathcal{X} = (X_t, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, P_X)$ si se satisfacen las siguientes condiciones:

(i) *Para todo $0 \leq t < \infty$ la función X_t es $\mathcal{F}_t/\mathcal{B}$ medible lo cual significa que:*

$$\{X_t \in E\} \in \mathcal{F}_t \text{ para toda } E \in \mathcal{B}_{\partial}$$

(ii) *Para todo $0 \leq t < \infty$ y $E \in \mathcal{B}$ la función*

$$p_t(X, E) = P_X\{X_t \in E\}$$

es una función Borel medible de $X \in K$.

(iii) *$P_X\{\omega \in \Omega; X_0(\omega) = X\} = 1$ para toda $X \in K_{\partial}$.*

(iv) *Para toda $t, h \in [0, \infty]$, $X \in K_{\partial}$ y $E \in \mathcal{B}_{\partial}$ se tiene que:*

$$P_X\{X_{t+h} \in E | \mathcal{F}_t\} = p_h(X_t, E)$$

de forma equivalente

$$P_X(A \cap \{X_{t+h} \in E\}) = \int_A p_h(X_t(\omega), E) dP_X(\omega) \quad A \in \mathcal{F}_t$$

En este contexto el término proceso de Markov significa una familia de procesos de Markov sobre $(\Omega, \mathcal{F}, P_X)$ con respecto a $\{\mathcal{F}_t\}$ es decir un proceso de Markov para cada medida P_X correspondiente a todas las posibles posiciones iniciales $X \in K$.

El valor $P_X(A)$, con $A \in \mathcal{F}$ puede ser interpretado como la probabilidad del evento A bajo la condición de que una partícula inicia en la posición X ; por lo tanto $p_t(X, E)$ expresa la probabilidad de la transición de una partícula que inicia en la posición X y que sea encontrada en el conjunto E al tiempo t ; la función p_t es llamada la función de transición del proceso \mathcal{X} . La condición (iv) quiere decir que el comportamiento futuro de una partícula, conociendo su historia al tiempo t , es el mismo que el comportamiento de una partícula que empezando en $X_t(\omega)$ esto es que una partícula inicia de nuevo.

A.4. Función de Transición

Definición A.7 Sea K un espacio métrico separable, localmente compacto y \mathcal{B} la σ -álgebra de todos los conjuntos de Borel en K . Una función $p_t(X, E)$ definida para toda $t \geq 0$, $X \in K$ y $E \in \mathcal{B}$ es llamada una función de transición de Markov temporalmente homogénea en K si satisface las siguientes condiciones:

- (a) $p_t(X, \cdot)$ es una medida en \mathcal{B} y $p_t(X, K) \leq 1$ para toda $t \geq 0$ y $X \in K$
- (b) $p_t(\cdot, E)$ es una función Borel medible para toda $t \geq 0$ y $E \in \mathcal{B}$
- (c) $p_0(X, \{X\}) = 1$ para toda $X \in K$
- (d) Para cualquier $t, s \geq 0$ se tiene que :

$$p_{t+s}(X, E) = \int_K p_t(X, dY)p_s(Y, E)$$

Teorema A.1 Para todo proceso de Markov, la función p_t , definida en A.7 en la propiedad (ii) es una función de transición de Markov, así mismo toda función de transición de Markov corresponde a un proceso de Markov.

Definición A.8 Una función de transición de Markov p_t es llamada una función de Feller si:

$$T_t f(X) = \int_K p_t(X, dY)f(Y)$$

es una función continua de $X \in K$ a lo cual se le conoce como propiedad de Feller, lo que equivale a decir que el espacio $C(K)$ es un sub espacio invariante de $B(K)$ para los operadores T_t y se dice que p_t es una función del espacio $C_0(K)$

Definición A.9 Se dice que un proceso $\mathcal{X} = (X_t, \mathcal{F}, \mathcal{F}_t, P_x)$ es progresivamente medible si, para toda $t \in [0, T]$ el mapeo $\Phi_t : [0, t] \times \Omega \rightarrow K_\partial$ es $\mathcal{B}_{[0, t]} \times \mathcal{B}_\partial / \mathcal{F}_t$ medible para toda $t \in [0, \infty]$ lo cual se cumple si se tiene que

$$\{\Phi \in E\} = \Phi_t^{-1}(E) \in \mathcal{B}_{[0, t]} \times \mathcal{F}_t \text{ para toda } E \in \mathcal{B}$$

Si \mathcal{X} es progresivamente medible y τ es un tiempo de parado, entonces el mapeo $X_t : \omega \rightarrow X_{\tau(\omega)}$ es $\mathcal{F}_t/\mathcal{B}_\partial$ -medible.

Un tiempo de parado es un mapeo $\tau : \Omega \rightarrow [0, \infty]$ si satisface

$$\{\tau \leq t\} \in \mathcal{F}_t$$

Teorema A.2 Sea K un espacio métrico, separable, localmente compacto y p_t una función normal de transición en K (i) Suponga que se satisfacen las siguientes condiciones :

(L) Para toda $s > 0$ y todo compacto $E \subset K$ se tiene que

$$\lim_{X \rightarrow \partial} \sup_{0 \leq t \leq X} p_t(X, E) = 0$$

(M) Para todo $\epsilon > 0$ y todo compacto $E \subset K$ se tiene que

$$\lim_{X \downarrow 0} \sup_{X \in E} p_t(X, K \setminus U_\epsilon(X)) = 0$$

donde

$U_\epsilon(X) = \{Y \in K; \rho(Y, X) < \epsilon\}$ es una vecindad de X .

Teorema A.3 Todo proceso de Markov continuo derecho cuya función de transición tiene la propiedad C_0 es un proceso fuerte de Markov.

Teorema A.4 Toda función de transición C_0 estocasticamente uniformemente continua que satisface la condición (L) del teorema 2.2 es la función de transición de un proceso fuerte de Markov.

Apéndice B

Coeficientes de Clebsch-Gordan

En cada espacio $\mathcal{E}(j_1, j_2)$, los eigenvectores de \mathbf{J}^2 y J_z son combinaciones lineales de vectores de la base $\{|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle\}$, es decir

$$|J, M\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} |j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle \quad (\text{B.1})$$

donde $|J, M\rangle$ son los eigenvectores de \mathbf{J}^2 y J_z .

Los coeficientes $\langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle$ de estas expansiones, se conocen como los coeficientes de Clebsch-Gordan, estos coeficientes tienen valores reales siempre, y son distintos de cero si

$$M = m_1 + m_2 \quad (\text{B.2})$$

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2 \quad (\text{B.3})$$

Los vectores $|J, M\rangle$ también forman una base ortonormal del espacio $\mathcal{E}(j_1, j_2)$, esto se puede expresar de la siguiente manera

$$|j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \sum_{\mathbf{J}=j_1-j_2}^{j_1+j_2} \sum_{\mathbf{M}=-J}^J |J, M\rangle \langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle \quad (\text{B.4})$$

Se mencionó que los coeficientes de Clebsch-Gordan deben ser reales, por lo que los productos escalares cumplen la siguiente propiedad

$$\langle J, M | j_1, j_2; m_1, m_2\rangle = \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M\rangle \quad (\text{B.5})$$

B.1. Relaciones de ortonormalidad

Los coeficientes de Clebsch-Gordan cumplen con las siguientes relaciones de ortonormalidad

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J', M' \rangle = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \quad (\text{B.6})$$

$$\sum_{\mathbf{J}=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{\mathbf{M}=-J}^J \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M \rangle \langle J, M | j_1, j_2; m'_1, m'_2 \rangle = \delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2} \quad (\text{B.7})$$

B.2. Relaciones de recurrencia

Los coeficientes de Clebsch-Gordan cumplen con las siguientes relaciones de recurrencia

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M-1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M-1 \rangle = \\ & \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)} \langle j_1, j_2; m_1+1, m_2 | J, M \rangle \\ & + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2+1 | J, M \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned} & \sqrt{J(J+1) - M(M+1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2 | J, M+1 \rangle = \\ & \sqrt{j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)} \langle j_1, j_2; m_1-1, m_2 | J, M \rangle \\ & + \sqrt{j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)} \langle j_1, j_2; m_1, m_2-1 | J, M \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Físicamente los coeficientes de Clebsch Gordan permiten descomponer un estado con una determinada base y una determinada representación, en una suma de estados en otra representación que pueda ser más útil, especialmente en el caso de estados en una determinada representación irreducible.

Apéndice C

Efecto espín Hall

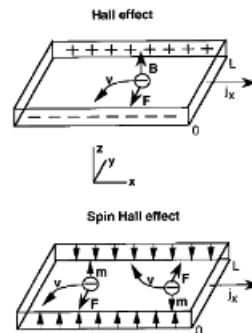
El efecto espín Hall es un fenómeno de transporte, que consiste en la aparición de acumulación de espines en las superficies laterales de una muestra conductora, los signos de las direcciones de los espines son opuestos en fronteras opuestas.

Es de naturaleza similar al efecto Hall clásico donde cargas de signos opuestos aparecen en superficies laterales opuestas. Sin embargo no se requiere de un campo magnético para la aparición del efecto espín Hall.

Experimentalmente puede observarse en semiconductores. El origen del efecto es la interacción espín órbita que lleva al acoplamiento entre una corriente eléctrica convencional y una corriente de espines, es decir, una corriente eléctrica induce una corriente transversal de espines y viceversa.

El efecto espín Hall inverso, consiste en una corriente eléctrica inducida por un flujo de espines debido a una polarización de espines y recientemente se ha demostrado que no solo ocurre en semiconductores sino también en metales.

El efecto espín Hall puede utilizarse para manipular los espines de los electrones eléctricamente.[42]



Comparación entre el efecto Hall clásico y efecto espín Hall.

Apéndice D

Algoritmo computacional utilizado

```
clear all
%funciones definidas para el cálculo de factores de desmagnetización
función=inline('((3e-3-y).*(0.000000075 -z))./((0.003-x).*sqrt((0.003-x).^2+
(0.003-y).^2+(0.000000075 -z).^2))');
funcion1=inline('((0.003-x)*(0.000000075 -z))./((0.003-y).*sqrt((0.003-x)^2+
(0.003-y)^2+(0.000000075 -z)^2))');
funcion2=inline('((0.003-x)*(0.003-y))./((0.000000075 -z).*sqrt((0.003-x)^2+
(0.003-y)^2+(0.000000075 -z)^2))');
funcionxy=inline('(0.000000075 -z)+sqrt((0.003-x)^2+(0.003-y)^2+
(0.000000075 -z)^2)');
funcionxz=inline('(0.003-y)+sqrt((0.003-x)^2+(0.003-y)^2+(0.000000075 -z)^2)');
funcionyz=inline('(0.000000075 -z)+sqrt((0.003-x)^2+(0.003-y)^2+
(0.000000075 -z)^2)');
J=input('Introduzca el valor del momento angular'); Tc=input('Introduzca el valor
de la temperatura de Curie')
H=input('De el valor en Teslas del campo aplicado')
T=input('introduzca el valor de la temperatura del borde mas bajo');
%definicion función de Brillouin y su derivada
bri=@(J,Tc,H,B,T) B-((2*J+1)/(2*J)).*coth(((2*J+1)/(2*J)).*((2*J*9.274e-24*H)./(1.381e-
23.*T)+(3*Tc*J.*B)./(T.*(J+1))))+(1/(2*J)).*coth(((1)/(2*J)).*((2*J*9.274e-24*H)./(1.381e-
23.*T)+(3*Tc*J.*B)./(T.*(J+1)))));
deri=@(J,Tc,H,B,T) 1+((3*Tc*(J))./(T.*(J+1))).*((2*J+1)/(2*J)).^2.*(csch(((2*J+1)/(2*J)).*((J*2*9.274e-
24*H)./(1.381e-23.*T)+(3*Tc*J.*B)./(T.*(J+1))))).^2
-((3*Tc*(J))./(T.*(J+1))).*((1/(2*J)).^2.*(csch(((1)/(2*J)).*((2*J*9.274e-24*H)./(1.381e-
23.*T)+(3*Tc*J.*B)./(T.*(J+1))))).^2);
x=-0.00294
y=-0.00294
z=0.0000000375
funcion3=función(x,y,z);
funcion4=función(-x,y,z);
funcion5=función(x,-y,z);
```

```

funcion6=función(x,y,-z);
funcion7=función(-x,-y,z);
funcion8=función(x,-y,-z);
funcion9=función(-x,y,-z);
funcion10=función(-x,-y,-z);
funcion11=funcion1(x,y,z);
funcion12=funcion1(-x,y,z);
funcion13=funcion1(x,-y,z);
funcion14=funcion1(x,y,-z);
funcion15=funcion1(-x,-y,z);
funcion16=funcion1(x,-y,-z);
funcion17=funcion1(-x,y,-z);
funcion18=funcion1(-x,-y,-z);
funcion19=funcion2(x,y,z);
funcion20=funcion2(-x,y,z);
funcion21=funcion2(x,-y,z);
funcion22=funcion2(x,y,-z);
funcion23=funcion2(-x,-y,z);
funcion24=funcion2(x,-y,-z);
funcion25=funcion2(-x,y,-z);
funcion26=funcion2(-x,-y,-z);
funcion27=funcionxy(x,y,z);
funcion28=funcionxy(-x,y,z);
funcion29=funcionxy(x,-y,z);
funcion30=funcionxy(x,y,-z);
funcion31=funcionxy(-x,-y,z);
funcion32=funcionxy(x,-y,-z);
funcion33=funcionxy(-x,y,-z);
funcion34=funcionxy(-x,-y,-z);
funcion35=funcionxz(x,y,z);
funcion36=funcionxz(-x,y,z);
funcion37=funcionxz(x,-y,z);
funcion38=funcionxz(x,y,-z);
funcion39=funcionxz(-x,-y,z);
funcion40=funcionxz(x,-y,-z);
funcion41=funcionxz(-x,y,-z);
funcion42=funcionxz(-x,-y,-z);
funcion43=funcionyz(x,y,z);
funcion44=funcionyz(-x,y,z);
funcion45=funcionyz(x,-y,z);
funcion46=funcionyz(x,y,-z);
funcion47=funcionyz(-x,-y,z);
funcion48=funcionyz(x,-y,-z);
funcion49=funcionyz(-x,y,-z);
funcion50=funcionyz(-x,-y,-z);
Nxx=(1/(4*pi))*(atan(funcion3)+atan(funcion4)+atan(funcion5)+atan(funcion6)+
atan(funcion7)+atan(funcion8)+atan(funcion9)+atan(funcion10));
Nyy=(1/(4*pi))*(atan(funcion11)+atan(funcion12)+atan(funcion13)+
atan(funcion14)+atan(funcion15)+atan(funcion16)+atan(funcion17)+atan(funcion18));
Nzz=(1/(4*pi))*(atan(funcion19)+atan(funcion20)+atan(funcion21)+

```

```

atan(funcion22)+atan(funcion23)+atan(funcion24)+atan(funcion25)+atan(funcion26));
Nxy=(-1/(4*pi))*log((funcion27*funcion31*funcion32*funcion33)/(funcion29*funcion28*funcion30*funcion34));
Nxz=(-1/(4*pi))*log((funcion35*funcion39*funcion40*funcion41)/(funcion37*funcion36*funcion38*funcion42));
Nyz=(-1/(4*pi))*log((funcion42*funcion46*funcion47*funcion48)/(funcion44*funcion43*funcion45*funcion50));
Nyx=Nxy;
Nzy=Nyz;
Nzx=Nxz;
nxx(1,1)=Nxx
nyy(1,1)=Nyy;
nzz(1,1)=Nzz;
nxy(1,1)=Nxy;
nxz(1,1)=Nxz;
nyz(1,1)=Nyz;
nyx(1,1)=nxy(1);
nzy(1,1)=nyz(1);
nzx(1,1)=nxz(1);
T(1)=T;
%Cálculo de la función de Brillouin se usa el metodo de Newton
B=1;
for j=1:100
B=B-(bri(J,Tc,H,B,T(1))/deri(J,Tc,H,B,T(1)));
end
A(1)=B
%Cálculo de la magnetización y campo de desmagnetización
Mag(1)=(3.83e24*J*9.274e-24*5172).*A(1)
h(1)=-nxx(1,1).*Mag(1);
for q=1:49
Y=-0.00294+(q-1)*0.00012;
for i=1:49
x=-0.00294+i*0.00012;
y=Y;
z=0.0000000375;
funcion3=función(x,y,z);
funcion4=función(-x,y,z);
funcion5=función(x,-y,z);
funcion6=función(x,y,-z);
funcion7=función(-x,-y,z);
funcion8=función(x,-y,-z);
funcion9=función(-x,y,-z);
funcion10=función(-x,-y,-z);
funcion11=funcion1(x,y,z);
funcion12=funcion1(-x,y,z);
funcion13=funcion1(x,-y,z);
funcion14=funcion1(x,y,-z);
funcion15=funcion1(-x,-y,z);
funcion16=funcion1(x,-y,-z);
funcion17=funcion1(-x,y,-z);
funcion18=funcion1(-x,-y,-z);
funcion19=funcion2(x,y,z);
funcion20=funcion2(-x,y,z);

```

```

funcion21=funcion2(x,-y,z);
funcion22=funcion2(x,y,-z);
funcion23=funcion2(-x,-y,z);
funcion24=funcion2(x,-y,-z);
funcion25=funcion2(-x,y,-z);
funcion26=funcion2(-x,-y,-z);
funcion27=funcionxy(x,y,z);
funcion28=funcionxy(-x,y,z);
funcion29=funcionxy(x,-y,z);
funcion30=funcionxy(x,y,-z);
funcion31=funcionxy(-x,-y,z);
funcion32=funcionxy(x,-y,-z);
funcion33=funcionxy(-x,y,-z);
funcion34=funcionxy(-x,-y,-z);
funcion35=funcionxz(x,y,z);
funcion36=funcionxz(-x,y,z);
funcion37=funcionxz(x,-y,z);
funcion38=funcionxz(x,y,-z);
funcion39=funcionxz(-x,-y,z);
funcion40=funcionxz(x,-y,-z);
funcion41=funcionxz(-x,y,-z);
funcion42=funcionxz(-x,-y,-z);
funcion43=funcionyz(x,y,z);
funcion44=funcionyz(-x,y,z);
funcion45=funcionyz(x,-y,z);
funcion46=funcionyz(x,y,-z);
funcion47=funcionyz(-x,-y,z);
funcion48=funcionyz(x,-y,-z);
funcion49=funcionyz(-x,y,-z);
funcion50=funcionyz(-x,-y,-z);
Nxx=(1/(4*pi))*(atan(funcion3)+atan(funcion4)+atan(funcion5)+atan(funcion6)+
atan(funcion7)+atan(funcion8)+atan(funcion9)+atan(funcion10));
Nyy=(1/(4*pi))*(atan(funcion11)+atan(funcion12)+atan(funcion13)+atan(funcion14)
+atan(funcion15)+atan(funcion16)+atan(funcion17)+atan(funcion18));
Nzz=(1/(4*pi))*(atan(funcion19)+atan(funcion20)+atan(funcion21)+atan(funcion22)+
atan(funcion23)+atan(funcion24)+atan(funcion25)+atan(funcion26));
Nxy=(-1/(4*pi))*log((funcion27*funcion31*funcion32*funcion33)/(funcion29*funcion28*funcion30*funcion34));
Nxz=(-1/(4*pi))*log((funcion35*funcion39*funcion40*funcion41)/(funcion37*funcion36*funcion38*funcion42));
Nyz=(-1/(4*pi))*log((funcion42*funcion46*funcion47*funcion48)/(funcion44*funcion43*funcion45*funcion50));
Nyx=Nxy;
Nzy=Nyz;
Nzx=Nxz;
nxx(q,i+1)=Nxx;
nyy(q,i+1)=Nyy;
nzz(q,i+1)=Nzz;
nxy(q,i+1)=Nxy;
nxz(q,i+1)=Nxz;
nyz(q,i+1)=Nyz;
nyx(q,i+1)=nxy(i+1);
nzy(q,i+1)=nyz(i+1);

```

```

nzx(q,i+1)=nxz(i+1);
Traza=Nxx+Nyy+Nzz;
end
end
x(1)=-0.00294
%Calculo de la función de Brillouin con variación de la temperatura
for i=1:49
x(i+1)=-0.00294+i*0.00012
T(i+1)=T(i)+3e3.*(x(i+1)+0.003)
B=10;
for j=1:100
B=B-(bri(J,Tc,H,B,T(i+1))./deri(J,Tc,H,B,T(i+1)));
end
A(i+1)=B;
end
for
K=1:49
Mag(K+1)=(3.83e24*J*9.274e-24*5172).*A(K+1);
h(K+1)=-nxx(1,K+1).*Mag4(K+1);
end
W=[x;A];
L=[x;h];
hold off plot(x,A)
ylabel('B')
xlabel('x (m)')
hold off
figure
plot(x,h)
ylabel('H (A/m)')
xlabel('x (m)')
fid=fopen('resultado.csv','w');
fprintf(fid,'%0.6f %0.6f \n',W);
fid=fopen('resultadoscampo.csv','w');
fprintf(fid,'%0.6f %0.6f \n',L);

```


Apéndice E

Tablas de datos

B	x[m]	T[K]
-0.00294	1	30.00
-0.00282	1	30.54
-0.00270	1	31.44
-0.00258	1	32.70
-0.00246	1	34.32
-0.00234	0.999999	36.30
-0.00222	0.999998	38.64
-0.00210	0.999996	41.34
-0.00198	0.999991	44.40
-0.00186	0.999980	47.82
-0.00174	0.999960	51.60
-0.00162	0.999920	55.74
-0.00150	0.999848	60.24
-0.00138	0.999727	65.10
-0.00126	0.999530	70.32
-0.00114	0.999226	75.90
-0.00102	0.998777	81.84
-0.00090	0.998140	88.14
-0.00078	0.997269	94.80
-0.00066	0.996114	101.82
-0.00054	0.994627	109.20
-0.00042	0.992760	116.94
-0.00030	0.990465	125.04
-0.00018	0.987697	133.50
-0.00006	0.984414	142.32
0.00006	0.980576	151.50
0.00018	0.976143	161.04
0.00030	0.971077	170.94

0.00042	0.965339	181.20
0.00054	0.958889	191.82
0.00066	0.951684	202.80
0.00078	0.943677	214.14
0.00090	0.934817	225.84
0.00102	0.925045	237.90
0.00114	0.914292	250.32
0.00126	0.902481	263.10
0.00138	0.889521	276.24
0.00150	0.875307	289.74
0.00162	0.859714	303.60
0.00174	0.842599	317.82
0.00186	0.823792	332.40
0.00198	0.803090	347.34
0.00210	0.780253	362.64
0.00222	0.754988	378.30
0.00234	0.726936	394.32
0.00246	0.695644	410.70
0.00258	0.660529	427.44
0.00270	0.620812	444.54
0.00282	0.575408	462.00
0.00294	0.522709	479.82

Tabla de la función de Brillouin y posición con temperatura de la celda más baja 30 K y campo aplicado de $0.5 T$

$H \frac{A}{m}$	$x[m]$
-0.00294	-156.632174
-0.00282	-40.755613
-0.00270	-22.538176
-0.00258	-15.59261
-0.00246	-11.981653
-0.00234	-9.782375
-0.00222	-8.308473
-0.00210	7.255823
-0.00198	-6.469449
-0.00186	-5.862241
-0.00174	-5.381542
-0.00162	-4.993681
-0.00150	-4.676143
-0.00138	-4.413315
-0.00126	-4.194041

-0.00114	-4.010146
-0.00102	-3.855516
-0.00090	-3.7255
-0.00078	-3.616517
-0.00066	-3.525786
-0.00054	-3.451137
-0.00042	-3.39088
-0.00030	-3.343711
-0.00018	-3.30864
-0.00006	-3.284945
0.000060	-3.272137
0.000180	-3.269936
0.000300	-3.278260
0.000420	-3.297221
0.000540	-3.327132
0.000660	-3.368523
0.000780	-3.422173
0.000900	-3.489153
0.001020	-3.570894
0.001140	-3.669287
0.001260	-3.786825
0.001380	-3.926810
0.001500	-4.093679
0.001620	-4.293482
0.001740	-4.534666
0.001860	-4.829361
0.001980	-5.195599
0.002100	-5.661404
0.002220	-6.272813
0.002340	-7.111167
0.002460	-8.334966
0.002580	-10.299368
0.002700	-13.991968
0.002820	-23.451090
0.002940	-81.873081

Tabla de el campo de desmagnetización en cada posición de la placa de YIG para temperatura del borde mas bajo 30 K campo aplicado 0.5 T

B	x[m]	T[K]
-0.00294	0.863865	300.00
-0.00282	0.863247	300.54
-0.00270	0.862213	301.44
-0.00258	0.860758	302.70
-0.00246	0.858875	304.32
-0.00234	0.856554	306.30
-0.00222	0.853781	308.64
-0.00210	0.850544	311.34
-0.00198	0.846823	314.40
-0.00186	0.842599	317.82
-0.00174	0.837849	321.60
-0.00162	0.832547	325.74
-0.00150	0.826662	330.24
-0.00138	0.820161	335.10
-0.00126	0.813006	340.32
-0.00114	0.805152	345.90
-0.00102	0.796552	351.84
-0.00090	0.787151	358.14
-0.00078	0.776887	364.80
-0.00066	0.765688	371.82
-0.00054	0.753474	379.20
-0.00042	0.740153	386.94
-0.00030	0.725618	395.04
-0.00018	0.709746	403.50
-0.00006	0.692392	412.32
0.00006	0.673383	421.50
0.00018	0.652513	431.04
0.00030	0.629532	440.94
0.00042	0.604128	451.20
0.00054	0.575904	461.82
0.00066	0.544346	472.80
0.00078	0.508755	484.14
0.00090	0.468142	495.84
0.00102	0.421024	507.90
0.00114	0.364979	520.32
0.00126	0.295588	533.10
0.00138	0.203825	546.24
0.00150	0.089295	559.74
0.00162	0.037373	573.60
0.00174	0.022414	587.82
0.00186	0.015838	602.40
0.00198	0.012169	617.34

0.00210	0.009834	632.64
0.00222	0.008219	648.30
0.00234	0.007037	664.32
0.00246	0.006135	680.70
0.00258	0.005424	697.44
0.00270	0.004850	714.54
0.00282	0.004377	732.00
0.00294	0.003981	749.82

Tabla de la función de Brillouin y posición con temperatura de la celda más baja 300 K y campo aplicado de $0.5 T$

$H \frac{A}{m}$	$x[m]$
-0.002940	0.863865
-0.002820	0.863247
-0.002700	0.862213
-0.002580	0.860758
-0.002460	0.858875
-0.002340	0.856554
-0.002220	0.853781
-0.002100	0.850544
-0.001980	0.846823
-0.001860	0.842599
-0.001740	0.837849
-0.001620	0.832547
-0.001500	0.826662
-0.001380	0.820161
-0.001260	0.813006
-0.001140	0.805152
-0.001020	0.796552
-0.000900	0.787151
-0.000780	0.776887
-0.000660	0.765688
-0.000540	0.753474
-0.000420	0.740153
-0.000300	0.725618
-0.000180	0.709746
-0.000060	0.692392
0.000060	0.673383
0.000180	0.652513
0.000300	0.629532
0.000420	0.604128

0.000540	0.575904
0.000660	0.544346
0.000780	0.508755
0.000900	0.468142
0.001020	0.421024
0.001140	0.364979
0.001260	0.295588
0.001380	0.203825
0.001500	0.089295
0.001620	0.037373
0.001740	0.022414
0.001860	0.015838
0.001980	0.012169
0.002100	0.009834
0.002220	0.008219
0.002340	0.007037
0.002460	0.006135
0.002580	0.005424
0.002700	0.004850
0.002820	0.004377
0.002940	0.003981

Tabla de el campo de desmagnetización en cada posición de la placa de YIG para temperatura del borde mas bajo 300 K campo aplicado $0.5 T$

B	x[m]	T[K]
-0.00294	0.002258	900.00
-0.00282	0.002254	900.54
-0.00270	0.002248	901.44
-0.00258	0.002240	902.70
-0.00246	0.002230	904.32
-0.00234	0.002218	906.30
-0.00222	0.002203	908.64
-0.00210	0.002186	911.34
-0.00198	0.002168	914.40
-0.00186	0.002148	917.82
-0.00174	0.002126	921.60
-0.00162	0.002102	925.74
-0.00150	0.002077	930.24
-0.00138	0.002050	935.10
-0.00126	0.002023	940.32
-0.00114	0.001994	945.90

-0.00102	0.001964	951.84
-0.00090	0.001934	958.14
-0.00078	0.001903	964.80
-0.00066	0.001871	971.82
-0.00054	0.001838	979.20
-0.00042	0.001805	986.94
-0.00030	0.001772	995.04
-0.00018	0.001739	1003.50
-0.00006	0.001706	1012.32
0.00006	0.001672	1021.50
0.00018	0.001639	1031.04
0.00030	0.001606	1040.94
0.00042	0.001573	1051.20
0.00054	0.001540	1061.82
0.00066	0.001507	1072.80
0.00078	0.001475	1084.14
0.00090	0.001443	1095.84
0.00102	0.001412	1107.90
0.00114	0.001381	1120.32
0.00126	0.001351	1133.10
0.00138	0.001321	1146.24
0.00150	0.001291	1159.74
0.00162	0.001262	1173.60
0.00174	0.001234	1187.82
0.00186	0.001206	1202.40
0.00198	0.001179	1217.34
0.00210	0.001153	1232.64
0.00222	0.001127	1248.30
0.00234	0.001101	1264.32
0.00246	0.001077	1280.70
0.00258	0.001052	1297.44
0.00270	0.001029	1314.54
0.00282	0.001006	1332.00
0.00294	0.000983	1349.82

Tabla de la función de Brillouin y posición con temperatura de la celda más baja 900 K y campo aplicado de $0.5 T$

$H \frac{A}{m}$	x[m]
-0.00294	-0.353646
-0.00282	-0.091876
-0.00270	-0.050677
-0.00258	-0.034933
-0.00246	-0.026720
-0.00234	-0.021693
-0.00222	-0.018303
-0.00210	-0.015864
-0.00198	-0.014025
-0.00186	-0.012590
-0.00174	-0.011439
-0.00162	-0.010497
-0.00150	-0.009713
-0.00138	-0.009052
-0.00126	-0.008488
-0.00114	-0.008003
-0.00102	-0.007583
-0.00090	-0.007218
-0.00078	-0.006899
-0.00066	-0.006621
-0.00054	-0.006378
-0.00042	-0.006167
-0.0003	-0.005983
-0.00018	-0.005826
-0.00006	-0.005692
0.000060	-0.005580
0.000180	-0.005490
0.000300	-0.005421
0.000420	-0.005371
0.000540	-0.005343
0.000660	-0.005335
0.000780	-0.005349
0.000900	-0.005387
0.001020	-0.005450
0.001140	-0.005542
0.001260	-0.005667
0.001380	-0.005830
0.001500	-0.006039
0.001620	-0.006305
0.001740	-0.006642
0.001860	-0.007073
0.001980	-0.007630

0.002100	-0.008364
0.002220	-0.009362
0.002340	-0.010775
0.002460	-0.012900
0.002580	-0.016410
0.002700	-0.023187
0.002820	-0.040989
0.002940	-0.154007

Tabla de el campo de desmagnetización en cada posición de la placa de YIG para temperatura del borde mas bajo 300 K campo aplicado $0.5 T$

Bibliografía

- [1] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. . Žutić, “Semiconductor spintronics,” *Acta Physica Slovaca*, vol. 57, p. 565, 2007.
- [2] J. S. Moodera and P. Leclair, “A quantum leap,” *Nature Materials*, vol. 2, 2003.
- [3] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, M. D. S. v. M. J, M. L. Roukes, and D. M. T. A. Y. Chtchelkanova, “Spintronics: A spin based electronics vision for the future,” *Science*, vol. 16, 2001.
- [4] [Online]. Available: http://www.bbc.co.uk/bitesize/ks3/science/chemical_material_behaviour/behaviour_of_matter/revision/4/
- [5] [Online]. Available: [http://abyss.uoregon.edu/~sim\\$js/21st_century_science/lectures/lec27.html](http://abyss.uoregon.edu/~sim$js/21st_century_science/lectures/lec27.html)
- [6] J. F. Igor Žutić and S. das Sarma, “Spintronics: Fundamentals and applications,” *Rev.Mod.Phys*, vol. 76, pp. 323–409, 2004.
- [7] A. Beiser, *Concepts of Modern Physics*. New York, U.S.A: Pergamon Press, 2003.
- [8] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics Non-relativistic Theory*. New York, U.S.A: McGraw-Hill, 1991.
- [9] V. Zayets, “Spin and charge transport in materials with spin-dependent conductivity,” *PhysRevB*, vol. 86, 2012.
- [10] S. D. Sarma, “Spintronics,” *American Scientist*, vol. 89, 2001.
- [11] J. F. Gregg, “Spintronics a growing science,” *Nature Materials*, vol. 6, 2007.
- [12] R. E. Camley and J. Barnas, “Theory of giant magnetoresistance layered structures with antiferromagnetic coupling,” *Physical Review Letters*, vol. 63, 1989.
- [13] G. N. Logvinov, Y. G. Gurevich, and J. L. del Río Valdés, “New physical interpretation of thermoelectric cooling in semiconductor structures,” *Brazilian Journal of Physics*, vol. 36, 2006.

- [14] G. N. Logvinov, J. L. del Río Valdés, and Y. G. Gurevich, “Teoría lineal del enfriamiento termoeléctrico de peltier,” *Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Materiales*, vol. 18, 2005.
- [15] Junping Shi. [Online]. Available: [http://www.resnet.wm.edu/~sim\\$jxshix/math490/](http://www.resnet.wm.edu/~sim$jxshix/math490/)
- [16] S.R.Srinivasa Varadhan. [Online]. Available: <http://www.math.nyu.edu/faculty/varadhan/processes/>
- [17] L. Rincón, *Introducción a los procesos estocásticos*. México D.F.: Prensas Ciencias, 2012.
- [18] María Carmen Ruiz Abellón. [Online]. Available: [http://www.dmae.upct.es/~sim\\$mcr Ruiz/Telem06/Teoria/](http://www.dmae.upct.es/~sim$mcr Ruiz/Telem06/Teoria/)
- [19] A. J. Weir, *General integration and measure*. New York, U.S.A: Cambridge University Press, 1974.
- [20] K. Taira, *Diffusion processes and Partial Differential Equations*. San Diego CA: Academic Press inc., 1988.
- [21] R. Srinivasan, “Spintronics,” *Resonance Journal of science education*, vol. 10, 2005.
- [22] V. A. Ivanov, T. G. Aminov, a V. M. Novotortsev, and V. T. Kalinnikov, “Spintronics and spintronics materials,” *Russian chemical bulletin*, vol. 53, pp. 2357–2405, 2004.
- [23] I. Martin, “Spin-drift transport and its aplicaciones,” *PhysRevB*, vol. 67, 2003.
- [24] S. Hershfield and H. L. Zhao, “Charge and spin transport through a metallic ferromagnetic-paramagnetic-ferromagnetic junction,” *PhysRevB*, vol. 56, 1997.
- [25] M. J. Klein, “On a degeneracy theorem of Kramers,” *Am. J. Phys.*, vol. 20, 1952.
- [26] W. Z. P. Pfeffer, “Average forces in bound and resonant quantum states,” *PhysRevB*, vol. 64, 2001.
- [27] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and hole Systems*. New York, U.S.A: Springer, 2003.
- [28] R. Enderlein and N. J. M. Horing, *Fundamentals of Semiconductor Physics*. Singapore: World Scientific, 1997.
- [29] E. I. Rashba, “Properties of a 2d electron gas with lifted spectral degeneracy,” *Physica E*, vol. 34, 2006.

- [30] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, "Spin orbit coupling and spin transport," *Physica E*, vol. 34, 2006.
- [31] M. Wu, J. Jiang, and M. Weng, "Spin dynamics in semiconductors," *Physics Reports*, vol. 493, 2010.
- [32] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*. New York: John Wiley and sons, 1997.
- [33] M. Getzlaff, *Fundamentals of magnetism*. Berlin: Springer, 2008.
- [34] D. D. Stancil and A. Prabhakar, *Spin waves theory and application*. New York, U.S.A: Springer, 1991.
- [35] Y. Tserkovnyak, A. Brataas, G. E. W. Bauer, and B. I. Halperin, "Nonlocal magnetization dynamics un ferromagnets," *RevModPhys*, vol. 77, 2005.
- [36] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*. New York, U.S.A: McGraw-Hill, 1991.
- [37] M. Schreier, *Spatially resolved spin Seebeck experiments*, 2012.
- [38] A. Kehlberger, R. Röser, G. Jakob, U. Ritzmann, D. Hinzke, U. Nowak, M. C. Onbasli, D. H. Kim, C. A. Ross, M. B. Jungfleisch, B. Hillebrands, and M. Kläui, "Determination of the origin of the spin seebeck effect - bulk vs. interface effects."
- [39] K. Uchida, S. Takahashi, J. Ieda, K. Harii, K. Ikeda, W. Koshibae, S. Maekawa, and E. Saitoh, "Phenomenological analysis for spin-seebeck effect in metallic magnets," *Journal of applied Physics.*, vol. 105, 2009.
- [40] K. Uchida, T. Ota, K. Harii, S. Takahashi, S. Maekawa, Fujikawa, and E. Saitoh, "Spin-seebeck effects in ni81fe19=pt films," *Solid State Communications*, vol. 105, 2009.
- [41] A. Smith, K. K. Nielsen, D. V. Christensen, C. R. H. Bahl, and J. Hattel, "The demagnetizing field of a nonuniform rectangular prism," *Solid State Communications*, vol. 105, 2009.
- [42] J. E. Hirsch, "Spin hall effect," *Phys. Rev Lett.*, vol. 83, 1999.