



## UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

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

DINÁMICA DE PAQUETES DE ONDA ELECTRÓNICOS Y EFECTO *ZITTERBEWEGUNG* EN  
NANOESTRUCTURAS

QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRA EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

PRESENTA:  
MARYSOL OCHOA FAJARDO

TUTOR PRINCIPAL  
Dr. FRANCISCO MIRELES HIGUERA  
*CNyN-UNAM*

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR

Dr. Ernesto Cota Araiza  
CNyN-UNAM

Dr. Manuel Herrera Zaldivar  
CNyN-UNAM

ENSENADA, JUNIO, 2015



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

**Dinámica de paquetes de onda electrónicos y  
efecto *Zitterbewegung* en nanoestructuras**

**T E S I S**

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**Maestría en Ciencia e Ingeniería de Materiales**

EN EL POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

*P R E S E N T A*

**Lic. Fís. Marysol Ochoa Fajardo**

Tutor: Dr. Francisco Mireles Higuera

*CNyN-UNAM*

Ensenada B.C., Junio 2015

© 2015

*Lic. Fís. Marysol Ochoa Fajardo*

*PCeIM-CNyN*

*UNAM*

*Por Mi Raza Hablará el Espíritu*

Dinámica de paquetes de onda electrónicos y  
efecto *Zitterbewegung* en nanoestructuras

POR

*Lic. Fís. MARYSOL OCHOA FAJARDO*

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

MAESTRO EN CIENCIA

E INGENIERÍA DE MATERIALES

---

Dr. Francisco Mireles Higuera  
*Investigador del Departamento de Física Teórica del  
Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM*

OCHOA FAJARDO, MARYSOL, tesis de maestría. Junio, 2015. PCeIM-UNAM

Dinámica de paquetes de onda electrónicos y efecto *Zitterbewegung* en nanoestructuras.

(104 pp.)

## Resumen

Se realizó una investigación teórica y numérica del fenómeno del *Zitterbewegung* en nanoestructuras semiconductoras. En particular se hizo un estudio de la dinámica de paquetes de onda electrónicos en gases electrónicos bidimensionales confinados en nanoestructuras semiconductoras y que experimentan fuerte acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus. Nuestros estudios revelan que la presencia del acoplamiento espín-órbita tiene una influencia cuantitativa importante en la evolución dinámica y distribución espacial de los paquetes de onda electrónicos en tales sistemas. Específicamente para el caso en el que sólo se tiene acoplamiento espín-órbita de Rashba (o sólo con Dresselhaus), encontramos que el paquete de onda inicial se desdobra en dos paquetes axialmente simétricos y gaussianos pero con velocidades de grupo distintas, separándose en dirección perpendicular a la dirección de propagación inicial. Este desdoblamiento aparece debido a la presencia de dos bandas en el espectro del electrón correspondientes a los estados estacionarios con diferente helicidad. Se muestra que el valor esperado del operador de posición como función del tiempo es acompañado por oscilaciones del centroide del paquete en dirección perpendicular, *i.e.* desarrolla el efecto *Zitterbewegung*. Se observa una fuerte dependencia del *Zitterbewegung* con la interacción de acoplamiento espín-órbita de Rashba. Se realizó también el estudio incluyendo las contribuciones de los acoplamientos simultáneos de Rashba y Dresselhaus, donde la interacción de acoplamiento de Rashba es mayor que la interacción espín-órbita de Dresselhaus. Encontramos que el paquete de ondas gaussiano se separa en dos partes simétricas con diferente dirección de la velocidad como en el caso sólo con Rashba, pero con la misma amplitud de densidad de probabilidad. Sin embargo no se observa la simetría circular como es el caso con la contribución sólo de Rashba, si no que en este caso se exhibe claramente dos elipses concéntricas rotadas para la densidad de probabilidad. Nuestros estudios del *Zitterbewegung*, polarización de espín y dinámica de paquetes de onda electrónicos podrían ser de gran interés para la simulación e implementación práctica de nanodispositivos espintrónicos basados en la manipulación eléctrica del acoplamiento espín-órbita.

Aprobado \_\_\_\_\_  
Dr. Francisco Mireles Higuera  
Director de Tesis

# Prefacio

En 1930 uno de los fundadores de la Mecánica Cuántica, el austríaco Erwin Schrödinger, predice el fenómeno del *Zitterbewegung* [1]. Tal efecto está asociado a las partículas cuánticas moviéndose a velocidades cercanas a la velocidad de la luz, y se manifiesta como un violento movimiento tembloroso de estas partículas cuánticas a medida que se desplazan. La palabra *Zitterbewegung* consiste de la unión de los términos, *Zitter*, que significa “tembloroso” y *bewegung* que significa “movimiento” en el idioma alemán [1]. La predicción de Schrödinger está basada, irónicamente, en la ecuación de Dirac, desarrollada por el físico británico Paul A. Dirac en 1928 y que incorpora la relatividad especial a la Mecánica Cuántica.<sup>1</sup>

Como notó Schrödinger originalmente, de la teoría cuántica-relativista de Dirac, se desprende que en el movimiento de electrones libres relativistas, aparecen componentes altamente oscilatorias en la evolución temporal de sus observables físicas, tales como la posición, velocidad y momento angular de espín. Tal movimiento tembloroso es totalmente inesperado y contraintuitivo desde el punto de vista clásico, pues se

---

<sup>1</sup>La ecuación de Dirac fue derivada para obtener la generalización relativista de la propuesta de Schrödinger de la física cuántica.

presenta sin la presencia de fuerzas actuando sobre la partícula. El origen del *Zitterbewegung* estriba en la combinación de dos efectos: el primero en el principio de superposición cuántica, el cual le permite a los objetos cuánticos estar en dos estados o posiciones mutuamente exclusivas al mismo tiempo. La segunda es la existencia de la antimateria (*i.e.*, debido a la existencia de estados con energía negativa para toda partícula cuántica relativista). Así pues, el *Zitterbewegung* se presenta debido a la interferencia de los espinores con energía positiva y negativa soluciones a la ecuación de Dirac para la partícula libre. Además sólo ocurre cuando estas componentes tienen un traslape significativo en el espacio de posición y de momento, por lo que el efecto está ausente en la mayoría de las circunstancias. El efecto ha mostrado ser extremadamente elusivo de observarse en el laboratorio, y a la fecha (2015), aún no ha sido observado experimentalmente en física de altas energías. La razón en gran medida, es consecuencia de las extremas condiciones para que el efecto se produzca. Resulta que de acuerdo a la ecuación de Dirac para la partícula libre, las oscilaciones de *Zitterbewegung* asociadas tienen frecuencias del orden de  $\omega_{ZB} \simeq 10^{21}$ Hz, con longitudes de onda del orden de la longitud Compton ( $\lambda_C \simeq 10^{-12}$ m); condiciones físicas en efecto difíciles de conseguir simultáneamente en el laboratorio de manera controlada.

Sin embargo, un fenómeno análogo al *Zitterbewegung* de altas energías ha sido propuesto que puede observarse similarmente en sólidos cristalinos, [2, 3] en particular en semiconductores de brecha energética estrecha [4], nanotubos de carbón [5], capas de Grafeno [6], superconductores [7, 8], y más recientemente en condensados atómicos

de Bose-Einstein[11]. Todos estos sistemas están caracterizados por tener un espectro electrónico de excitación agrupados en dos bandas, separadas por una brecha energética diferente de cero, por lo que su espectro de energías es similar al espectro del Hamiltoniano de Dirac. Por ejemplo, un estudio teórico reciente [9] de sistemas electrónicos bidimensionales (2D) en heteroestructuras semiconductoras con inversión asimétrica estructural, muestra la presencia de un movimiento oscilatorio análogo al *Zitterbewegung* y que surge del desdoblamiento de espín del espectro electrónico. El desdoblamiento de espín correspondiente a la banda energética se desvanece cuando el momento  $p \rightarrow 0$ , formalmente análogo al espectro de Dirac para la partícula libre. Una situación similar ocurre para excitaciones electrónicas en material tipo bulto para una monocapa ideal de grafeno. [6]

Durante más de 80 años se ha debatido, inclusive, si el *Zitterbewegung* es un efecto real (observable) o algo artificial *–i.e.* visto como una mera solución matemática de la ecuación de Dirac sin conexión alguna con la realidad física—. No es sino hasta muy recientemente que el efecto *Zitterbewegung* fue observado por vez primera en finos experimentos realizados por Gerritsma y colaboradores (2010) usando iones atrapados ( $^{40}\text{Ca}^+$ ) con láseres [10]. Más recientemente, en 2013, LeBlanc y colaboradores realizaron experimentos donde reportan la observación del efecto *Zitterbewegung* en condensados de Bose-Einstein formados por nubes atómicas de  $^{87}\text{Rb}$  [11]. Ambos experimentos demostraron la existencia inequívoca del efecto *Zitterbewegung* en el laboratorio.

En este trabajo de tesis se realiza un análisis teórico y numérico sistemático del efecto

*Zitterbewegung* a través del estudio de la dinámica de paquetes de onda electrónicos en gases electrónicos bidimensionales confinados en nanoestructuras semiconductoras de brecha energética estrecha. Sistemas donde la interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus dictan el comportamiento del espectro energético y donde se ha predicho la presencia del *Zitterbewegung*.

La tesis está organizado de la siguiente forma: en el capítulo 1 se presenta la motivación que dio pie al desarrollo de esta tesis. Más adelante en el capítulo 2 se presenta la naturaleza del *Zitterbewegung* en sólidos. En el capítulo 3 se detalla la formulación de la interacción espín-órbita. En el capítulo 4 se revisará el origen cuántico-relativista del efecto del *Zitterbewegung* y su analogía en semiconductores. El modelo analítico basado en funciones de Green se describe en el capítulo 5. Asimismo, en el capítulo 6 se describe la metodología numérica empleada para resolver el problema de la dinámica de paquetes de onda en dos dimensiones en sistemas gobernados por la ecuación de Schrödinger con acoplamiento espín-órbita. El capítulo 7 expone los resultados y discusiones. Finalmente, en el capítulo 8 se presentan las conclusiones de la tesis. Con la intención de que esta tesis fuera autocontenida en lo posible, se agregaron 5 apéndices que contienen aspectos de crucial importancia para el desarrollo de esta tesis.

*Dedicada a la memoria de mi padre*

*y a mi familia*

# Agradecimientos

Quiero agradecer muy en especial a mi asesor de tesis el Dr. Francisco Mireles Higuera por haberme dado la oportunidad de trabajar con él, le agradezco también por la paciencia brindada en todo momento, en cada una de la extensas revisiones de la tesis que parecían ¡de nunca acabar!. Gracias por los valiosos conocimientos, comentarios y sugerencias, los cuales siempre fueron constructivos para el desarrollo de esta tesis. Por haberme guiado en el desarrollo de este trabajo y poder llegar a la culminación del mismo; y por supuesto, gracias por tu amistad.

A mis maestros, gracias por su tiempo, por su apoyo así como la sabiduría que me transmitieron en el desarrollo de mi formación profesional. Fue un privilegio tener como parte de mi comité tutorial a Dr. Ernesto Cota y Dr. Manuel Herrera, a quienes agradezco enormemente sus valiosas observaciones en este trabajo de tesis.

A los Drs. Armando Reyes Serrato, Francisco Mireles Higuera, Pedro Negrete Regagnon, Julio Sheinbaum Pardo y Rubén Cesar Villarreal Sánchez por su participación como sinodales en mi examen de grado.

Asimismo deseo agradecer también al posgrado de Ciencias e Ingeniería de la UNAM y al comité de posgrado por la paciencia y la oportunidad que me otorgaron para culminar mis estudios de maestría, al centro de Nanociencias y Nanotecnología de la

UNAM por sus instalaciones, al CONACYT por el apoyo financiero brindado para la realización de mi tesis de maestría y a la DGAPA-UNAM por su apoyo a través de los proyectos de investigación IN109911 e IN113807.

A mis amigos de toda la vida por el apoyo que siempre tendré de ellos y por su amistad durante ya tantos años. Pero el mayor agradecimiento de todos se lo debo a mi familia, en especial a mis padres, por ser un pilar fundamental en mi vida. De manera especial a Nicolas Debegue por compartir su vida conmigo y entenderme en este proceso de mi vida.

*Marysol Ochoa Fajardo.*

# Contenido

|  |           |
|--|-----------|
| Prefacio   | v         |
| Agradecimientos  | x         |
| <b>1 Introducción</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2 <i>Zitterbewegung</i> en sólidos</b>                        | <b>4</b>  |
| <b>3 Acoplamiento espín-órbita</b>                               | <b>10</b> |
| 3.1 Efecto Rashba y Dresselhaus . . . . .                        | 13        |
| <b>4 <i>Zitterbewegung</i>: descripción cuántico-relativista</b> | <b>22</b> |
| 4.1 Ecuación de Dirac . . . . .                                  | 22        |
| 4.2 Origen del <i>Zitterbewegung</i> . . . . .                   | 24        |
| <b>5 Dinámica: formalismo con funciones de Green</b>             | <b>30</b> |
| 5.1 Dinámica de paquetes de onda con Rashba . . . . .            | 30        |
| 5.2 Evolución temporal en 1D con Rashba . . . . .                | 32        |
| 5.2.1 Caso: acoplamiento Rashba débil . . . . .                  | 36        |

|          |   |           |
|----------|---|-----------|
| 5.2.2    | Caso: acoplamiento Rashba fuerte . . . . .                        | 36        |
| 5.3      | Oscilaciones de <i>Zitterbewegung</i> . . . . .                   | 36        |
| 5.4      | Evolución temporal de la densidad electrónica . . . . .           | 37        |
| <b>6</b> | <b>Modelo e implementación numérica</b>                           | <b>42</b> |
| 6.1      | Introducción . . . . .  | 42        |
| 6.2      | Modelo físico y metodología . . . . .                             | 44        |
| 6.3      | Implementación numérica: caso Rashba . . . . .                    | 47        |
| <b>7</b> | <b>Resultados y discusiones</b>                                   | <b>50</b> |
| 7.1      | Estado estacionario con interacción de Rashba . . . . .           | 50        |
| 7.1.1    | Dependencia de la intensidad de acoplamiento Rashba . . . . .     | 53        |
| 7.2      | Dinámica con Rashba ( $k_{0x} \neq 0$ y $k_{0y} = 0$ ) . . . . .  | 56        |
| 7.3      | Dinámica con Rashba ( $k_{0x} = k_{0y} \neq 0$ ) . . . . .        | 57        |
| 7.4      | Acoplamiento de Rashba y Dresselhaus . . . . .                    | 59        |
| 7.4.1    | Interacción de Rashba y Dresselhaus (caso estacionario) . . . . . | 59        |
| 7.4.2    | Dinámica con Rashba y Dresselhaus ( $k_{0y} = 0$ ) . . . . .      | 59        |
| 7.4.3    | Caso con acoplamiento $\alpha_R = \alpha_D$ . . . . .             | 61        |
| 7.5      | El <i>Zitterbewegung</i> . . . . .                                | 62        |
| <b>8</b> | <b>Conclusiones</b>   | <b>68</b> |
| <b>A</b> | <b>Ecuación de Dirac: propiedades</b>                             | <b>75</b> |
| <b>B</b> | <b>Condiciones iniciales y a la frontera</b>                      | <b>82</b> |

|  |           |
|--|-----------|
|  | xiv       |
| <b>C Modelo e implementación numérica</b>          | <b>84</b> |
| C.1 Implementación numérica: caso Rashba . . . . . | 84        |
| <b>D Álgebra de conmutadores</b>                   | <b>96</b> |
| <b>E Esquema de diferencias finitas</b>            | <b>98</b> |

# Lista de Figuras

2.1 Experimento: Simulación de la ecuación de Dirac. En la figura se muestra el valor esperado de la posición  $\langle \hat{X} \rangle$  respecto al tiempo para partículas con diferentes masas. La curva lineal (cuadrados) representa una partícula sin masa moviéndose a la velocidad de la luz. Desde la parte superior las otras curvas representan el incremento en el valor del término de la masa. Las líneas sólidas representan la solución numérica.

Gráfica tomada de la referencia de R. Gerritsma y colaboradores.[10]

7

- 2.2 Experimento: Observación directa del *Zitterbewegung* en un condensado de Bose-Einstein. En la figura se muestra esquemáticamente el sistema que se utilizó para el experimento. La gráfica a) muestra la geometría esquemática de los láseres , b) el diagrama de niveles para las transiciones Raman y c) dispersión de Dirac: las líneas puntadas muestra la relación de Dirac para partículas sin masa, para partículas masivas como el electrón y positrón se muestra en las líneas sólidas. La gráfica del lado superior derecho muestra la posición dependiente del tiempo medida experimentalmente, mientras las líneas sólidas representan la solución numérica. En el experimento miden la posición dependiente del tiempo de la nube sujeta al Hamiltoniano de Dirac para varios tiempos de vuelo (TOF, por sus siglas en inglés) .Gráfica tomada de la referencia de J LeBlanc y colaboradores [11]. . . . . 8
- 3.1 Heteroestructura semiconductor. Entre el material tipo  $n - AlGaAs$  y el material intrínseco  $i - GaAs$  se forma un pozo triangular de potencial que confina electrones en 2D.  $E_c$  es la energía de la banda de conducción,  $E_v$  la energía de la banda de valencia y  $E_f$  la energía de Fermi respectiva para cada tipo de material. . . . . 14

- 3.2 Representación esquemática de la estructura de bandas de *GaAs*. Donde  $E_0$  representa la brecha energética principal del semiconductor y es la diferencia entre la banda de conducción y la energía de la banda de valencia a  $\mathbf{k} = 0$ . HH es la banda de huecos pesados, LH representa la banda de huecos ligeros, SO es el split-off y  $\Delta_0$  representa la brecha entre la banda de huecos split-off y la banda degenerada HH y LH. . . . . 15
- 3.3 Representación esquemática de la relación de dispersión de una partícula libre con acoplamiento espín-órbita de Rashba. *a)* Espectro de energías como función de  $k_x$  y  $k_y$  (ec.(3.12)) *b)* proyección de la dispersión en el plano de momentos (a una energía constante). Las flechas indican la dirección de polarización del espín la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  *c)* se muestra el espectro de energía para el electrón libre sin acoplamiento espín-órbita de Rashba y en *d)* se muestra el espectro de energía pero con interacción de Rashba. Note que la degeneración de espín se rompe para el caso con acoplamiento Rashba. . . . . 17

- 3.4 Representación esquemática de la relación de dispersión con interacción de Rashba y/o Dresselhaus. En la parte superior se muestra graficado la estructura de bandas para los siguientes casos: a) Rashba ó Dresselhaus, b) el parámetro de interacción es igual para ambos casos y c) cuando el parámetro de acoplamiento espín-órbita es diferente para cada interacción de acoplamiento. En la parte inferior de la figura se muestra la representación esquemática para la dirección de polarización de espín para los casos anteriores. . . . . 19
- 4.1 Diagrama esquemático que muestra el movimiento de una partícula libre y relativista en dirección  $x$  (flecha azul). Las líneas punteadas describen el movimiento oscilatorio alrededor de su trayectoria clásica, esto es, alrededor del valor esperado de la posición  $\langle x \rangle$  a medida que se propaga *i.e.* el fenómeno del *Zitterbewegung*. . . . . 25
- 4.2 Ilustración esquemática típica de la estructura de banda de semiconductores. Aquí se muestra la banda de conducción (electrones) y banda de valencia (huecos pesados) para el compuesto de *GaAs* en el cual su brecha energética es de  $1.42eV$ . . . . . 27

- 5.1 Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$  con acoplamiento espín-órbita de Rashba para diferentes tiempos como función de la posición. A  $t_1 = 0$  se considera un paquete de onda espín polarizado con perfil gaussiano con  $\sigma_0 = 10^{-5}cm$ . A  $t_2 = 1.5\tau_0$  ya se observa el desdoblamiento del paquete de onda en dos parte simétricas aunque con probabilidad disminuida. A  $t_3 = 7\tau_0$  los paquetes con velocidades opuestas finalmente se separan. Se utilizó  $\frac{\alpha_R}{\hbar} = 3.6 \times 10^6 cm s^{-1}$ , y tiempos en unidades de  $\tau_0 = \gamma^{-1}$  en unidades de  $\tau_0 = 4.33ps$ . . . . . 38
- 5.2 Densidad de probabilidad de espín en dirección  $z$  con acoplamiento espín-órbita de Rashba para diferentes tiempos,  $t_1 = 0$ ,  $t_2 = 1.5$ ,  $t_3 = 7$  ( $\alpha = 3.6 \times 10^6 cm s^{-1}$ , y tiempo en unidades de  $\tau_0 = \gamma^{-1}$ ). . . . . 39
- 5.3 Variación de las componentes de la velocidad media con el tiempo,  $\langle v_y \rangle$  es la línea de color azul y  $\langle v_x \rangle$  es la línea de color rojo. Para las dos gráficas se utilizó  $k_0 = 2.5 \times 10^5 cm^{-1}$ . La diferencia en cada gráfica es el valor de la dispersión: a) se utilizó  $\sigma = \sigma_0$  y para el caso b) se utilizó  $\sigma = 10\sigma_0$  (con  $\sigma_0 = 1 \times 10^{-5}cm$ ), también se muestra el periodo  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$  donde  $\omega = 2k_0\alpha$ . . . . . 40

- 7.1 Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$  para un estado inicial del paquete gaussiano con  $k_0 = 0$ ,  $\sigma_0 = 1400\text{\AA}$ , a un tiempo de  $t_{max} = 7t_0$ . Del lado izquierdo de la figura, en a.1) se graficó el caso sin acoplamiento espín-órbita como referencia, (i.e.  $\alpha_R = 0$ ), a.2) muestra la gráfica del mapa de intensidades de  $\rho(x, y, t)$  en el plano  $x - y$ . Del lado derecho de la figura en b.1) se observa que el acoplamiento espín-órbita finito ( $\alpha_R = 2\alpha_0$ ) cambia cualitativamente el caracter de la evolución del paquete de ondas, produciendo durante su evolución temporal que el paquete gaussiano inicial se separe en dos partes axialmente simétricos. En b.2) se observa un comportamiento de círculos concéntricos bien definido  $\rho(x, y, t)$ . . . . . 52
- 7.2 Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$  para diferentes valores de acoplamiento espín-órbita de Rashba y diferentes tiempos. Se observa que con una interacción débil  $\alpha_R = \alpha_0$ , se necesita más tiempo en la evolución temporal para que esta presente oscilaciones más definidas. El caso contrario, cuando el parámetro de Rashba es muy fuerte ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas. En la esquina superior de cada gráfica se muestra el mapa de intensidades de la densidad de probabilidad correspondiente a cada gráfica, mostrando una simetría anular concéntrica en cada caso. . . . . 54

- 7.3 Densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y, t) = |\psi_\uparrow|^2 - |\psi_\downarrow|^2$  para diferentes valores de acoplamiento espín-órbita de Rashba y mismo tiempo de simulación. En la figura con  $\alpha_R = \alpha_0$  se observan oscilaciones para las diferentes contribuciones positivas y negativas de  $S_z(x, y, t)$ . Para el caso cuando se incrementa el parámetro de Rashba a un valor relativamente fuerte ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas. Se muestra también, en la esquina superior de cada gráfica el mapa de intensidades correspondiente a cada gráfica, mostrando simetría circular concéntrica en cada caso para diferentes valores de la densidad de probabilidad de espín. Todas las distribuciones fueron calculadas a un tiempo  $t = 6t_0$ . . . . . 55
- 7.4 a) Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y) = |\psi_\uparrow|^2 + |\psi_\downarrow|^2$ , y b) densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y) = |\psi_\uparrow|^2 - |\psi_\downarrow|^2$  para un tiempo final de  $t_{max} = 7t_0$  en los que se consideró un paquete gaussiano inicial espín polarizado en dirección  $+z$  con momento inicial  $p_{0y} = 0$  y  $p_{0x} = \hbar k_0$  con  $k_0 = 2.55 \times 10^7 m^{-1}$ . El valor del acoplamiento espín-órbita es  $\alpha_R = 2\alpha_0$ . La dispersión inicial del paquete gaussiano fue  $\sigma_0 = 1400\text{Å}$ . . . . . 56

- 7.5 a) Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$ , y b) densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 - |\psi_{\downarrow}|^2$  a un tiempo final de  $t_{max} = 7t_0$  para un estado inicial del paquete Gaussiano tal que las componentes del vector de onda  $p_{ox} = \hbar k_0$  y  $p_{oy} = \hbar k_0$  con  $k_0 = 2.55 \times 10^7 m^{-1}$ . La dispersión inicial del paquete gaussiano fué  $\sigma_0 = 1400 \text{Å}$  y  $\alpha_R = 2\alpha_0$ . Se muestra que la  $\rho(x, y, t)$  tiene dos máximos (que viajan en dirección opuesta según nuestros estudios de la evolución temporal de los paquetes), similarmente ocurre para  $S_z(x, y, t)$ . . . . . 58
- 7.6 Evolución temporal para el caso estacionario para un tiempo de  $t_{max} = 7t_0$ , en a) se grafica la densidad de probabilidad electrónica, mostrando que el paquete inicial se separa en dos partes formando dos paquetes totalmente simétricos, pero con diferente dirección de la velocidad formando dos elipses concéntricas y b) la densidad de probabilidad de espín, del lado derecho de la gráfica se muestra el mapa de intensidades para cada caso. Simulaciones con  $\sigma_0 = 1400 \text{Å}$ ,  $\mathbf{k}_0 = 0$ , e intensidades de acoplamiento de Rashba y Dresselhaus de  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$ , respectivamente. . . . . 60
- 7.7 Densidad de probabilidad electrónica y de espín para un estado inicial del paquete gaussiano con  $k_{0x} = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\sigma_0 = 1400 \text{Å}$ ,  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y el parámetro de Dresselhaus es de  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$ . Simulación al tiempo  $t = 6.8t_0$ . . . . . 61

- 7.8 Mapas de intensidades para la densidad de probabilidad electrónica para un estado inicial del paquete gaussiano con  $\mathbf{k}_0 = 0$ ,  $\alpha_R = \alpha_D = 0.5\alpha_0$  para diferentes tiempos. [ (a)  $t = t_0$ , (b)  $t = 2t_0$ , (c)  $t = 3t_0$ , (d)  $t = 4t_0$ , (e)  $t = 5t_0$ , (f)  $t = 6t_0$ , (g)  $t = 7t_0$ ] . . . . . 62
- 7.9 El valor esperado de  $\langle y \rangle$  respecto el tiempo  $t$ , para diferentes valores de  $\sigma_0$ , con  $k_{0x} = 4k_0$ , siendo  $k_0 = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\alpha_R = 4\alpha_0$ , y tiempo total de simulación de  $t = 4.158 ps$ . De la gráfica se extrae el periodo de oscilación para el caso con  $\sigma_0 = 2100 \text{Å}$  es de  $\tau \sim 0.36 ps$ , mientras que para el caso cuando  $\sigma_0 = 1700 \text{Å}$  es de  $\tau \sim 0.46 ps$ . Ambas graficas muestran el comportamiento característico del efecto del *Zitterbewegung* de oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo. Sin embargo se observa que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la dispersión mayor. . . . . 65

- 7.10 *Zitterbewegung*: El valor esperado de  $\langle y \rangle$  respecto al tiempo  $t$ , para diferentes valores de la intensidad de acoplamiento espín-órbita de Rashba  $\alpha_R$ . Con el valor de la dispersión inicial de  $\sigma_0 = 1700\text{\AA}$ ,  $k_{0x} = 4k_0$ , siendo  $k_0 = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ . De la gráficas se extrae que el periodo de oscilación para el caso con  $\alpha_R = \alpha_0$  es de  $\tau \sim 1.45ps$ , para el caso cuando  $\alpha_R = 2\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.725ps$ , para el caso cuando  $\alpha_R = 3\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.476ps$  y para el caso de  $\alpha_R = 4\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.36ps$ . En las gráficas se muestran el comportamiento ca-racterístico del efecto del *Zitterbewegung* de oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo. Asimismo la amplitud y el periodo de las oscilaciones dependen de la intensidad de acoplamiento espín-órbita. Se observa que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la intensidad de acoplamiento espín-órbita más pequeño ( $\alpha_R = \alpha_0$ ). . . . . 66
- 7.11 Densidad de probabilidad de espín  $S_z(x, y, t)$ , con  $\sigma_0 = 1700\text{\AA}$ ,  $k = 4k_0$  para diferentes tiempos, con  $k_0 = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\alpha_R = 4\alpha_0$  y  $t_1 = 20t_0$ ,  $t_2 = 30t_0$ ,  $t_3 = 80t_0$ ,  $t_4 = 100t_0$  . . . . . 67
- A.1 Se muestra esquemáticamente el espectro de los eigenvalores de la energía para la ecuación de Dirac para la partícula libre. El espectro de energía negativa con  $E < m_0c^2$  son ocupados por positrones. . . . . 79
- A.2 Se muestra los electrones con helicidad positiva a) y negativa b). En ambos incisos se muestran las posibles rotaciones del electrón. . . . . 81

# 1. Introducción

De la teoría relativista de la mecánica cuántica de Dirac se desprende que el efecto *Zitterbewegung* es consecuencia de la interferencia de los eigen-espinores asociados a los valores de energía positiva y negativa de las partículas relativistas, lo que conduce a un movimiento oscilatorio de éstas partículas cuánticas en dirección perpendicular a la trayectoria de su propagación. Para un electrón libre relativista las oscilaciones de su posición tienen frecuencia del orden de  $2mc^2/\hbar \sim 10^{21}$  Hz, (donde  $m$  es la masa del electrón,  $c$  la velocidad de la luz y  $\hbar$  la constante de Planck), mientras que la amplitud de las oscilaciones son del orden de la longitud de onda de Compton ( $10^{-12}m$ ). El *Zitterbewegung* constituye por tanto un movimiento oscilatorio muy violento alrededor de la trayectoria clásica de la partícula libre; de hecho, las fluctuaciones son tan violentas que su velocidad instantánea es  $c$ , aunque la velocidad asociada al desplazamiento efectivo de la partícula con momento  $p$  y energía total  $E$  es  $\left\langle \frac{c^2 p}{E} \right\rangle \approx \left\langle \frac{p}{m} \right\rangle$ .

A pesar de que no se ha podido verificar el *Zitterbewegung* en experimentos de altas energías, se piensa que un efecto análogo puede presentarse en sólidos, en particular en nanoestructuras semiconductoras con acoplamiento espín-órbita fuerte. Específicamente el acoplamiento espín-órbita del tipo producido por la ausencia de simetría traslacional en heteroestructuras (efecto Rashba)[12] y por la asimetría de inversión espacial de la estructura cristalina del bulto en ciertos semiconductores (efecto Dresselhaus) [13]. Asimismo en el contexto de la *espintrónica* se ha demostrado

teóricamente una interesante conexión entre el fenómeno de *Zitterbewegung* y el efecto Hall de espín (SHE por sus siglas en inglés), y que a su vez, depende fuertemente de la inyección de electrones espín-polarizados en la barra Hall[14, 15]. Por ejemplo, si la inyección electrónica es espín-polarizada, se predice un patrón de acumulación de espines opuestos en los bordes de la guía de onda, *i.e.* SHE; pero para el caso contrario, cuando la inyección electrónica no es espín-polarizada, se predice una distribución de probabilidad con variación espacial oscilante asociada al efecto *Zitterbewegung* [16, 17].

Una extensión de esta idea (conexión del *Zitterbewegung* con otros fenómenos de espín) es aplicada en materiales novedosos como el grafeno, que exhibe propiedades inusuales y tiene un fuerte potencial para aplicaciones tecnológicas, especialmente como una alternativa a la tecnología actual basada en Silicio [18, 6, 19, 20]. En particular, se sugiere fuertemente que el espín del electrón puede ser acoplado selectivamente en tales materiales. Cabe mencionar que el efecto espín-órbita de Rashba en grafeno, ( $\lambda_R \sim 0.011 \text{ meV}$ ) es cerca de 100 órdenes de magnitud más grande que el parámetro de acoplamiento espín-órbita  $\lambda_{SO}$  intrínseco[21] y la semejanza del Hamiltoniano del grafeno con el de Dirac lo hace candidato ideal para estudios del *Zitterbewegung*.

En este trabajo de tesis nos hemos enfocado al estudio teórico y numérico del fenómeno del *Zitterbewegung* en gases de electrones bidimensionales formados en heteroestructuras semiconductoras de brecha energética estrecha (grupos *III – V*) en donde la interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus son importantes. Para llevar a cabo esta tarea, se estudió la dinámica de paquetes de onda electrónicos a través de la solución

numérica de la ecuación de Schrödinger bidimensional dependiente del tiempo en presencia de la interacción de espín-órbita Rashba y Dresselhaus. Utilizamos el formalismo de diferencias finitas aplicado a ecuaciones diferenciales de segundo orden bidimensionales y generalizadas para incluir el espín a través de los acoplamientos espín-órbita. El método nos conduce a sistemas de ecuaciones acopladas en espín que fueron convenientemente desacopladas por medio de transformaciones unitarias en cada paso de iteración temporal. La introducción de ciertas funciones auxiliares dependientes del espín nos permitió resolver, de manera iterativa, la función de onda electrónica para todo el espacio y tiempo dadas las condiciones iniciales y de frontera del problema en dos dimensiones. A su vez, esto nos permitió estudiar la dinámica de los paquetes de onda y los efectos del acoplamiento espín-órbita en la evolución temporal de los paquetes de onda. Se calcularon numéricamente los valores esperados de posición en el tiempo, densidad de probabilidad y polarización de espín, entre otras cantidades físicas que nos permitió realizar un estudio sistemático del *Zitterbewegung* en tales sistemas.

## 2. *Zitterbewegung* en sólidos

Hemos visto hasta aquí que el fenómeno *Zitterbewegung* fue propuesto originalmente por Erwin Schrödinger en el año 1930. Sin embargo, el primer trabajo en sólidos que se publicó relacionado con este fenómeno no fue sino hasta 40 años después por Lurie y Cremer (1970) [22]. En este trabajo los autores se enfocaron a estudiar teóricamente el comportamiento de cuasi-partículas en un material superconductor. Lurie y Cremer encontraron que los superconductores pueden exhibir el efecto *Zitterbewegung* de forma similar como el que se predice para electrones relativistas en el vacío. No es sino hasta 20 años después (1990) que un modelo similar fue aplicado para semiconductores usando un modelo de dos bandas de energía (Cannata *et al.* [23]). En particular estudiaron la dinámica electrón-hueco en sistemas semiconductores cuasi-relativistas en donde se analizó el *Zitterbewegung* y su relación con la transición inter-bandas en un cristal semiconductor [24, 25].

No fue si no hasta inicios del año 2005, con el advenimiento de la *espintrónica*, que surgió un renovado interés en el estudio del fenómeno del *Zitterbewegung* de electrones, en particular en semiconductores. Esto con la propuesta original de John Schliemann y colaboradores [26] donde predicen el efecto *Zitterbewegung* de un paquete de onda espín-polarizado en un gas de electrones bidimensional bajo la influencia del acoplamiento espín-órbita de tipo Rashba y Dresselhaus en heteroestructuras semiconductoras [27]. Sus resultados sugirieron la posible observación de este fenómeno

fundamental en heteroestructuras semiconductoras. Posteriormente, ese mismo año, W. Zawadzki *et al.* [18, 19] publicaron estudios teóricos del efecto *Zitterbewegung* para nanoestructuras semiconductoras de brecha energética estrecha (grupos *III – V*), mostrando que electrones cuasi-libres, (en un régimen no-relativista en sólidos) deberían experimentar un movimiento tembloroso en ausencia de un campo externo. Con los trabajos de Schliemann y Zawadzki se detonó una gran actividad de investigación alrededor del *Zitterbewegung* que a continuación se describe brevemente.

Cálculos numéricos realizados por S.-Q. Shen[28] establecen la conexión del efecto Hall de espín (SHE) y la fuerza transversal que experimentan los electrones en estos sistemas semiconductores. Cabe mencionar que en el 2006, V. Sih y colaboradores [29] realizaron estudios experimentales sobre la corriente de espín eléctricamente inducida y que es generada por el efecto Hall de espín en estructuras de *GaAs* diseñadas de tal forma que distingue los efectos de borde que genera el transporte de espín. Además en el mismo año, Q. Xu y colaboradores [30], realizaron estudios teóricos del transporte de electrones espín polarizados con acoplamiento espín-órbita en geometrías tipo guía de onda con multicanales, mostrando que el efecto *Zitterbewegung* y el efecto Hall de espín resultan como consecuencia del mismo mecanismo (*i.e.* acoplamiento espín-órbita) asociado a los estados coherentes de los electrones en la guía de onda.

Un trabajo teórico importante, por su relevancia para este trabajo de tesis, es el desarrollado por Frolova y colaboradores [17] en el que estudian analíticamente usando el formalismo de funciones de Green, la evolución temporal de paquetes de onda con interacción espín-órbita de Rashba en una y dos dimensiones.

Posteriormente Zawadzki y colaboradores [19] proponen la observación experimental del *Zitterbewegung* de los electrones en grafeno en presencia de un campo magnético usando pulsos de láser ultra-cortos. Asimismo, Winkler y colaboradores [31] realizaron el análisis teórico para diferentes Hamiltonianos con brecha energética estrecha y/o con desdoblamiento de espín en el espectro de energías (incluyendo Hamiltonianos de Rashba, Luttinger y Kane) que exhiben analogías del efecto *Zitterbewegung* como una característica común.

El año 2010 fue un parte-aguas en la investigación del *Zitterbewegung* pues se verificó experimentalmente por vez primera su existencia (Gerritsma y colaboradores [10]). Curiosamente esto no se hizo ni en sólidos, ni en gases electrónicos bidimensionales, ni en grafeno, como originalmente se había propuesto, sino en condensados atómicos de Bose-Einstein. Gerritsma y colaboradores simularon experimentalmente el *Zitterbewegung* mediante la manipulación de iones de  $^{40}\text{Ca}^+$  atrapados con láseres. Resulta que el modelo matemático que describe la interacción de los láseres con los iones tiene una forma genérica idéntica a la ecuación de Dirac. Así, cambiando la frecuencia y la intensidad de los láseres les permitió a los investigadores controlar finamente dos propiedades importantes de la simulación: la masa efectiva de la partícula cuántica (simulada por los iones de  $^{40}\text{Ca}^+$ ), y la velocidad de la luz efectiva en el sistema. El fino control de tales propiedades en el experimento les permitió producir y medir velocidades del condensado de poco menos de 1 milímetro por segundo, lo suficientemente lentas como para detectar el *Zitterbewegung* en el laboratorio (ver figura 2.1).

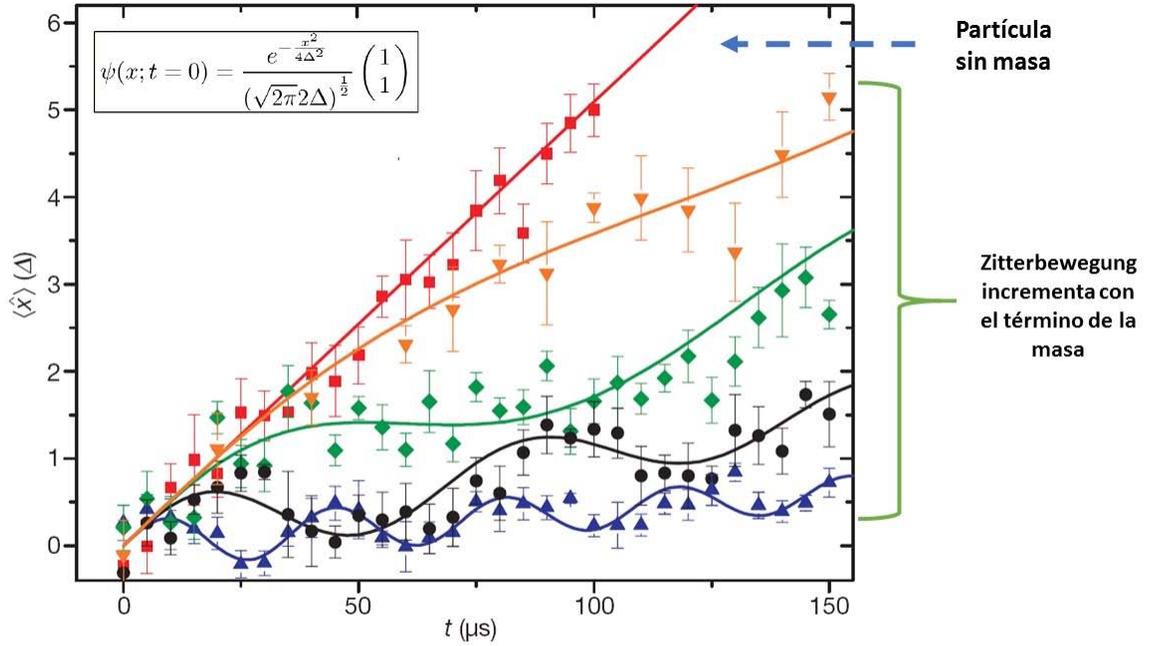


Figura 2.1: Experimento: Simulación de la ecuación de Dirac. En la figura se muestra el valor esperado de la posición  $\langle \hat{X} \rangle$  respecto al tiempo para partículas con diferentes masas. La curva lineal (cuadrados) representa una partícula sin masa moviéndose a la velocidad de la luz. Desde la parte superior las otras curvas representan el incremento en el valor del término de la masa. Las líneas sólidas representan la solución numérica. Gráfica tomada de la referencia de R. Gerritsma y colaboradores.[10]

Más recientemente (2013), LeBlanc y colaboradores [11] mostraron experimentalmente señales inequívocas de la presencia del efecto *Zitterbewegung* en condensados de Bose-Einstein constituidos por átomos de Rubidio (*Rb*). En particular consiguieron que los átomos se comportaran como partículas relativistas sujetas a la ecuación de Dirac unidimensional. Así observaron el movimiento oscilatorio esperado de estas nubes atómicas, demostrando además, la utilidad de los gases cuánticos ultra-fríos para la simulación de partículas de Dirac (ver figura 2.2).[11]

Las investigaciones teóricas y experimentales que se describieron anteriormente siguen generando un enorme interés en el estudio del *Zitterbewegung* en variedad de sistemas físicos. Así pues, la física del fenómeno de transporte electrónico particularmente en

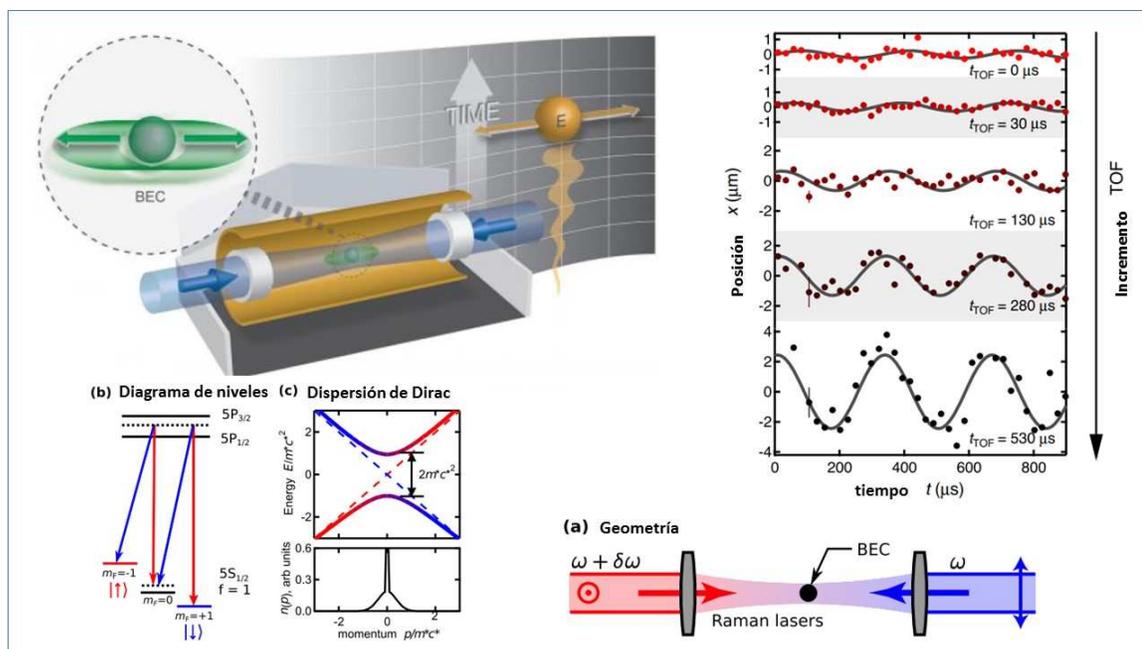


Figura 2.2: Experimento: Observación directa del *Zitterbewegung* en un condensado de Bose-Einstein. En la figura se muestra esquemáticamente el sistema que se utilizó para el experimento. La gráfica a) muestra la geometría esquemática de los láseres, b) el diagrama de niveles para las transiciones Raman y c) dispersión de Dirac: las líneas punteadas muestra la relación de Dirac para partículas sin masa, para partículas masivas como el electrón y positrón se muestra en las líneas sólidas. La gráfica del lado superior derecho muestra la posición dependiente del tiempo medida experimentalmente, mientras las líneas sólidas representan la solución numérica. En el experimento miden la posición dependiente del tiempo de la nube sujeta al Hamiltoniano de Dirac para varios tiempos de vuelo (TOF, por sus siglas en inglés). Gráfica tomada de la referencia de J LeBlanc y colaboradores [11].

nanoestructuras semiconductoras con acoplamiento espín-órbita y su conexión con el efecto *Zitterbewegung* es un tema de investigación de gran interés actualmente en espintrónica.

### 3. Acoplamiento espín-órbita

El acoplamiento espín-órbita es de origen puramente relativista y se presenta como consecuencia del acoplamiento del momento orbital de los electrones con su momento magnético angular intrínseco (espín) debido a la presencia de un gradiente de potencial eléctrico [32]. Es uno de los pocos ecos de la física relativista emergente en el campo de la materia condensada, gobernada la mayor parte por la física no-relativista y de bajas energías. En la espintrónica de semiconductores, el acoplamiento espín-órbita se utiliza como una fuente de manipulación y generación de espín en ausencia de campos magnéticos. Constituye un ingrediente fundamental para fenómenos físicos como es el efecto Hall de espín y el efecto Hall anómalo, entre otros.

Analizaremos primero el origen del acoplamiento espín-órbita desde el punto de vista de la electrodinámica relativista. Considere a un electrón moviéndose con velocidad  $\mathbf{v}$  en presencia de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$ . De acuerdo a la teoría de la relatividad especial de A. Einstein, en el sistema de referencia del electrón en reposo se experimenta un campo magnético dado por (ver J. D. Jackson ,3ra Ed.[33])

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

donde  $\mathbf{v} = |\mathbf{v}|$  es su velocidad orbital y  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío. Sin embargo, cuando consideramos a un electrón en presencia de un potencial radial como

en el caso del átomo de Hidrógeno, entonces el argumento anterior (3.1) está incompleto, puesto que deja de lado las complicaciones que surgen debido a la aceleración centrípeta del electrón, dando lugar al denominado término de precesión de Thomas que introduce un factor de 1/2 a la ecuación (3.1) [34]. Por consiguiente la expresión correcta para la densidad de flujo magnético es entonces

$$\mathbf{B} = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{2c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} . \quad (3.2)$$

Si escribimos el momento magnético del electrón como  $\boldsymbol{\mu}_e$ , entonces la energía de interacción con  $\mathbf{B}$  es

$$E_{rel} = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{B} . \quad (3.3)$$

Landé mostró que  $\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{g_0 \mu_B}{\hbar} \mathbf{S}$ , donde  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$  es el momento magnético intrínseco (espín) de los electrones,  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  es el vector de las matrices de Pauli,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr ( $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0c}$ ), por lo que

$$\boldsymbol{\mu}_e = -\frac{g_0 \mu_B \mathbf{S}}{\hbar} , \quad (3.4)$$

con  $g_0 = 2$  para electrones y por tanto (3.3) se reescribe como

$$E_{rel} = \frac{g_0 \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} . \quad (3.5)$$

Usando la ecuación (3.2), la ecuación (3.5) se reescribe como

$$E_{rel} = \frac{g_0 \mu_B}{\hbar} \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{2c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot \mathbf{S} = \frac{g_0}{2\hbar} \frac{e\hbar}{2m_0 c} \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{v}}{2c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \cdot \boldsymbol{\sigma} \hbar \quad , \quad (3.6)$$

donde  $m_0$  es la masa del electrón libre. Para un electrón no-relativista  $v \ll c$ , entonces el Hamiltoniano de interacción espín-órbita es

$$H_{SO} = -\frac{e\hbar}{4m_0^2 c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \approx -\frac{e\hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad . \quad (3.7)$$

El término del acoplamiento espín-órbita (3.7), derivado por argumentos electrodinámicos relativistas, se puede deducir formalmente de la ecuación de Dirac al resolver el problema genérico de la dinámica del electrón en presencia de un potencial eléctrico externo  $V(r)$  tomando en cuenta los efectos relativistas hasta orden  $(v/c)^2$ . Sin embargo la ecuación (3.7) es válida para átomos, para el caso de sólidos la situación es obviamente más complicada, sin embargo veremos que el efecto espín-órbita sigue una forma funcional análoga a (3.7) donde las masas y los gradientes de potencial se renormalizan.

En general, existen diferentes tipos de acoplamiento espín-órbita dependiendo del material. En la siguiente sección se analizarán, dos tipos de acoplamiento espín-órbita que son de importancia para este trabajo, los acoplamientos Rashba y Dresselhaus. Estos constituyen los fenómenos fundamentales de mi estudio ya que dan lugar al

efecto *Zitterbewegung*. Es por tanto importante revisar su origen físico y su comportamiento en semiconductores.

### 3.1 Efecto Rashba y Dresselhaus

En sólidos, los electrones cuasi-libres de la banda de conducción, no experimentan atracción nuclear fuerte como ocurre en un átomo. Sin embargo, todavía pueden experimentar un campo eléctrico (o gradiente de potencial) debido a los efectos internos. Por ejemplo, en un gas bidimensional de electrones (GE2D) formado en una heteroestructura semiconductor (AlGaAs/GaAs) se forma un potencial eléctrico asimétrico, lo cual se traduce en que los electrones presentan un gradiente de potencial diferente de cero. Este gas de electrones bidimensional se muestra esquemáticamente en la figura 3.1. Por ejemplo, en la heteroestructura semiconductor, (AlGaAs/GaAs), ver fig 3.1) si existe un campo eléctrico fuerte debido a un gradiente de potencial interno (asociado con la discontinuidad de la banda de conducción en la heteroestructura) o debido a la aplicación de un campo eléctrico externo, este inducirá una interacción espín-órbita del tipo dada por la ecuación (3.7). Este problema fue examinado por primera vez por E. I. Rashba en 1960 [12]; sin embargo su trabajo quedó olvidado por más de 30 años. La interacción espín-órbita asociada lleva su nombre (interacción de Rashba) y es debida a la asimetría de inversión estructural (SIA por sus siglas en inglés). Rashba notó que un campo eléctrico externo o interno es responsable de esta interacción y que es entonces sintonizable. Otro tipo de campo eléctrico interno

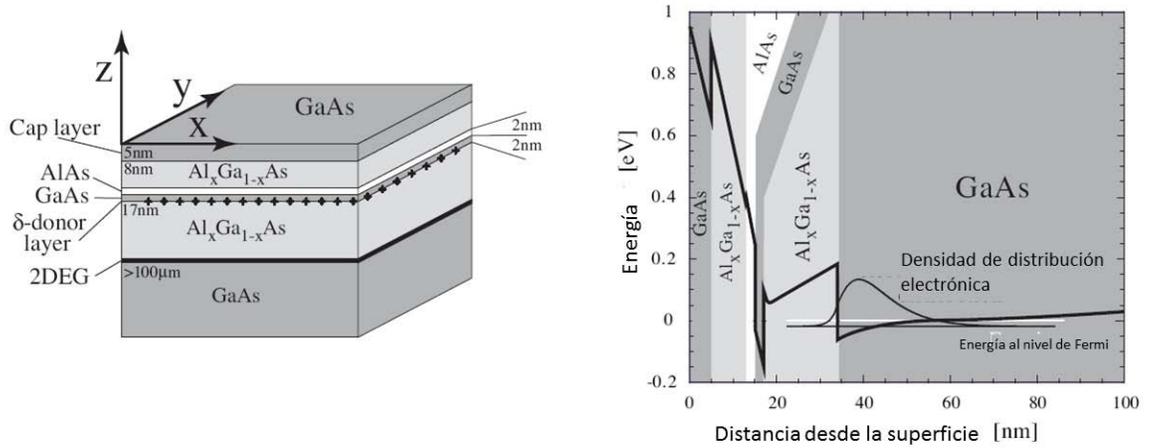


Figura 3.1: Heteroestructura semiconductor. Entre el material tipo  $n - AlGaAs$  y el material intrínseco  $i - GaAs$  se forma un pozo triangular de potencial que confina electrones en 2D.  $E_c$  es la energía de la banda de conducción,  $E_v$  la energía de la banda de valencia y  $E_f$  la energía de Fermi respectiva para cada tipo de material.

puede surgir debido a la asimetría de inversión cristalográfica del cristal (BIA, por sus siglas en inglés). Este problema fue examinado por G. Dresselhaus en 1954 [13] y por tanto la interacción espín-órbita asociado lleva su nombre (interacción Dresselhaus). A continuación explicaremos con más detalle la fenomenología de estos dos efectos. El acoplamiento espín-órbita de Rashba, equivalente a la ecuación (3.7) está descrita por (Bychkov y Rashba, 1984 [36])

$$\mathbf{H}_{SO} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p})_z = i\alpha_R (\sigma_y \frac{d}{dx} - \sigma_x \frac{d}{dy}) \quad (3.8)$$

donde  $\alpha_R$  es el parámetro de la intensidad del acoplamiento espín-órbita de Rashba y depende del campo eléctrico efectivo (gradiente de potencial en la interfase) de la heteroestructura semiconductor. El valor aproximado para el coeficiente de Rashba  $\alpha_R$  para electrones en materiales  $III - V$  tipo zinc-blenda, se puede estimar a través de expresiones analíticas obtenidas de la teoría  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  empleando un modelo de Kane

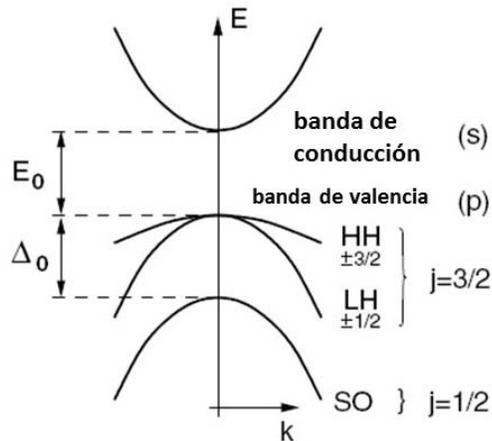


Figura 3.2: Representación esquemática de la estructura de bandas de *GaAs*. Donde  $E_0$  representa la brecha energética principal del semiconductor y es la diferencia entre la banda de conducción y la energía de la banda de valencia a  $\mathbf{k} = 0$ . HH es la banda de huecos pesados, LH representa la banda de huecos ligeros, SO es el split-off y  $\Delta_0$  representa la brecha entre la banda de huecos split-off y la banda degenerada HH y LH.

de 8 bandas. Explícitamente el valor de  $\alpha_R$  puede estimarse mediante la siguiente expresión [37]

$$\alpha_R = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta_0}{E_0} \frac{2E_0 + \Delta_0}{(E_0 + \Delta_0)(3E_0 + 2\Delta_0)} eE \quad (3.9)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones en el semiconductor,  $e$  es la magnitud de carga del electrón,  $E$  es el campo eléctrico ( $E = E\hat{z}$ ),  $E_0$  la brecha energética principal del semiconductor,  $\Delta_0$  corresponde a la brecha entre la banda de huecos split-off (SO, por sus siglas en inglés) y la banda degenerada de huecos pesados-huecos ligeros (ver figura 3.2). Esto hace posible modular la intensidad de este parámetro al variar el campo eléctrico  $\mathbf{E}$ ; esto es, se puede modular  $\alpha_R$  y por tanto la interacción espín-órbita por medios puramente electrostáticos al aplicar voltajes de compuerta que modifiquen el perfil del potencial de confinamiento. Es importante enfatizar que el

efecto Rashba no puede producir una polarización espontánea de espín de los estados electrónicos (Mireles y Kirczenow, 2001 [38]). Sin embargo, es capaz de inducir un desdoblamiento de los estados de espín del gas de electrones en ausencia de campos magnéticos (para  $\mathbf{k} \neq 0$ ). Este desdoblamiento de los estados de espín, es proporcional al vector de onda de los electrones a la energía de Fermi y depende del campo eléctrico efectivo en la interfase semiconductor como se verá en detalle a continuación.

El Hamiltoniano total para el gas bidimensional de electrones (GE2D) ésta dado por

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_o + \mathbf{H}_{SO} \quad (3.10)$$

con  $\mathbf{H}_o = (\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*})$ , con  $p_x$  y  $p_y$  la proyección espacial del operado del momento lineal, reescribiendo la ecuación (3.10) en forma matricial

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) & i\alpha_R k_x + \alpha_R k_y \\ -i\alpha_R k_x + \alpha_R k_y & \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) \end{pmatrix}. \quad (3.11)$$

Este Hamiltoniano produce dos ramas de energía en la dispersión de los electrones, y están dadas por

$$E^\pm(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*}k^2 \pm \alpha_R k \quad (3.12)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones y  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , es la magnitud del vector de onda en dos dimensiones (en el plano del GE2D). La ecuación (3.12) muestra que para un gas bidimensional de electrones, la interacción espín-órbita de Rashba introduce un rompimiento de la degeneración de espín a cualquier  $\mathbf{k} \neq 0$ . La naturaleza del desdoblamiento es tal que permite que electrones con la misma energía

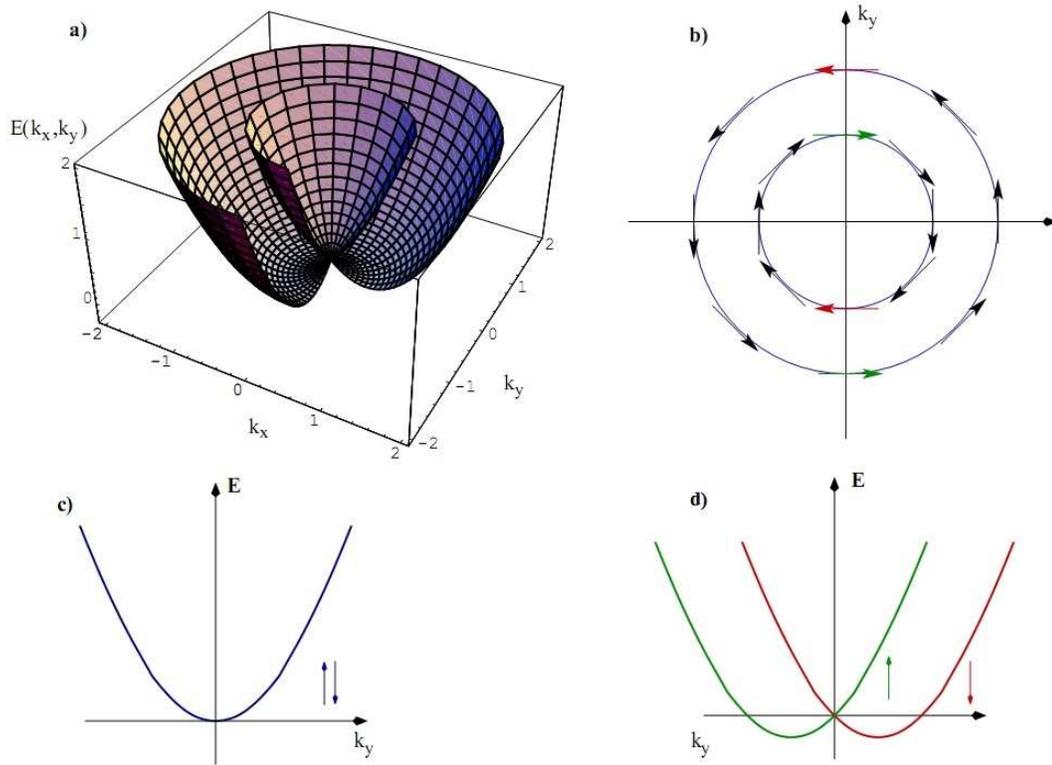


Figura 3.3: Representación esquemática de la relación de dispersión de una partícula libre con acoplamiento espín-órbita de Rashba. *a)* Espectro de energías como función de  $k_x$  y  $k_y$  (ec.(3.12)) *b)* proyección de la dispersión en el plano de momentos (a una energía constante). Las flechas indican la dirección de polarización del espín la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  *c)* se muestra el espectro de energía para el electrón libre sin acoplamiento espín-órbita de Rashba y en *d)* se muestra el espectro de energía pero con interacción de Rashba. Note que la degeneración de espín se rompe para el caso con acoplamiento Rashba.

tengan diferentes vectores de onda ( $k_1$  y  $k_2$ ) (fig. 3.3*d*) , esto es ,  $E^+(k_1) = E^-(k_2)$ , donde  $k_1$  es el vector de onda asociado con la banda  $E^-$  con eigenvector  $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$ , y  $k_2$  representa al vector de onda asociado con la banda  $E^+$  con eigenvector  $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$  . En la parte superior de la figura 3.3*a* se muestra graficada la ecuación de dispersión (3.12) para  $\alpha_R \neq 0$ . Las flechas indican la dirección de polarización del espín. Note que la dirección del espín rota (precesa) con el cambio del momento.

Como se mencionaba anteriormente, existen otras contribuciones al desdoblamiento de los estados de espín, y se ha demostrado que es causado por la asimetría de inversión en el bulto (BIA, por sus siglas en inglés)[13]. La contribución del Hamiltoniano de Dresselhaus es cúbica en momento, a diferencia del Hamiltoniano de Rashba que es lineal en momento. Despreciando contribuciones a orden cuadrático, el Hamiltoniano de Dresselhaus para un gas de electrones bidimensionales (GE2D) se linealizará y está dado por

$$\mathbf{H}_D = \frac{\alpha_D}{\hbar}(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) \quad , \quad (3.13)$$

donde  $\alpha_D$  es el parámetro de Dresselhaus. Similarmente, la interacción de Dresselhaus produce un desdoblamiento de los estados de espín electrónicos análogo a la interacción de Rashba [13]. Esto se muestra en las gráficas de la figura 3.4. En la parte superior se graficó la dispersión de energías  $E(k_x, k_y)$ , considerando las dos contribuciones de acoplamiento de espín-órbita Rashba y Dresselhaus para diferentes casos: la figura 3.4a se muestra para el caso de Rashba ó Dresselhaus, en la figura 3.4b se realizó para el caso donde el valor de los parámetros de acoplamiento son iguales  $\alpha_R = \alpha_D$  y el caso de la figura 3.4c se consideraron valores distintos para ambas contribuciones de acoplamiento  $\alpha_R \neq \alpha_D$ , modificando fuertemente la relación de dispersión para el sistema bidimensional.

Ahora bien, para la parte inferior de la figura 3.4, se muestra esquemáticamente el campo magnético efectivo y la orientación de la polarización de espín, para ambas contribuciones de los acoplamientos de Rashba y Dresselhaus, por medio de flechas

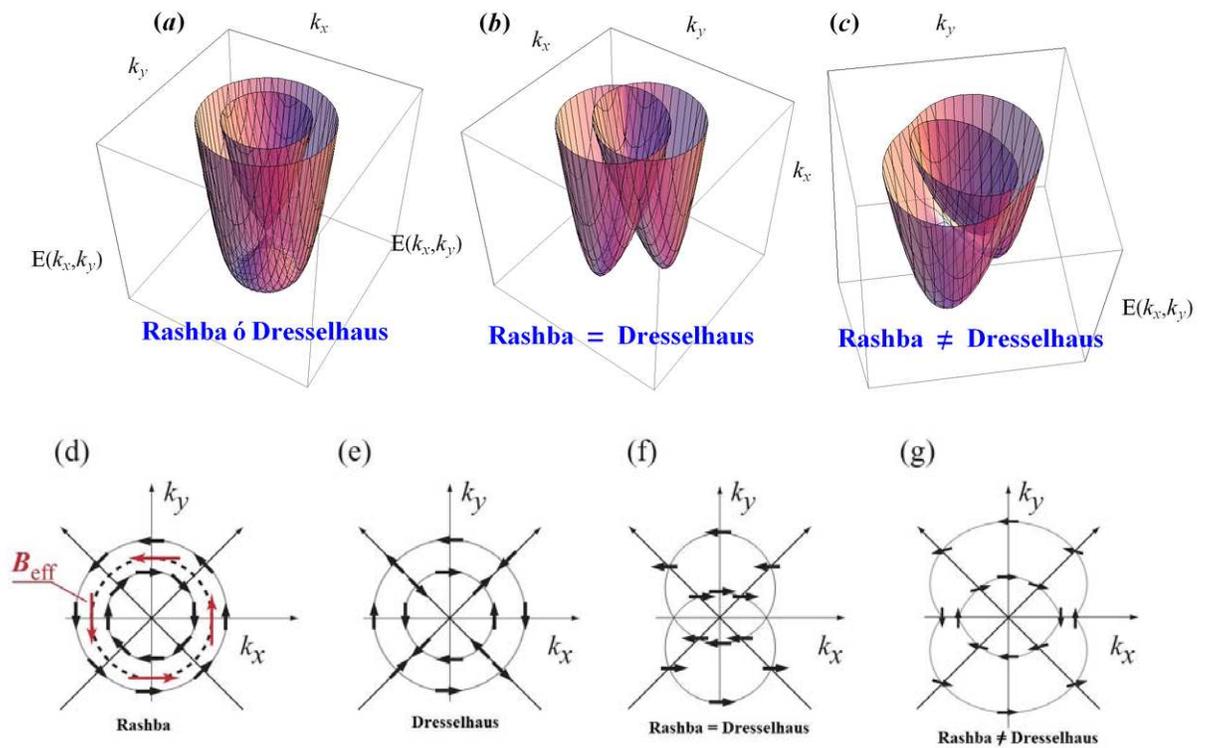


Figura 3.4: Representación esquemática de la relación de dispersión con interacción de Rashba y/o Dresselhaus. En la parte superior se muestra graficada la estructura de bandas para los siguientes casos: a) Rashba ó Dresselhaus, b) el parámetro de interacción es igual para ambos casos y c) cuando el parámetro de acoplamiento espín-órbita es diferente para cada interacción de acoplamiento. En la parte inferior de la figura se muestra la representación esquemática para la dirección de polarización de espín para los casos anteriores.

en la figura 3.4d y 3.4e respectivamente. En el caso de la interacción de Rashba (fig.3.4d), las flechas indican la dirección de polarización del espín  $\mathbf{S}_k = \langle \Psi_k | \boldsymbol{\sigma} | \Psi_k \rangle$  la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . En contraste con el caso de interacción de Dresselhaus, el ángulo entre el vector de onda  $\mathbf{k}$  y la dependencia de espín, depende de la dirección del vector de onda  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ . Para las figuras que incluyen los dos parámetros de acoplamiento en el que se observa que hay simetría circular (figura 3.4f) a diferencia del caso  $\alpha_R \neq \alpha_D$  se muestra simetría elíptica concéntrica.

En la tabla 1, se muestran valores para los distintos coeficientes de acoplamiento espín-órbita  $\alpha_0^R$  y  $\alpha_0^D$ , (*i.e.* con  $\alpha_R = \langle E \rangle \alpha_0^R$  y  $\alpha_D = \alpha_0^D \langle k_z^2 \rangle$ , respectivamente) y para otras constantes físicas de interés (*i.e.*  $m_e^*$ ,  $E_0$  y  $\Delta_0$ ), de tres materiales semiconductores diferentes ,(Winkler , 2003)[39]:

|                                  | <i>GaAs</i> | <i>AlAs</i> | <i>InAs</i> |
|----------------------------------|-------------|-------------|-------------|
| $\alpha_0^R$ ( $e\text{\AA}^2$ ) | 5.206       | -0.243      | 117.1       |
| $\alpha_0^D$ ( $e\text{\AA}^3$ ) | 27.58       | 18.53       | 27.18       |
| $m_e^*$                          | 0.067       | 0.0779      | 0.023       |
| $\Delta_0$ (eV)                  | 0.32        | 0.29        | 0.41        |
| $E_0$ (eV)                       | 1.43        | 2.28        | 0.35        |

Tabla 1 . Valores del coeficiente de Rashba ( $\alpha_0^R$ ) y Dresselhaus ( $\alpha_0^D$ ), donde  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones,  $E_0$  la brecha energética principal del semiconductor,  $\Delta_0$  corresponde a la brecha entre la banda de huecos splitt-off y la banda degenerada de huecos pesados-huecos ligeros, los parámetros son para diferentes materiales. Valores tomados de Winkler, 2003 [39]

En el siguiente capítulo se revisará el origen del fenómeno del *Zitterbewegung* y su homólogo en semiconductores. Se explicará también la analogía entre la estructura de banda de semiconductores de brecha estrecha y la ecuación de Dirac para electrones relativistas en el vacío, lo que sugiere fuertemente que los electrones en semiconductores experimentan el fenómeno del *Zitterbewegung*.

## 4. *Zitterbewegung*: descripción cuántico-relativista

### 4.1 Ecuación de Dirac

Hemos mencionado que el fenómeno del *Zitterbewegung* fue propuesto originalmente por Erwin Schrödinger (1930) [1]. Asimismo se estableció que de la teoría cuántico-relativista de Dirac se desprende que el *Zitterbewegung* es consecuencia de la interferencia de las eigenfunciones asociados a la energía positiva y negativa de las partículas libres relativistas; lo que induce entonces un movimiento oscilatorio de las partículas perpendicular a la trayectoria de su propagación. En este capítulo se revisará en detalle el origen cuántico-relativista del fenómeno en cuestión, *Zitterbewegung*. Esto lo haremos partiendo de la ecuación de Dirac y siguiendo el razonamiento de Schrödinger. Finalmente discutiremos su homólogo en semiconductores.

Iniciamos nuestro análisis considerando a una partícula libre relativista gobernada por la ecuación de Dirac,

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m_0 c^2 \boldsymbol{\beta})\psi \quad (4.1)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $m_o$  es la masa en reposo de la partícula en

cuestión. Los objetos  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\boldsymbol{\beta}$  son matrices de  $4 \times 4$  escritas en términos de las matrices de Pauli y de la matriz identidad (ver Apéndice A). Aquí  $\psi$  denota un espinor de  $1 \times 4$ . Dado que el Hamiltoniano  $H$  es independiente del tiempo, entonces podemos escribir la solución de (4.1) de la forma  $\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r})e^{-\frac{i\varepsilon t}{\hbar}}$ , donde la cantidad  $\varepsilon$  describe la energía total para un estado estacionario  $\psi(\mathbf{r})$ . Explícitamente podemos escribir

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}. \quad (4.2)$$

No es difícil deducir que el espectro de energías asociado a (4.1) está determinado por (ver apéndice A),

$$(\varepsilon^2 - m_0^2 c^4)\mathbf{1} - c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = 0 \quad , \quad \varepsilon^2 = m_0^2 c^4 + c^2 p^2, \quad (4.3)$$

esto es, los eigenvalores para la partícula libre relativista están dados por

$$\varepsilon = \pm E_p = \lambda E_p \quad , \quad E_p = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (4.4)$$

donde los signos del factor  $\lambda = \pm 1$  corresponden claramente a la energía positiva y negativa de la solución a la ecuación de Dirac. El espectro  $\varepsilon = \lambda E_p$  se muestra en la ilustración de la fig. 4.2 que exhibe una brecha energética de  $2m_0 c^2$  que separa el continuo de la energía positiva ( $\varepsilon_{p,1} = +E_p$ ), del continuo de energía negativa

$$(\varepsilon_{p,-1} = -E_p).^1$$

Note que los valores negativos de la energía no se refieren a energías negativas del electrón (éste siempre tiene energías positivas), sino a partículas que se encuentran por debajo del nivel 0 de energías (antipartículas). Entonces para cada momento  $\mathbf{p}$  existen 2 tipos de soluciones diferentes, una para  $\lambda = +1$ , ( $\varepsilon = +E_p$ ) y otra para  $\lambda = -1$ , ( $\varepsilon = -E_p$ ). A continuación veremos, al estudiar el operador de velocidad y de posición, que esta es precisamente la superposición de estos estados con energía opuesta lo que conduce a las oscilaciones del fenómeno del *Zitterbewegung*.

## 4.2 Origen del *Zitterbewegung*

Es importante analizar algunas propiedades del vector de velocidad y de posición de acuerdo a la teoría de Dirac. Note primero que el conmutador de  $H$  con  $\mathbf{p}$  (de la partícula libre) se anula,

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, \mathbf{p}] = 0, \quad (4.5)$$

y que implica por tanto que  $\mathbf{p}$  es constante de movimiento. Por otro lado, para el operador de velocidad en dirección  $x$ , en la representación de *Heisenberg* tenemos,

$$\frac{dx}{dt} = \frac{i}{\hbar}[H, x] = \frac{ic}{\hbar}\boldsymbol{\alpha} \cdot [\mathbf{p}, x] = c\sigma_x \quad (4.6)$$

---

<sup>1</sup>Cabe señalar que para la interpretación de los estado con  $\varepsilon = -E_p$ , Dirac propuso introducir la noción del *positrón* (*i.e.* partícula elemental, que posee exactamente la misma cantidad de masa y carga eléctrica que el electrón, pero con signo positivo).

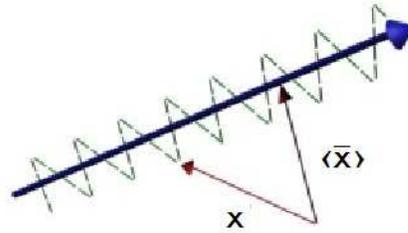


Figura 4.1: Diagrama esquemático que muestra el movimiento de una partícula libre y relativista en dirección  $x$  (flecha azul). Las líneas punteadas describen el movimiento oscilatorio alrededor de su trayectoria clásica, esto es, alrededor del valor esperado de la posición  $\langle x \rangle$  a medida que se propaga *i.e.* el fenómeno del *Zitterbewegung*.

y dado que los eigenvalores del operador  $\sigma_x$  son  $\pm 1$ , la expresión (4.6) nos indica que la partícula de Dirac se mueve siempre con una velocidad instantánea igual a la velocidad de la luz  $c$ . Además, como  $\sigma_i$  ( $i = x, y, z$ ) no conmuta el resto de las componentes de la velocidad  $v_j$  ( $j \neq i$ ), entonces estas no pueden ser medidas simultáneamente. Con el propósito de explicar el cómo es posible que la partícula libre se mueva siempre con una velocidad instantánea igual a  $c$ , Schrödinger introdujo el concepto de *Zitterbewegung*, que como se verá más claro adelante, consiste en un movimiento oscilatorio del electrón (con velocidad  $c$ ) alrededor de su trayectoria de propagación clásica  $\langle x \rangle$  (ver figura 4.1). Esto como consecuencia de que las componentes de momento  $\mathbf{p}$  son constantes de movimiento, mientras que las de posición, en este caso  $x(t)$ , no lo son. Lo anterior es más evidente al integrar las ecuaciones de movimiento en la representación de *Heisenberg*, en general se tiene,

$$\frac{d\boldsymbol{\alpha}}{dt} = \frac{1}{c} \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{i}{\hbar} [H, \boldsymbol{\alpha}] = \frac{2ic}{\hbar} \mathbf{p} - \frac{2i}{\hbar} \boldsymbol{\alpha} H, \quad (4.7)$$

y dado que  $[\alpha_i, \alpha_j] \neq 0$  ( $\{i, j\} = x, y, z$ ), esto conduce a que las componentes de la velocidad de la partícula libre no conmutan, y por tanto no son constantes de movimiento (es decir, son cantidades fluctuantes). Para estudiar los cambios en la velocidad se integra en el tiempo la ecuación (4.7) para un eigenestado de  $H$  dado. Si nos concentramos en la componente  $x$ , tenemos

$$\frac{dx}{dt} = c\sigma_x = \frac{c^2 p}{H} + \left( \frac{dx(0)}{dt} - \frac{c^2 p}{H} \right) e^{-\frac{2iH}{\hbar}t}, \quad (4.8)$$

e integrado una vez más en el tiempo llegamos a

$$x(t) = x(0) + \frac{c^2 p}{H}t + \zeta_p e^{-\frac{2iH}{\hbar}t} \quad (4.9)$$

con  $\zeta_p = \frac{i\hbar c}{2H} \left( \frac{dx(0)}{cdt} - \frac{cp}{H} \right)$ . Nótese que los dos primeros términos de (4.9) representan la solución clásica para la partícula libre relativista, mientras que el tercero es evidentemente un término oscilatorio en el tiempo y es precisamente el que da lugar al efecto *Zitterbewegung*. La frecuencia y la amplitud de las oscilaciones de la posición de la partícula son del orden de  $2mc^2/\hbar \sim 10^{21}\text{Hz}$ , y de la longitud de onda de Compton ( $10^{-10}\text{cm}$  para el electrón), respectivamente. El *Zitterbewegung* es, en consecuencia, un movimiento oscilatorio sumamente rápido y violento alrededor de la trayectoria clásica (en el sentido relativista) de la partícula libre.<sup>2</sup> Estas oscilaciones son de

---

<sup>2</sup>Es importante puntualizar que el término que da origen al *Zitterbewegung* es proporcional a  $e^{-\frac{2iHt}{\hbar}}$ , dado que es precisamente este término el que conduce a un acoplamiento entre los estados con energías  $+E_p$  y  $-E_p$ ; más sin embargo, su promedio sobre un estado con energía definida ( $+E_p$  o  $-E_p$ ) es cero.

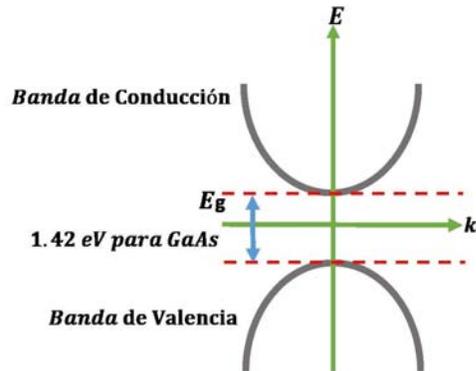


Figura 4.2: Ilustración esquemática típica de la estructura de banda de semiconductores. Aquí se muestra la banda de conducción (electrones) y banda de valencia (huecos pesados) para el compuesto de *GaAs* en el cual su brecha energética es de  $1.42\text{eV}$ .

hecho tan violentas que, aunque la velocidad instantánea es  $c$ , sólo se detectaría la velocidad asociada  $\left(\left\langle\frac{c^2\hat{p}}{\hat{H}}\right\rangle\approx\left\langle\frac{\hat{p}}{m}\right\rangle\right)$  al desplazamiento efectivo. La existencia del efecto *Zitterbewegung* en la mecánica cuántica relativista y en la teoría cuántica de campos ha sido un tópico recurrente de discusión en los últimos años, pues ha sido prácticamente inaccesible experimentalmente. A la fecha (2015), no ha habido aún evidencia experimental de su existencia en Física de altas energías.

Sin embargo, la analogía entre la estructura de banda de semiconductores y la ecuación de Dirac para electrones relativistas en el vacío, sugiere fuertemente que los electrones en semiconductores experimenten el efecto *Zitterbewegung*. Es bien sabido que la brecha fundamental, entre la banda de conducción y la banda de valencia de algunos semiconductores es  $\sim 1\text{eV}$ , *e.g.* el valor para el *GaAs* es de  $1.42\text{eV}$  (ver fig. 4.2), el cual es muy pequeño comparado con la brecha entre las soluciones positivas y negativas de la energía de la ecuación de Dirac para un electrón libre en el vacío ( $\sim 1\text{MeV}$ ), que corresponde a frecuencias  $\sim 10^{15}\text{Hz}$ , lo que hace factible

la observación del *Zitterbewegung* en semiconductores. John Schliemann y colaboradores [26] fueron los primeros en proponer un experimento en donde éste fenómeno debería ocurrir en varias situaciones en sólidos, en particular en gases de electrones bidimensionales confinados en heteroestructuras semiconductores del grupo *III – V* tipo *Zinc-Blenda* con fuerte interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus<sup>3</sup>. En su trabajo, Schliemann *et al.* mostraron mediante el análisis mecánico-cuántico de la evolución temporal de paquetes de onda electrónicos, que el valor esperado del vector de posición experimenta un comportamiento oscilatorio característico del *Zitterbewegung*. Asimismo, encontraron que si el espín del electrón está inicialmente polarizado (dirección  $z$ , para un espín-órbita en el plano), entonces el movimiento oscilatorio del *Zitterbewegung* es siempre perpendicular a la velocidad de grupo del paquete de ondas.

En el trabajo teórico de S.-Q. Shen [28] se estableció la conexión del efecto Hall de espín<sup>4</sup> y la fuerza transversal que experimentan los electrones en estos sistemas y el *Zitterbewegung*. Subsecuentemente, Q. Xu y colaboradores [30] realizaron estudios teóricos del transporte de electrones espín polarizados con interacción espín-órbita en geometrías tipo guía de onda con multicanales de transporte. Muestran que el efecto *Zitterbewegung* y el efecto Hall de espín resultan del mismo mecanismo, esto es, son

---

<sup>3</sup>El efecto del *Zitterbewegung* debería en principio aparecer en sólidos, en particular en semiconductores de brecha energética estrecha que se caracterizan por tener un espectro electrónico de excitación agrupados en dos bandas separadas por una brecha energética diferente de cero, por lo que su espectro de energías es similar al espectro del Hamiltoniano de Dirac.

<sup>4</sup>En 2006 V. Sih y colaboradores [29] realizaron estudios experimentales sobre la corriente de espín eléctricamente inducida y que es generada por el efecto Hall de espín (SHE) en estructuras de *GaAs*. Sus experimentos fueron finamente diseñadas de tal forma que distingue los efectos de borde de aquellos generados por transporte de espín, SHE.

formados a través de los estados coherentes de electrones espín orientados con espín opuesto y provenientes de diferentes sub-bandas de espín dentro de la misma guía de onda.

En un reciente trabajo teórico realizado por Frolova *et al.*[17], investigan dentro del formalismo de funciones Green, la evolución temporal de paquetes de onda electrónicos en un sistema bidimensional en presencia de la interacción de espín-órbita de Rashba. En su trabajo consideran dos situaciones de interés, la dinámica de paquetes gaussianos espín polarizados con fuerte interacción espín-órbita de Rashba, tanto en una (1D) como en dos dimensiones (2D). El primer caso (1D), tiene solución exacta y reportan expresiones analíticas para el valor esperado de la posición y de la polarización de espín dependientes del tiempo que revelan la existencia del efecto *Zitterbewegung*. El caso (2D) es resuelto numéricamente por no tener solución analítica, sin embargo de igual forma muestra las características típicas del *Zitterbewegung*. Su estudio es de gran relevancia para el trabajo numérico de esta tesis, pues nos permitirá realizar un análisis sistemático y comparativo de algunos casos límites, además de que a su vez nos permitirá establecer la exactitud y veracidad de nuestros cálculos.

Habiendo dicho esto, en el siguiente capítulo se ofrece una descripción resumida del formalismo de funciones de Green empleado por Frolova *et al.* [17] y que será de gran importancia en nuestra implementación numérica, análisis y discusiones de nuestros resultados en los capítulos subsiguientes.

## 5. Dinámica: formalismo con funciones de Green

### 5.1 Dinámica de paquetes de onda con Rashba

En esta sección consideramos específicamente la dinámica de paquetes de onda con interacción espín-órbita de Rashba usando el formalismo de funciones de Green desarrollado por Frolova y colaboradores [17]. El Hamiltoniano total del sistema tomando en cuenta la interacción espín-órbita  $H_R$  (descrito en la ec. (3.8)), está dado por

$$H = H_0 + H_R = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{\alpha_R}{\hbar}(p_y\sigma_x - p_x\sigma_y), \quad (5.1)$$

donde  $p = |\mathbf{p}|$  es la magnitud del momento de los electrones de masa efectiva  $m^*$  y  $\alpha_R$  es la constante de acoplamiento espín-órbita de Rashba. El espectro de eigenenergías del Hamiltoniano (5.1) conduce a la siguiente expresión (descrita anteriormente en la ecuación (3.13)),

$$\epsilon_{\pm}(p) = \frac{p^2}{2m^*} \pm \frac{\alpha_R}{\hbar}p, \quad (5.2)$$

donde  $p = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ . Las eigenfunciones correspondientes a la ecuación (5.1) son

$$\phi_{p,s}(r) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\hbar} e^{ip \cdot r} \begin{pmatrix} 1 \\ -ise^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (5.3)$$

donde  $\varphi$  es el ángulo entre el momento  $\mathbf{p}$  del electrón y el eje  $x$ , por lo que  $e^{i\varphi} = \frac{p_x + ip_y}{p}$ ;  $s = \pm 1$  denota el índice de espín. Usando la definición de velocidad en la representación de *Heisenberg*, tenemos  $v = dr/dt = i/\hbar[H, r]$ , que conduce a las siguientes componentes del operador velocidad,

$$v_x = \frac{p_x}{m^*} - \frac{\alpha_R}{\hbar}\sigma_y, \quad v_y = \frac{p_y}{m^*} + \frac{\alpha_R}{\hbar}\sigma_x. \quad (5.4)$$

Ahora procederemos a construir la función de Green asociada al Hamiltoniano (5.1), y definida por  $G = (\epsilon(p)\mathbf{1} - H)^{-1}$ . Note que, por ser  $H$  dependiente del término de espín-órbita, ésta genera una matriz de Green no-diagonal de dimensión de  $2 \times 2$ , de la forma

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.5)$$

donde los elementos de matriz de la función de Green (5.5) en términos de las soluciones de los eigenestados de (5.1) se pueden escribir en su forma integral como;

$$G_{ik}(r, r', t) = \sum_s \int dp \phi_{ps,i}(r, t) \phi_{ps,k}^*(r', 0) \quad (5.6)$$

donde  $i, k = 1, 2$  son los índices que denotan los elementos de la matriz de (5.5). Note que la función de Green  $G_{ik}$  (que representa aquí el propagador de movimiento del sistema) depende de la eigenfunción  $\phi_{ps,i}^*(r', 0)$  para un estado inicial ( $t_0 = 0$ ) y para un estado dependiente del tiempo  $t$  ( $\phi_{ps,i}(r, t)$ ). Esta última se puede obtener usando la descripción de *Schrödinger* para la evolución temporal del operador  $\phi_{ps,i}(r, 0)$ , es decir, a través de la ecuación de evolución temporal del estado,

$$\phi_{ps,i}(r, t) = e^{\frac{-i}{\hbar}\epsilon(p)t} \phi_{ps,i}(r, 0). \quad (5.7)$$

Sustituyendo las expresiones (5.7) y (5.3), en la ecuación (5.6), se obtienen los elementos de matriz  $G_{ik}$ . Éstas se usarán en la siguiente sección para conocer la función de onda del sistema en una posición y tiempo dado conociendo las condiciones iniciales del problema. Por simplicidad matemática se considera el caso unidimensional, el caso bidimensional no tiene solución exacta conocida.

## 5.2 Evolución temporal en 1D con Rashba

En esta sección se examina la solución analítica del problema en una dimensión de la evolución dinámica de un paquete de ondas electrónico con Rashba. Se considera como condición inicial un paquete de ondas espín polarizado con perfil gaussiano, de dispersión (a  $t = 0$ )  $\sigma_0$ , moviéndose en dirección  $x$  con momento  $p_{0x}$

$$\Psi(x, 0) = ce^{\left(-\frac{x^2}{2\sigma_0^2} + \frac{ip_{0x}}{\hbar}\right)} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = f(x) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

con  $c = \left(\frac{1}{\sigma_0 L_y \sqrt{\pi}}\right)^{1/2}$  y donde  $L_y$  es la longitud del sistema en dirección  $y$ . En este caso, la desviación cuadrática media del operador de posición  $\langle(\Delta x)^2\rangle$  es igual a  $\sigma_0^2/2$ , mientras que la desviación cuadrática media del operador de momento  $p_x$  es  $\langle(\Delta p_x)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2\sigma_0^2}$ , con el promedio de  $p_x$  igual a  $p_{0x}$ . La descripción de la evolución temporal que rige este sistema es obtenida con la ayuda de las funciones de Green. Partimos de la función de onda para cualquier tiempo arbitrario que, en términos de

las funciones de Green está dada por

$$\Psi(x, t) = \int dx' G(x, t; x', 0) \Psi(x', 0) \quad (5.9)$$

reescribiendo la ecuación (5.9) en términos de sus espinores, se lee

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, t) \\ \Psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \int dx' G(x, t; x', 0) \begin{pmatrix} \Psi_1(x', 0) \\ \Psi_2(x', 0) \end{pmatrix} \quad (5.10)$$

donde de la ecuación (5.8) conocemos el valor para las condiciones iniciales  $\Psi_1(x', 0)$  y  $\Psi_2(x', 0)$ , por tanto podemos reescribir (5.8) de la siguiente forma

$$\Psi(x', 0) = f(x') \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Psi_1(x', 0) \\ \Psi_2(x', 0) \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

por lo que la ecuación (5.10) se reescribe como

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, t) \\ \Psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \int dx' \begin{pmatrix} G_{11}\Psi_1(x', 0) + G_{12}\Psi_2(x', 0) \\ G_{21}\Psi_1(x', 0) + G_{22}\Psi_2(x', 0) \end{pmatrix}, \quad (5.12)$$

y de las condiciones iniciales,  $\Psi_1(x', 0) = f(x')$  y  $\Psi_2(x', 0) = 0$ , se simplifica a

$$\begin{pmatrix} \Psi_1(x, t) \\ \Psi_2(x, t) \end{pmatrix} = \int dx' \begin{pmatrix} G_{11}f(x') \\ G_{21}f(x') \end{pmatrix}. \quad (5.13)$$

Evidentemente solo resta conocer los elementos de matriz  $G_{11}$  y  $G_{21}$  debido a que se definió la polarización incidente de la forma  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Ahora bien, de la ecuación (5.6) se

obtiene que en general en 2D los elementos de matriz están dados por

$$G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty e^{-i\frac{p^2 t}{2m^*\hbar} + i\frac{p(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\hbar}} \cos\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) dp \quad (5.14)$$

$$G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int_0^\infty e^{-i\frac{p^2 t}{2m^*\hbar} + i\frac{p(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\hbar}} \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) \frac{p_x + ip_y}{p} dp \quad (5.15)$$

donde  $\alpha = \frac{\alpha_R}{\hbar}$ , que con ayuda la siguiente identidad en términos de funciones Bessel,

$$e^{iq\cos\psi} = J_0(q) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(q) \cos(2n\psi) + 2i \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n-1}(q) \sin((2n-1)\psi) \quad (5.16)$$

se puede mostrar que las ecuaciones (5.14) y (5.15) se pueden escribir,

$$G_{11}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty e^{-i\frac{p^2 t}{2m^*\hbar} J_0\left(\frac{p(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\hbar}\right)} \cos\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) p dp \quad (5.17)$$

$$G_{21}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t) = \frac{(x-x') + i(y-y')}{2\pi\hbar^2(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)} \int_0^\infty e^{-i\frac{p^2 t}{2m^*\hbar} J_1\left(\frac{p(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{\hbar}\right)} \operatorname{sen}\left(\frac{\alpha p t}{\hbar}\right) p dp, \quad (5.18)$$

donde  $J_0$  y  $J_1$  son funciones de Bessel de orden 0 y 1 respectivamente. Hasta aquí ya se conocen los elementos de matriz  $G_{11}$  y  $G_{21}$  (aunque en forma integral). Sustituyendo estas en la ecuación (5.13) y resolviendo las integrales para el caso de Rashba en 1D, se llega a expresiones analíticas para las componentes del espinor  $\Psi_{1,2}(x, t)$  y por tanto de la densidad de probabilidad electrónica  $\rho_{1,2}(x, t) = |\Psi_{1,2}(x, t)|^2$  para cualquier tiempo arbitrario. Estas últimas dadas explícitamente por

$$\begin{aligned}
|\Psi_1|^2 = & \frac{c^2}{[1 + \gamma^2 t^2]^{\frac{1}{2}}} \left\{ \exp\left[-\frac{[x + (\frac{\alpha_R}{\hbar} - \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] + \exp\left[-\frac{[x - (\frac{\alpha_R}{\hbar} + \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] + \right. \\
& \left. 2\exp\left[-\frac{[x + (\frac{\alpha_R}{\hbar} - \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2 + [x - (\frac{\alpha_R}{\hbar} + \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{2\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] \cos\left[\frac{2(k_0\sigma_0^2 + \gamma tx)\frac{\alpha_R t}{\hbar}}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] \right\}
\end{aligned} \tag{5.19}$$

$$\begin{aligned}
|\Psi_2|^2 = & \frac{c^2}{[1 + \gamma^2 t^2]^{\frac{1}{2}}} \left\{ \exp\left[-\frac{[x + (\frac{\alpha_R}{\hbar} - \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] + \exp\left[-\frac{[x - (\frac{\alpha_R}{\hbar} + \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] - \right. \\
& \left. 2\exp\left[-\frac{[x + (\frac{\alpha_R}{\hbar} - \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2 + [x - (\frac{\alpha_R}{\hbar} + \frac{\hbar k_0}{m^*})t]^2}{2\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] \cos\left[\frac{2(k_0\sigma_0^2 + \gamma tx)\frac{\alpha_R t}{\hbar}}{\sigma_0^2(1 + \gamma^2 t^2)}\right] \right\}
\end{aligned} \tag{5.20}$$

con  $c = (\frac{1}{\sigma_0 L_y \sqrt{\pi}})^{1/2}$ ,  $\gamma = \hbar/\sigma_0^2 m^*$  y  $\hbar k_0 = p_{0x}$ . Note que  $\rho_{1,2}(x, t)$  tienen un factor que oscila en el tiempo (del argumento del coseno se puede extraer la frecuencia de oscilaciones). Si definimos  $\eta \equiv \frac{m^{*2}(\frac{\alpha_R}{\hbar})^2 \sigma_0^2}{\hbar^2}$ , la densidad de probabilidad electrónica total  $\rho(x, t) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$  toma la forma

$$\rho(x, t) = \frac{2c^2}{\sqrt{1 + \frac{(\frac{\alpha_R}{\hbar})^2 t^2}{\sigma_0^2 \eta}}} \left\{ \exp\left[\frac{-[x + \frac{\alpha_R}{\hbar}(1 - \frac{\sigma_0}{\sqrt{\eta}})t]^2}{\sigma^2 + (\frac{\alpha_R}{\hbar})^2 \frac{t^2}{\eta}}\right] + \exp\left[\frac{-[x - \frac{\alpha_R}{\hbar}(1 + \frac{\sigma_0}{\sqrt{\eta}})t]^2}{\sigma^2 + (\frac{\alpha_R}{\hbar})^2 \frac{t^2}{\eta}}\right] \right\}. \tag{5.21}$$

Es muy ilustrativo analizar ciertos casos extremos que nos darán información valiosa del fenómeno de propagación de los paquetes de onda bajo la presencia del efecto Rashba así como de la formación del *Zitterbewegung*. Estas expresiones serán también de utilidad más adelante para la verificación de mis resultados numéricos.

### 5.2.1 Caso: acoplamiento Rashba débil

De la definición de  $\eta$ , considere  $\eta \ll 1$ . Esto implica que  $(\frac{\alpha_R}{\hbar}\sigma_0)$  debe ser muy pequeño para una dispersión  $\sigma_0$  dada, por tanto este límite implica tomar valores del parámetro  $\alpha_R$  pequeños. Si recordemos que el valor esperado del operador de momento es  $\langle(\Delta p_x)^2\rangle = \frac{\hbar^2}{2\sigma_0^2}$  esto implica que se debe satisfacer  $\langle(\Delta p_x)^2\rangle \gg (m^*\frac{\alpha_R}{\hbar})^2$ , mostrando que la densidad de probabilidad electrónica exhibirá un comportamiento sin oscilaciones, al igual que el caso sin el término de Rashba (ver 5.19 y 5.20).

### 5.2.2 Caso: acoplamiento Rashba fuerte

Por otra parte, cuando  $\eta \gg 1$ , implica valores de  $\alpha_R$  grandes ocasionando que el paquete inicial se divida en dos partes conforme su evolución temporal, las cuales se propagan con velocidades de grupo diferente. Esto se ve más claramente de las ecuaciones (5.19) y (5.20). En la región antes de la separación de estos paquetes se predice un traslape de las funciones de onda  $\Psi_1(x, t)$  y  $\Psi_2(x, t)$  que es originado por la interferencia entre los estados de las diferentes polarización de espín electrónico.

## 5.3 Oscilaciones de *Zitterbewegung*

Regresando a las ecuaciones (5.19) y (5.20), se observa que el tercer término de cada una, está descrito por una exponencial modulada por una función coseno. Por tanto del argumento del coseno se puede extraer la frecuencia de las oscilaciones de la densidad de probabilidad. El periodo de estas oscilaciones, en la dirección  $x$ , está

dado por

$$\tau = \frac{\pi\sigma_0^2}{\frac{\alpha_R}{\hbar}\gamma t^2}(1 + \gamma^2 t^2) = \frac{\pi\sigma_0^2}{\frac{\alpha_R}{\hbar}t} \left( \frac{1}{\gamma t} + \gamma t \right). \quad (5.22)$$

Para el análisis de la dependencia temporal de estas oscilaciones consideramos los siguientes casos,  $\gamma t \ll 1$  y  $\gamma t \gg 1$ . Claramente de la expresión (5.22) el término dominante es  $\frac{1}{\gamma t}$  por lo que,  $\tau = \frac{\pi m^* \sigma_0^4}{\frac{\alpha_R}{\hbar} t^2}$  indicando que el periodo de oscilación depende de la dispersión y decrece conforme  $t$  aumenta. Similarmente para  $\gamma t \gg 1$ , el término dominante de (5.22) es  $\gamma t$ , que conduce a  $\tau = \frac{\pi \hbar}{\frac{\alpha_R}{\hbar} m^*}$  e indicando que el periodo de oscilación no depende del tiempo  $t$ .

## 5.4 Evolución temporal de la densidad electrónica

Para ilustrar la evolución temporal de la densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$ , se grafican las ecuaciones (5.19) y (5.20) en la Fig. 5.1. Los parámetros de simulación fueron escogidos para un gas bidimensional formado en un sistema de *GaAs/InGaAs*, estos fueron los siguientes: masa efectiva del electrón  $m^* = 0.05m_0$ , el parámetro acoplamiento de Rashba  $\frac{\alpha_R}{\hbar} = 3.6 \times 10^6 \text{ cm s}^{-1}$  (*i.e.* que corresponderían a una  $\alpha_R = 2.369 \times 10^{-11} \text{ eV m}$ ), dispersión inicial de  $\sigma_0 = 10^{-5} \text{ cm}$ , y número de onda inicial  $k_0 = 2.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . Se muestran resultados para diferentes tiempos,  $t_1 = 0$ ,  $t_2 = 1.5$ ,  $t_3 = 7$  (en unidades de  $\tau_0 = \gamma^{-1}$ , con  $\tau_0 = 4.33 \text{ ps}$ ). Se observa de la Fig. (5.1), que a medida que el paquete inicial ( $t_1 = 0$ ) evoluciona con el tiempo, este se desdobra en dos paquetes gaussianos ( $t_2$ ) con velocidades diferentes y eventualmente a tiempos suficientemente largos ( $t_3$ ), estos dos paquetes tienden

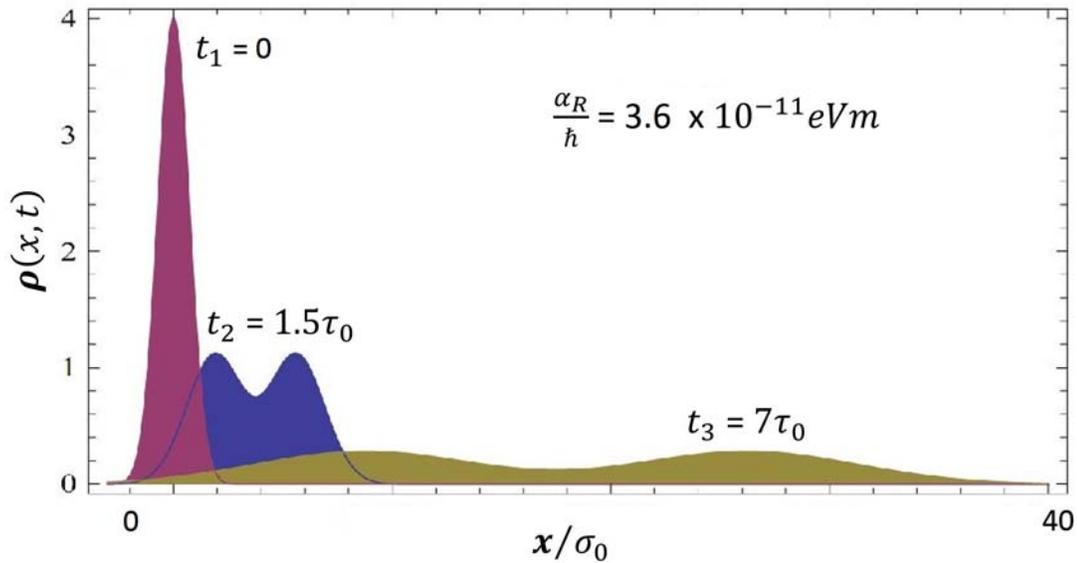


Figura 5.1: Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x) = |\Psi_1|^2 + |\Psi_2|^2$  con acoplamiento espín-órbita de Rashba para diferentes tiempos como función de la posición. A  $t_1 = 0$  se considera un paquete de onda espín polarizado con perfil gaussiano con  $\sigma_0 = 10^{-5} \text{cm}$ . A  $t_2 = 1.5\tau_0$  ya se observa el desdoblamiento del paquete de onda en dos parte simétricas aunque con probabilidad disminuida. A  $t_3 = 7\tau_0$  los paquetes con velocidades opuestas finalmente se separan. Se utilizó  $\frac{\alpha_R}{\hbar} = 3.6 \times 10^6 \text{cm.s}^{-1}$ , y tiempos en unidades de  $\tau_0 = \gamma^{-1}$  en unidades de  $\tau_0 = 4.33 \text{ps}$ .

a separarse espacialmente, esto al tiempo que su dispersión aumenta y su amplitud decrece, como generalmente ocurre para el caso de la partícula libre.

Asimismo, se realizó el estudio de otras propiedades importantes como es la dinámica de espín. La evolución temporal de la densidad de espín se calcula a través de la siguiente expresión

$$S_i(x, t) = \frac{\hbar}{2} (\Psi_1^*, \Psi_2^*) \sigma_i \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} (|\Psi_1(x, t)|^2 - |\Psi_2(x, t)|^2), \quad i = x, y, z \quad (5.23)$$

Es importante señalar que la expresión (5.23) en conjunto con (5.19) y (5.20) produce un comportamiento oscilatorio de la densidad de espín como función de la posición  $x$

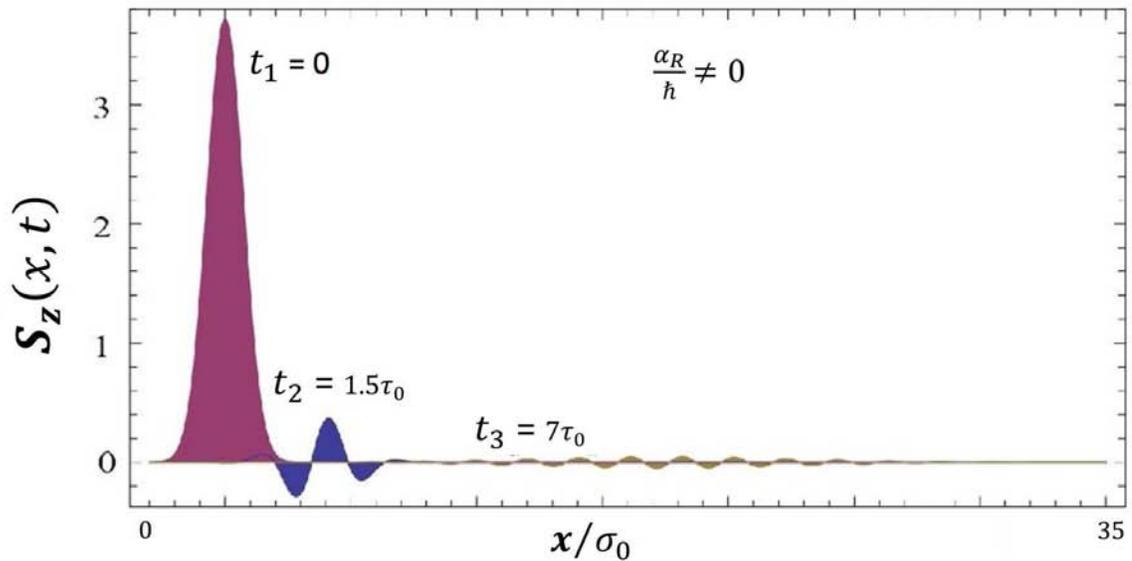


Figura 5.2: Densidad de probabilidad de espín en dirección  $z$  con acoplamiento espín-órbita de Rashba para diferentes tiempos,  $t_1 = 0$ ,  $t_2 = 1.5$ ,  $t_3 = 7$  ( $\alpha = 3.6 \times 10^6 \text{cms}^{-1}$ , y tiempo en unidades de  $\tau_0 = \gamma^{-1}$ ).

(ver Fig. (5.2)). Note que para cierto tiempo ( $t_2$ ), además de haber contribuciones negativas y positivas de la densidad de espín, esta exhibe un comportamiento oscilatorio que decrecen conforme evoluciona con el tiempo. Nótese también que las funciones de onda  $|\psi_{1,2}(x, t)|$  sólo dependen de la coordenada espacial  $x$ , por lo que  $\langle p_y \rangle = p_y = 0$ .

Por otro lado la velocidad promedio en la coordenada espacial en  $x, y$  están dadas por  $\langle v_{x,y}(t) \rangle = \langle \Psi | \tilde{v}_{x,y} | \Psi \rangle$ , y explícitamente por

$$\langle v_x(t) \rangle = \frac{\hbar k_0}{m} \quad (5.24)$$

$$\langle v_y(t) \rangle = -\frac{\alpha_R}{\hbar} \text{Sen} \left[ 2k_0 \frac{\alpha_R t}{\hbar} \right] e^{-\left[ \frac{\alpha_R t}{\sigma_0} \right]^2} \quad (5.25)$$

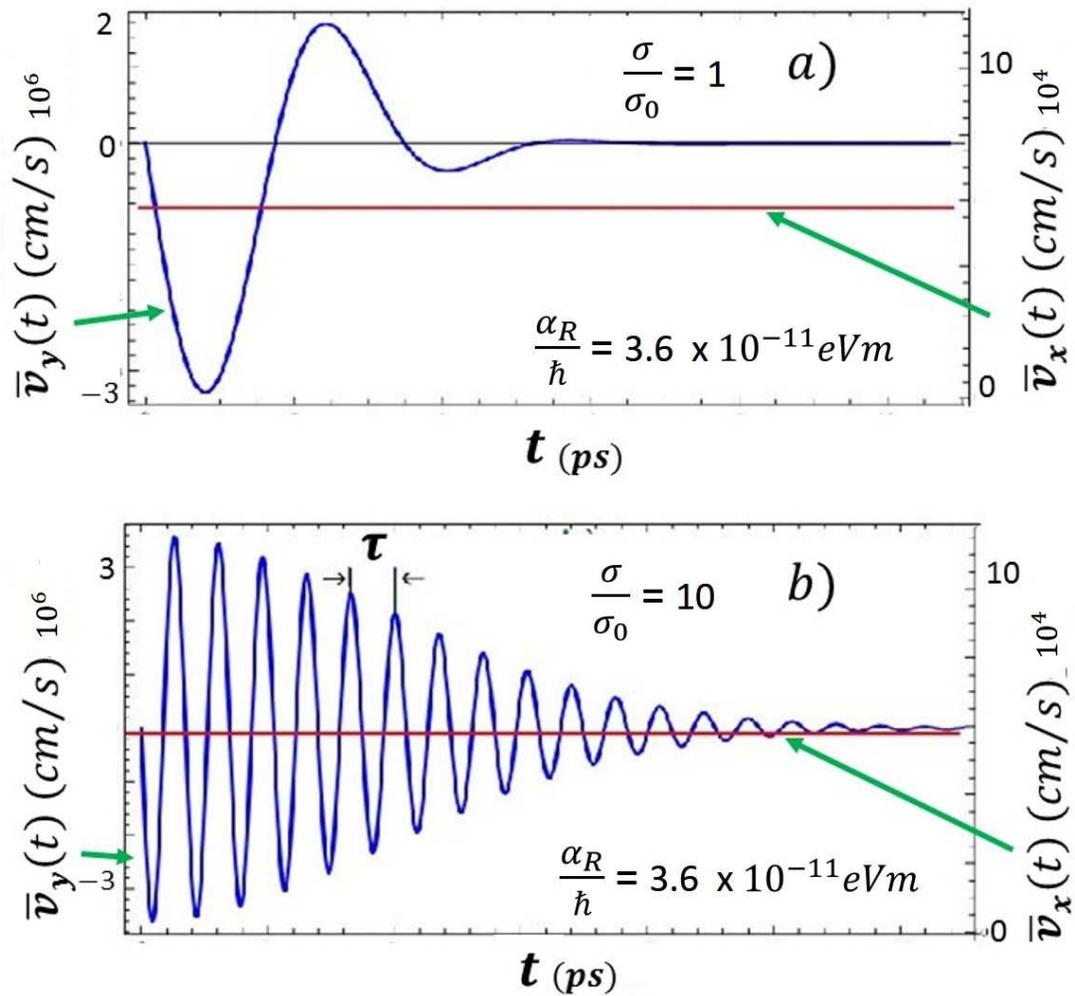


Figura 5.3: Variación de las componentes de la velocidad media con el tiempo,  $\langle v_y \rangle$  es la línea de color azul y  $\langle v_x \rangle$  es la línea de color rojo. Para las dos gráficas se utilizó  $k_0 = 2.5 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ . La diferencia en cada gráfica es el valor de la dispersión: a) se utilizó  $\sigma = \sigma_0$  y para el caso b) se utilizó  $\sigma = 10\sigma_0$  (con  $\sigma_0 = 1 \times 10^{-5} \text{ cm}$ ), también se muestra el periodo  $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$  donde  $\omega = 2k_0\alpha$ .

En la figura (5.3) se muestran las gráficas de las velocidades promedio donde claramente sólo la componente de la velocidad media  $\langle v_y(t) \rangle$  tiene dependencia temporal. En particular para el caso de la componente de la velocidad  $\langle v_y \rangle$  (curva de color azul), se observa que esta componente exhibe un comportamiento oscilatorio en dirección transversal a su dirección de propagación  $x$ , (*i.e.* *Zitterbewegung*) con frecuencia  $2k_0 \frac{\alpha R}{\hbar}$ . La diferencia entre las gráficas de la figura (5.3) es el valor de la dispersión inicial, (5.3a) tiene una dispersión menor comparada con (5.3b), por lo que se observa más oscilaciones. Esto se puede inferir de la relación  $\tau = \frac{\pi m^* \sigma_0^4}{\alpha \hbar t^2}$ , que indica que el periodo de oscilación depende de la dispersión y decrece conforme  $t$  aumenta.

No es difícil mostrar que el caso de Dresselhaus 1D produce exactamente los mismos resultados que el caso de Rashba 1D, por lo que se omitieron los cálculos para este caso. La situación en 2D no tiene solución analítica para ninguno de los dos casos. Los resultados mostrados en este capítulo serán de gran utilidad más adelante para la verificación de mis resultados numéricos de la evolución dinámica y *Zitterbewegung* en 1D y 2D. A continuación en el capítulo 6 se analizará la metodología y procedimiento numérico que implementamos para tal fin.

## 6. Modelo e implementación numérica

### 6.1 Introducción

Como se mencionó en capítulos anteriores, es bien sabido que las características del fenómeno del *Zitterbewegung* en semiconductores son mucho más favorables que en el vacío, sin embargo en la práctica resulta difícil seguir el movimiento de un solo electrón por lo que típicamente se estudia el movimiento de muchos electrones moviéndose en fase. El modelo que se detallará a continuación posee la característica de que se le puede incluir fácilmente variedad de parámetros físicos (*e.g.* campos eléctricos y magnéticos externos) de interés. Además la técnica numérica nos permite estudiar diferentes geometrías, con amplio rango de parámetros de simulación para los efectos de Rashba/Dresselhaus. Asimismo el método permite imponer variedad con condiciones físicas iniciales y de frontera, así como estados de polarización de espín arbitraria.

En este capítulo, se describirá el modelo numérico que se empleó para el estudio de la dinámica de paquetes de onda electrónicos. El método consiste fundamentalmente en la solución numérica de la ecuación de Schrödinger bidimensional dependiente del tiempo en presencia de la interacción de espín-órbita Rashba y Dresselhaus. Recuerde que la solución a este problema no tiene solución analítica exacta en 2D, como se discutió en el capítulo anterior, aunque sí el caso 1D. Otras limitaciones de

la solución analítica es por ejemplo su dependencia en el uso de paquetes de onda del tipo gaussiano, además no es posible incluir efectos de campos externos (eléctricos ni magnéticos), ni implementar el formalismo a geometrías más complicadas.

En particular, en el esquema de cálculo utilizado escogimos a los paquetes de onda electrónicos incidentes con un perfil gaussiano bidimensional (este puede estar polarizado, o no, en espín). Aunque, como ya se mencionó mi esquema permite utilizar paquetes de onda con perfil arbitrario.

La metodología que describiremos en detalle más adelante, consiste esencialmente en utilizar la técnica de diferencias finitas aplicada a ecuaciones diferenciales de segundo orden bidimensionales, en conjunto con el método de Goldberg y Schey [40] para el estudio de la evolución temporal, pero generalizado en 2D para incluir la dependencia en espín a través de los acoplamientos espín-órbita. Se verá que la presencia del acoplamiento espín-órbita conduce a sistemas de ecuaciones acopladas en espín; sin embargo estas pueden ser convenientemente desacopladas por medio de transformaciones unitarias en cada paso de iteración temporal. La introducción de ciertas funciones auxiliares nos permitió resolver de manera iterativa la función de onda para todo el espacio y tiempo dadas las condiciones iniciales y de frontera del problema. Esto a su vez nos permitió estudiar la dinámica de los paquetes de onda y los efectos del acoplamiento espín-órbita en la evolución temporal de los paquete de onda. Se calcularon numéricamente los valores esperados de posición en el tiempo, densidad de probabilidad y polarización de espín, entre otras cantidades físicas que nos permitieron realizar un estudio sistemático de la dinámica de los paquetes de onda

electrónicos y del *Zitterbewegung* en tales sistemas.

## 6.2 Modelo físico y metodología

El sistema en consideración es un gas bidimensional electrónico (GE2D) definido en el plano  $x$ - $y$  de una heteroestructura semiconductor y en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus. La ecuación de movimiento de los vectores de estado bidimensionales que gobierna el comportamiento de los electrones esta dada por (en el esquema de interacción)

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(x, y, t)\rangle = H|\psi(x, y, t)\rangle \quad (6.1)$$

donde el Hamiltoniano total del sistema esta dado por  $H = H_0 + V(x, y; t) + H_{so}$ , con  $H_0$  el Hamiltoniano que contiene el operador de momento, donde  $V(x, y; t)$  es un potencial arbitrario, dependiente del tiempo en general. Por simplicidad en la descripción de la metodología, lo consideraremos independiente del tiempo y constante a intervalos, es decir el potencial de confinamiento es traslacionalmente invariante en cualquier dirección perpendicular al eje  $z$ .  $H_{so}$  es el Hamiltoniano que contiene la interacción de acoplamiento espín-órbita de Rashba  $H_R$  y Dresselhaus  $H_D$  ( $H_{so} = H_R + H_D$ ). Dado que podemos descomponer, explícitamente

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*}(p_x^2 + p_y^2) = -\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\mathbf{1} \quad (6.2)$$

$$H_R = \frac{\alpha_R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) = i\alpha_R \left( \sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (6.3)$$

$$H_D = \frac{\alpha_D}{\hbar}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) = i\alpha_D \left( \sigma_x \frac{\partial}{\partial x} - \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \right) \quad (6.4)$$

con  $m^*$  la masa efectiva del electrón, para gases bidimensionales basados en *GaAs*,  $m^* \sim 0.067$ ,  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  donde  $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$  y  $p_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$  son la proyección del operador de momento lineal en el plano  $x - y$ , con  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$  las matrices de Pauli y finalmente  $\alpha_R$  y  $\alpha_D$  son los parámetros de acoplamiento de Rashba y Dresselhaus respectivamente. La solución general a la ecuación de movimiento (6.1) está dada por

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{i(t-t_0)H}{\hbar}} |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (6.5)$$

donde  $|\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle$  representa el estado de la función de onda para la solución inicial en el punto  $(x_0, y_0)$  para un tiempo  $t_0$ . Note que el operador  $e^{-\frac{i(t-t_0)H}{\hbar}}$  es Hermitiano pues  $H = H^\dagger$ . La proyección  $\langle x_0 y_0 |$  con el estado  $|\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle$  nos produce la función de onda  $\Psi(x_0, y_0, t_0)$ . Las componentes de la función de onda  $|\psi(x, y, t)\rangle$ , tiene la forma de un eigenespino de  $2 \times 1$

$$|\psi(x, y, t)\rangle = \begin{pmatrix} |\psi_\uparrow(x, y, t)\rangle \\ |\psi_\downarrow(x, y, t)\rangle \end{pmatrix}. \quad (6.6)$$

No es difícil demostrar que si  $[p_x, p_y] = 0$  y  $V(x, y)$  es uniforme, los elementos del Hamiltoniano  $H$  satisfacen las siguientes reglas de conmutación;  $[H, p_x] = [H, p_y] = 0$ ,  $[H_0, H_R] = 0$ ,  $[H_0, H_D] = 0$ ,  $[H_0, V] = 0$ ,  $[H_R, V] = 0$ ,  $[H_D, V] = 0$ , de igual forma

$[H_0, H_{so}] = 0$ . Sin embargo, debido a la no conmutatividad de las matrices de *Pauli*

$$([\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k);$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.7)$$

se obtiene que los Hamiltonianos de las interacciones de acoplamiento espín-órbita

tampoco conmutan *i.e.*  $[H_R, H_D] \neq 0$ . Por consiguiente la expresión<sup>1</sup>:  $e^{-\frac{i}{\hbar}H_{so}t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_R+H_D)t} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_D t} e^{[H_R, H_D]t^2/2\hbar^2}$  con  $[H_R, H_D] = H_{RD} = \frac{\alpha_R \alpha_D}{\hbar} \sigma_z \left( \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right)$ .

Similarmente  $e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0+H_{so})t} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}H_{so} t}$ , debido a que  $[H_0, H_{SO}] = 0$ . Por consiguiente, expandiendo las exponenciales en (6.5), se puede reescribir de la siguiente forma;

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iVt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_D t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_{RD} t}{\hbar}} |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (6.8)$$

Note además, que de la misma forma  $H_R$  y  $H_D$  se pueden descomponer en la suma  $H_R = H_R^x + H_R^y$  y  $H_D = H_D^x + H_D^y$  respectivamente, en  $H_R^x = i\alpha_R \sigma_y \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $H_R^y = -i\alpha_R \sigma_x \frac{\partial}{\partial y}$ ,

$H_D^x = i\alpha_D \sigma_x \frac{\partial}{\partial x}$  y  $H_D^y = -i\alpha_D \sigma_y \frac{\partial}{\partial y}$ . Análogamente debido a la anti-conmutación de

las matrices de Pauli se tiene que:  $e^{-\frac{i}{\hbar}H_R t} = e^{-\frac{i}{\hbar}(H_R^x+H_R^y)t} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_R^x} e^{-\frac{i}{\hbar}H_R^y} e^{\frac{i}{2\hbar}[H_R^x, H_R^y]t}$ ,

mientras que para el caso de Dresselhaus, la expresión se reescribe como;  $e^{-\frac{i}{\hbar}H_D t} =$

$e^{-\frac{i}{\hbar}(H_D^x+H_D^y)t} = e^{-\frac{i}{\hbar}H_D^x} e^{-\frac{i}{\hbar}H_D^y} e^{\frac{i}{2\hbar}[H_D^x, H_D^y]t}$ , donde  $[H_R^x, H_R^y] = -2\alpha_R^2 \sigma_z \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$  y  $[H_D^x, H_D^y] =$

$-2\alpha_D^2 i \sigma_z \frac{\partial^2}{\partial x \partial y}$  definiendo,  $H_R^{xy} = \frac{\alpha_R^2}{\hbar} \sigma_z \left( \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) t$  y  $H_D^{xy} = \frac{\alpha_D^2}{\hbar} \sigma_z \left( \frac{\partial^2}{\partial x \partial y} \right) t$ , (ver apéndice

C). Note que  $H_{R,D}^{xy}$  depende explícitamente del tiempo. Reescribiendo la ecuación

(6.8);

$$|\psi(x, y, t)\rangle = \prod_{\mu=0}^8 e^{-i\omega_\mu t} |\psi(x_0, y_0; t_0)\rangle \quad (6.9)$$

---

<sup>1</sup>usando la identidad de  $e^{A+B} = e^A e^B e^{-[A,B]/2}$

con  $w_0 = H_0$ ,  $w_1 = V(x, y; t)$ ,  $w_2 = H_R^x$ ,  $w_3 = H_R^y$ ,  $w_4 = H_R^{xy}$ ,  $w_5 = H_D^x$ ,  $w_6 = H_D^y$ ,  $w_7 = H_D^{xy}$  y  $w_8 = H_{RD}$ . Es decir obtenemos una ecuación genérica para la sucesión explícita de las exponenciales. Como quedará más claro adelante, el reescribir la solución dada a la ecuación de la función de onda (6.9) en términos de la multiplicatoria de propagadores, nos permitirá encontrar, la solución a la ecuación de onda total en cada iteración temporal de forma secuencial para cada uno de los propagadores a través de la definición de funciones auxiliares asociadas al propagador de la función de onda conocida.

### 6.3 Implementación numérica: caso Rashba

Siguiendo con la generalización de la ecuación (6.9), para obtener la solución general a esta ecuación se introduce primero el ket de la función auxiliar de  $\phi$  tenemos que  $|\phi_\mu\rangle$ , tal que;

$$|\phi_\mu(t)\rangle = e^{-iw_\mu t} |\phi_{\mu-1}(0)\rangle \quad (6.10)$$

donde  $|\phi_{\mu-1}(0)\rangle$  representa el estado de la función de onda para la solución inicial al punto  $(x_0, y_0)$  a un tiempo  $t_0$ , es decir,  $|\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle$ .

Siguiendo con el trabajo de *Goldberg* y *Schey* [46], se utiliza para el operador de evolución temporal la aproximación de *Cayley*<sup>2</sup>, que cabe mencionar, es una transformación unitaria y tiene la conveniencia de ser correcta hasta el orden  $\delta t^2$ . Usando

---

<sup>2</sup>La unitariedad es la característica de la ecuación de onda original, lo cual asegura que la normalización de la función de onda no cambie con el tiempo. Una aproximación unitaria simple para  $e^{-i\delta H}$  ésta dada por la forma de Cayley para el operador de evolución temporal, que tiene la conveniencia

Cayley la ecuación (6.10) se reescribe de la siguiente forma

$$|\phi_\mu(t)\rangle = \left[ \frac{\mathbf{1} - iw_\mu t}{\mathbf{1} + iw_\mu t} \right] |\phi_{\mu-1}(0)\rangle \quad (6.11)$$

por lo que podemos escribir

$$(\mathbf{1} + iw_\mu t)|\phi_\mu(t)\rangle = (\mathbf{1} - iw_\mu t)|\phi_{\mu-1}(0)\rangle \equiv |\chi_{\mu-1}(0)\rangle \quad (6.12)$$

reemplazando  $|\phi_\mu\rangle \rightarrow \phi_\mu$  y  $|\chi_{\mu-1}\rangle \rightarrow \chi_{\mu-1}$  sin pérdida de generalidad, la ecuación (6.12) se reescribe

$$(\mathbf{1} + iw_\mu t)\phi_\mu(t) = (\mathbf{1} - iw_\mu t)\phi_{\mu-1}(0) \equiv \chi_{\mu-1}(0) \quad (6.13)$$

la expresión (6.13) es una ecuación genérica para la sustitución explícita de las  $w_\mu$ 's ( $w_0 = H_0$ ,  $w_1 = V(x, y; t)$ ,  $w_2 = H_R^x$ ,  $w_3 = H_R^y, \dots$ ) que se resuelven por medio de definir funciones auxiliares ( $\phi$ 's,  $\rho$ 's,  $M$ 's, etc). Para resolver la ecuación (6.13) se procede a discretizarla y así poder resolver el sistema de ecuaciones en diferencias finitas. Esto conduce a la solución numérica de sistemas tridiagonales y ecuaciones de recurrencia simples para cada iteración de tiempo y para todo el espacio de la función de onda, con la cual se calcularon numéricamente los valores esperados

---

de ser correcto hasta el orden  $\delta^2$ ,

$$e^{-ix} = \frac{e^{-\frac{1}{2}ix}}{e^{\frac{1}{2}ix}} \simeq \frac{1 - \frac{i}{2}x}{1 + \frac{i}{2}x}$$

de posición en el tiempo, densidad de probabilidad y polarización de espín. La generalización del formalismo incluyendo ambos acoplamientos de espín-órbita, se realizó y se agregó en detalle en el apéndice C. Cabe mencionar que la implementación de esta técnica para el caso considerando solo la interacción de Dresselhaus ( $\alpha_D \neq 0$  y  $\alpha_R = 0$ ) se hace de forma análoga al caso de Rashba.

## 7. Resultados y discusiones

En este capítulo se analizarán los resultados numéricos obtenidos de nuestras simulaciones de la evolución temporal de paquetes de onda gaussianos bidimensionales espín polarizados en presencia del acoplamiento espín-órbita para sistemas confinados en heteroestructuras semiconductoras del tipo *InAs/InGaAs*. Empezamos con el caso estático  $k_0 = 0$  en presencia de la interacción de Rashba, posteriormente estudiamos el caso  $k_0 \neq 0$ . Luego procedemos a estudiar la inclusión del acoplamiento Dresselhaus y consideramos los casos  $\alpha_R = \alpha_D$  y  $\alpha_R \neq \alpha_D$ . Se calculan los valores esperados de la posición, densidad de probabilidad y polarización de espín como función del tiempo, entre otras cantidades físicas que nos permitieron realizar un estudio sistemático del *Zitterbewegung* en tales sistemas.

### 7.1 Estado estacionario con interacción de Rashba

Consideramos primeramente la situación de un paquete gaussiano estático ( $k_0 = 0$ ) polarizado en espín en la dirección  $+z$  que dejamos evolucionar en el tiempo en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba ( $\alpha_R \neq 0$ ). Los parámetros de la simulación empleados corresponden a un gas de electrones formado en un sistema *InAs/InGaAs*, y fueron los siguientes: masa efectiva del electrón  $m^* = 0.05m_0$ , intensidad del acoplamiento Rashba  $\alpha_R = 2\alpha_0$ , con  $\alpha_0 = 2 \times 10^{-11} eVm$ , dispersión

inicial del paquete  $\sigma_0 = 1400 \text{ \AA}$ , y finalmente, el sistema se dejó evolucionar hasta un tiempo máximo  $t_{max} = 7t_0$  (con  $t_0 = 1.84\text{ps}$ ). El cálculo numérico se realizó con los siguientes parámetros de simulación:  $\delta x = \delta y = 50\text{\AA}$ ,  $np_x = np_y = 900$  y  $ndt = 100$  con  $\delta t = 2.31 \times 10^{-14}\text{s}$ .

En la figura 7.1(a) se muestran la densidad de probabilidad  $\rho(x, y, t_{max})$  del paquete de onda electrónico como función de la posición en ausencia de Rashba ( $\alpha_R = 0$ ); en 7.2(a) se muestra su correspondiente mapa de intensidad en el plano  $x - y$ . Note que la densidad de probabilidad muestra un perfil gaussiano isotrópico, como era de esperarse. Sin embargo, cuando se incluye el acoplamiento de Rashba ( $\alpha_R \neq 0$ ), se observa un cambio significativo en  $\rho(x, y, t_{max})$  manifestándose como un patrón de interferencia simétrico (figuras 7.1(b) y 7.2(b)). En el capítulo 3 se explicó que la interacción espín-órbita de Rashba introduce un rompimiento de la degeneración de espín de los estados a la energía de Fermi. Se explicó también la naturaleza de este desdoblamiento es tal que permite que electrones con la misma energía tengan diferentes vectores de onda ( $k_1$  y  $k_2$ ), esto es,  $E^+(k_1) = E^-(k_2)$ . Esto produce que se tengan dos paquetes de onda propagándose con dos números de onda diferente. De hecho, la parte exterior de la distribución concéntrica de  $\rho(x, y, t)$  se propaga con velocidad de grupo mayor que  $\alpha_R/\hbar$  mientras que la parte interior se mueve con velocidad de grupo menor a  $\alpha_R/\hbar$ , esto produce un traslape  $\langle \Psi_{+k_1} | \Psi_{-k_2} \rangle \neq 0$  que se manifiesta como un perfil tipo interferencia de  $\rho(x, y, t)$  (7.2(a)), y por ende, la formación de anillos concéntricos en el mapa de intensidad de la densidad de probabilidad (7.2(b)). Estos resultados también son consistentes con el análisis realizado en

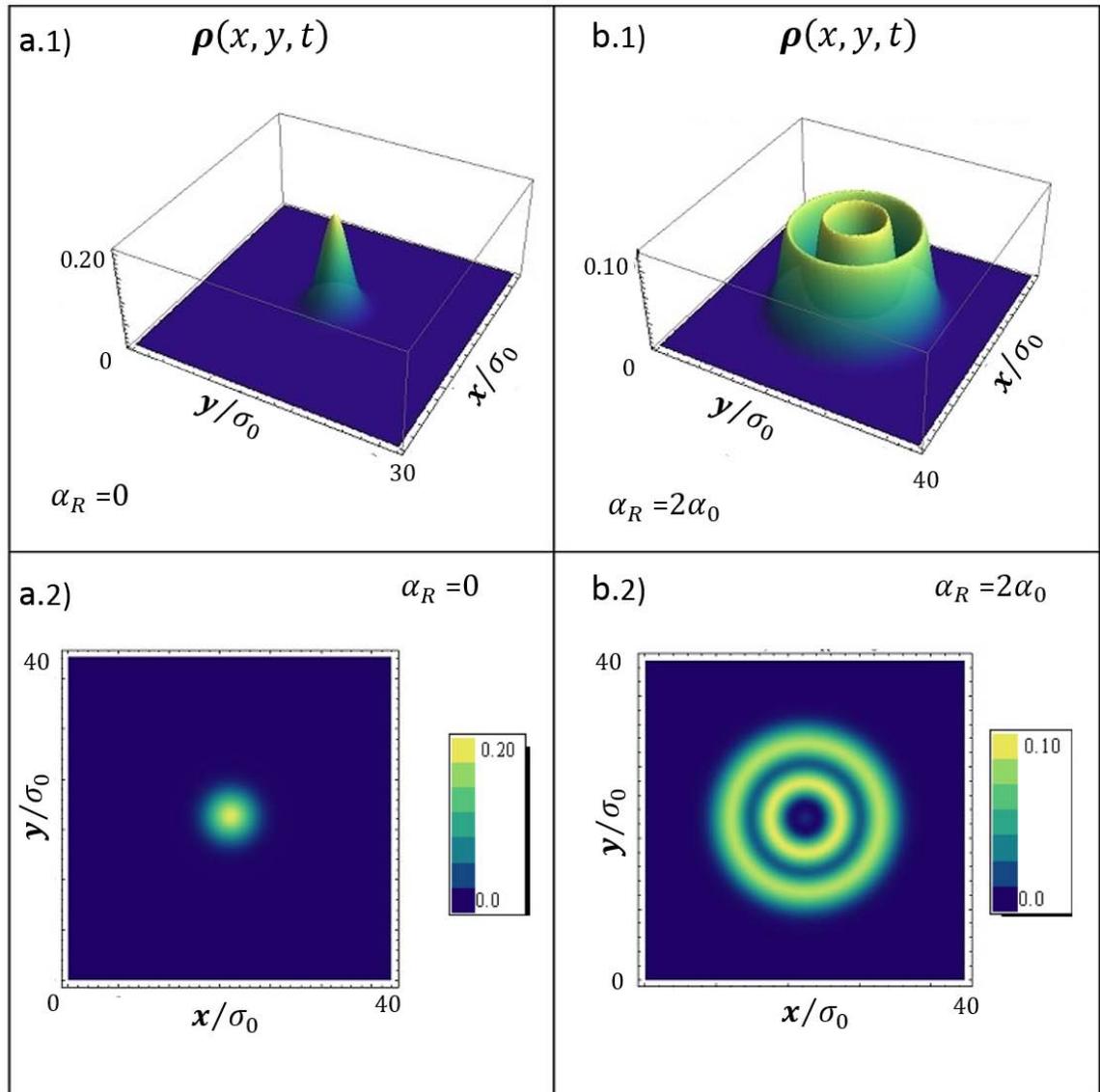


Figura 7.1: Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$  para un estado inicial del paquete gaussiano con  $k_0 = 0$ ,  $\sigma_0 = 1400\text{\AA}$ , a un tiempo de  $t_{max} = 7t_0$ . Del lado izquierdo de la figura, en a.1) se graficó el caso sin acoplamiento espín-órbita como referencia, (i.e.  $\alpha_R = 0$ ), a.2) muestra la gráfica del mapa de intensidades de  $\rho(x, y, t)$  en el plano  $x - y$ . Del lado derecho de la figura en b.1) se observa que el acoplamiento espín-órbita finito ( $\alpha_R = 2\alpha_0$ ) cambia cualitativamente el caracter de la evolución del paquete de ondas, produciendo durante su evolución temporal que el paquete gaussiano inicial se separe en dos partes axialmente simétricas. En b.2) se observa un comportamiento de círculos concéntricos bien definido  $\rho(x, y, t)$ .

el capítulo 5 acerca de los casos límites para el valor de  $\eta$  (con  $\eta = \frac{m^*2(\frac{\alpha_R}{\hbar})^2\sigma_0^2}{\hbar^2}$ ). En este caso se satisface  $\eta \gg 1$  que implica que para valores de  $\alpha_R$  relativamente grandes, el paquete inicial se divide en dos partes las cuales se propagan con velocidades de grupo diferente conforme su evolucionan en el tiempo.<sup>1</sup>

### 7.1.1 Dependencia de la intensidad de acoplamiento Rashba

Para entender el efecto que introduce la intensidad del acoplamiento espín-órbita de Rashba en el comportamiento del paquete de ondas gaussiano, en esta subsección se analizará el caso para diferentes valores del acoplamiento espín-órbita de Rashba, partiendo de una interacción débil ( $\alpha_R = \alpha_0$ ) a una interacción relativamente fuerte ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ). En la figura 7.2 se muestra una gráfica de la densidad de probabilidad electrónica para diferentes valores de  $\alpha_R$  y diferentes tiempos.

Note que para una interacción espín-órbita débil con un parámetro de Rashba  $\alpha_R = \alpha_0$ , se necesita más tiempo en la evolución temporal para que  $\rho(x, y, t)$  presente oscilaciones más definidas, mientras que el caso contrario, cuando el parámetro de Rashba es grande ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas. Esto se debe a que la frecuencia de las oscilaciones (*i.e.*  $2k_0\frac{\alpha_R}{\hbar}$ ) de la ecuación (5.30) depende directamente del valor del parámetro de Rashba.

Asimismo, como era de esperarse, se presenta claramente un fuerte comportamiento oscilatorio en la densidad de espín, como se muestra en la figura 7.3, donde se graficó

---

<sup>1</sup>Esto se estableció para el caso 1D, pero igual aplica par el caso 2D.

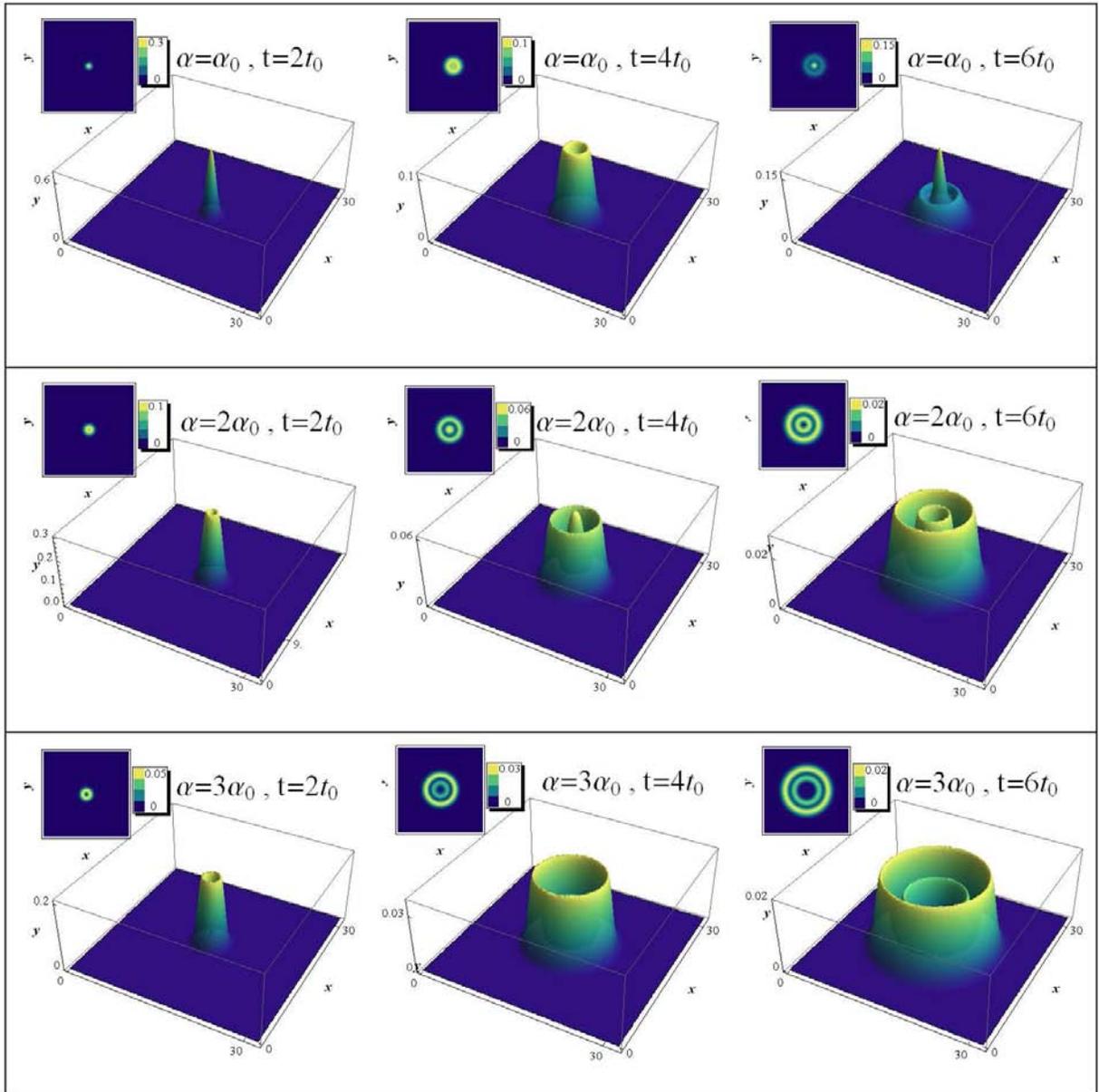


Figura 7.2: Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$  para diferentes valores de acoplamiento espín-órbita de Rashba y diferentes tiempos. Se observa que con una interacción débil  $\alpha_R = \alpha_0$ , se necesita más tiempo en la evolución temporal para que esta presente oscilaciones más definidas. El caso contrario, cuando el parámetro de Rashba es muy fuerte ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas. En la esquina superior de cada gráfica se muestra el mapa de intensidades de la densidad de probabilidad correspondiente a cada gráfica, mostrando una simetría anular concéntrica en cada caso.

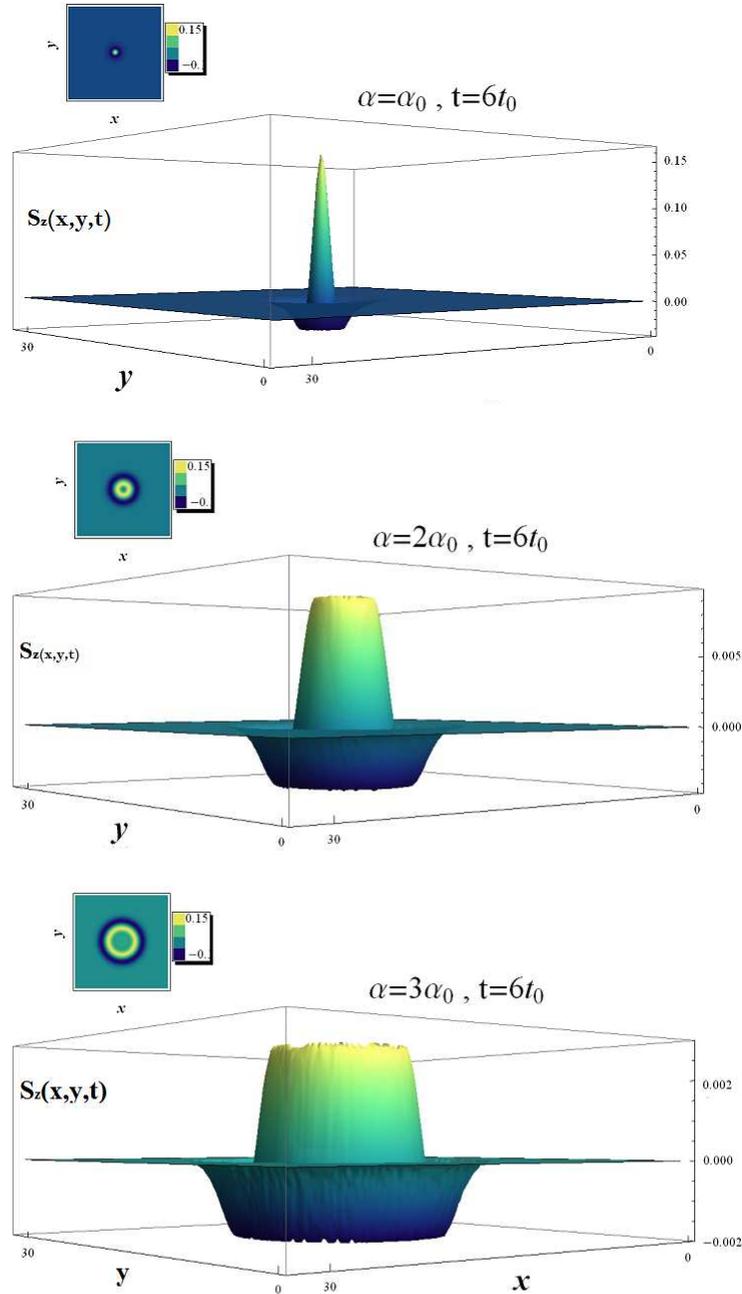


Figura 7.3: Densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y, t) = |\psi_\uparrow|^2 - |\psi_\downarrow|^2$  para diferentes valores de acoplamiento espín-órbita de Rashba y mismo tiempo de simulación. En la figura con  $\alpha_R = \alpha_0$  se observan oscilaciones para las diferentes contribuciones positivas y negativas de  $S_z(x, y, t)$ . Para el caso cuando se incrementa el parámetro de Rashba a un valor relativamente fuerte ( $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas. Se muestra también, en la esquina superior de cada gráfica el mapa de intensidades correspondiente a cada gráfica, mostrando simetría circular concéntrica en cada caso para diferentes valores de la densidad de probabilidad de espín. Todas las distribuciones fueron calculadas a un tiempo  $t = 6t_0$ .

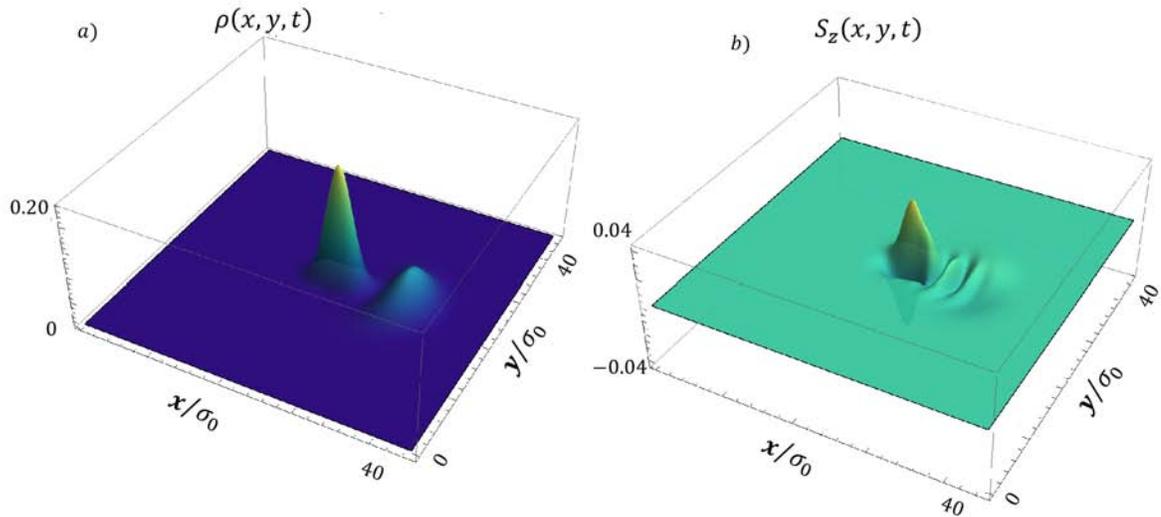


Figura 7.4: a) Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$ , y b) densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y) = |\psi_{\uparrow}|^2 - |\psi_{\downarrow}|^2$  para un tiempo final de  $t_{max} = 7t_0$  en los que se consideró un paquete gaussiano inicial espín polarizado en dirección  $+z$  con momento inicial  $p_{0y} = 0$  y  $p_{0x} = \hbar k_0$  con  $k_0 = 2.55 \times 10^7 m^{-1}$ . El valor del acoplamiento espín-órbita es  $\alpha_R = 2\alpha_0$ . La dispersión inicial del paquete gaussiano fue  $\sigma_0 = 1400\text{\AA}$ .

la densidad de probabilidad de espín  $S_z(\mathbf{r}) = \frac{\hbar}{2}(|\Psi_1(\mathbf{r}, t)|^2 - |\Psi_2(\mathbf{r}, t)|^2)$  de la ecuación (5.23) para diferentes valores de  $\alpha_R$  para un mismo tiempo  $t = 6t_0$ . Además de haber contribuciones negativas y positivas de la densidad de espín, esta exhibe un comportamiento oscilatorio que decrecen conforme el tiempo aumenta.

## 7.2 Dinámica con Rashba ( $k_{0x} \neq 0$ y $k_{0y} = 0$ )

Ahora se considera el caso en el que el paquete de onda inicial espín polarizado (a lo largo del eje  $+z$ ) se encuentra en movimiento. Escogemos la dirección de propagación a lo largo del eje  $x$ , por lo que la componente de momento inicial a lo largo del eje  $y$  sea cero ( $p_{0y} = \hbar k_{0y} = 0$ ), mientras que  $p_{0x} = \hbar k_0 \neq 0$ . Para nuestras simulaciones

elegimos  $k_0 = 2.55 \times 10^{-7} m^{-1}$ , el resto de los parámetros son idénticos a los usados en la Fig.7.1

La figura 7.4(a) muestra la densidad de probabilidad a un tiempo  $t_{max} = 7t_0$  para  $\alpha_R = 2\alpha_0$ . Note que ya no se presenta la simetría cilíndrica tipo interferencia del caso totalmente estático de la figura 7.1(b1), y se observa que el paquete inicial gaussiano se separa en dos partes, mostrando dos máximos en la densidad de probabilidad de diferente amplitud desplazándose en dirección del eje  $x$ , presumiblemente, con velocidades diferentes. Claramente la elección de propagación en una dirección preferencial rompe la simetría entre los estados de espín con momento  $\pm k_x$ , lo que produce diferentes velocidades de propagación en dirección opuesta minimizando así de forma significativa el traslape de los paquetes de onda con espines opuestos, y por tanto, suprimiendo el efecto interferencia. En la figura 7.4(b) se muestra la distribución de polarización de espín  $S_z(x, y, t)$  que evidencia que los paquetes de onda observados en la figura 7.4(a) tienen polarización opuesta, como era de esperarse.

### 7.3 Dinámica con Rashba ( $k_{0x} = k_{0y} \neq 0$ )

Ahora consideraremos un paquete de onda con componentes de momento inicial idénticas ( $k_{0x} = k_{0y} = 2.55 \times 10^7 m^{-1}$ ), mientras el resto de los parámetros son iguales a los empleados en la figura 7.4. La distribución de ambas, la densidad de probabilidad total y de la polarización de espín, presentan un comportamiento muy similar al obtenido anteriormente para el caso con  $k_{0x} \neq 0$  y  $k_{0y} = 0$ , ver figura 7.5,

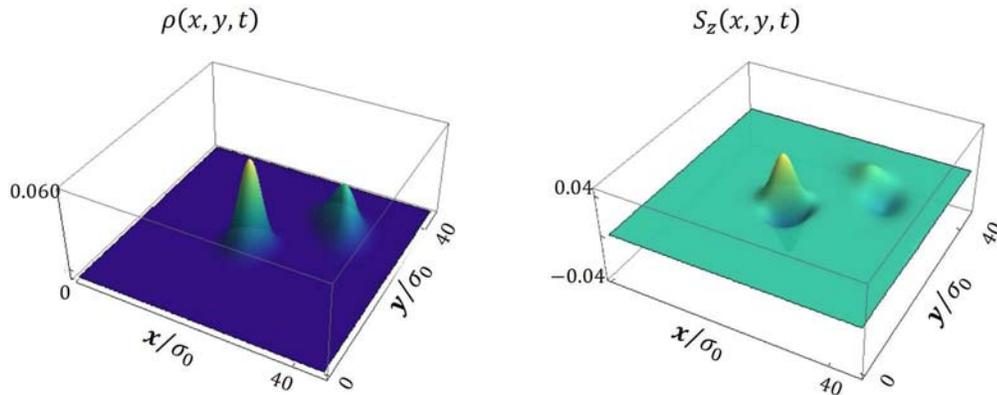


Figura 7.5: a) Densidad de probabilidad electrónica  $\rho(x, y) = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2$ , y b) densidad de probabilidad electrónica de espín  $S_z(x, y, t) = |\psi_{\uparrow}|^2 - |\psi_{\downarrow}|^2$  a un tiempo final de  $t_{max} = 7t_0$  para un estado inicial del paquete Gaussiano tal que las componentes del vector de onda  $p_{ox} = \hbar k_0$  y  $p_{oy} = \hbar k_0$  con  $k_0 = 2.55 \times 10^7 m^{-1}$ . La dispersión inicial del paquete gaussiano fué  $\sigma_0 = 1400 \text{ \AA}$  y  $\alpha_R = 2\alpha_0$ . Se muestra que la  $\rho(x, y, t)$  tiene dos máximos (que viajan en dirección opuesta según nuestros estudios de la evolución temporal de los paquetes), similarmente ocurre para  $S_z(x, y, t)$ .

pero rotado  $\pi/4$  en el plano respecto este, como era de esperarse. Las ligeras diferencias entre ellos, mayormente notorias en  $S_z(x, y, t)$  probablemente sean debidas a que existe un factor de  $\sqrt{2}$  entre el momento inicial de ambos casos, *i.e.*  $|\mathbf{k}_o| = k_{ox}$  en la simulación de la figura 7.4, mientras que para la simulación para la figura 7.5 tenemos  $|\mathbf{k}_o| = \sqrt{k_{ox}^2 + k_{oy}^2} = \sqrt{2}k_{ox}$ .

Es importante apuntar que para el caso con únicamente interacción tipo Dresselhaus (en ausencia de Rashba) este cálculo arrojará, por simetría, exactamente los mismos resultados hasta aquí discutidos para Rashba finito, con la única diferencia que los paquetes de onda se propagan en dirección opuesta (con signo opuesto). Por tal motivo no se muestran esos resultados en esta tesis.

## 7.4 Acoplamiento de Rashba y Dresselhaus

### 7.4.1 Interacción de Rashba y Dresselhaus (caso estacionario)

Ahora procederemos a estudiar la situación cuando las interacciones espín-órbita de Rashba y Dresselhaus están ambas presentes. Suponemos primero que el paquete de onda inicial es estacionario ( $k_{0x} = k_{0y} = 0$ ), hemos usado exactamente los mismos parámetros de simulación que en las figuras anteriores con  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$ . El caso  $\alpha_R = \alpha_D$  se analizará más adelante. En la figura 7.6, en la parte superior, se graficó la densidad de probabilidad electrónica figura 7.6.(a), y su mapa de intensidad 7.6.(b). En la parte inferior se despliega los resultados para la polarización de espín. La densidad de probabilidad total exhibe un comportamiento totalmente diferente al caso con puro Rashba. El perfil de la densidad de probabilidad conserva ciertas simetrías pero en vez de desarrollar un patrón de interferencia circularmente simétrico como el caso con puro Rashba, en este caso, se forma una distribución elíptica angularmente asimétrica. Esto se ve aun más evidente en el mapa de intensidad de  $\rho(x, y, t)$  (ver figura 7.6.(b)) donde se notan claramente dos elipses concéntricas, presentando en cada uno de los focos de la elipse interior los picos máximos de la  $\rho(x, y, t)$ .

### 7.4.2 Dinámica con Rashba y Dresselhaus ( $k_{0y} = 0$ )

En la figura 7.7 se muestra la densidad de probabilidad electrónica para el caso con  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$  con  $k_{0x} = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$  y  $k_{0y} = 0$ . La amplitud de los dos máximos que se propagan en dirección contraria ahora notoriamente difieren (ver fig.

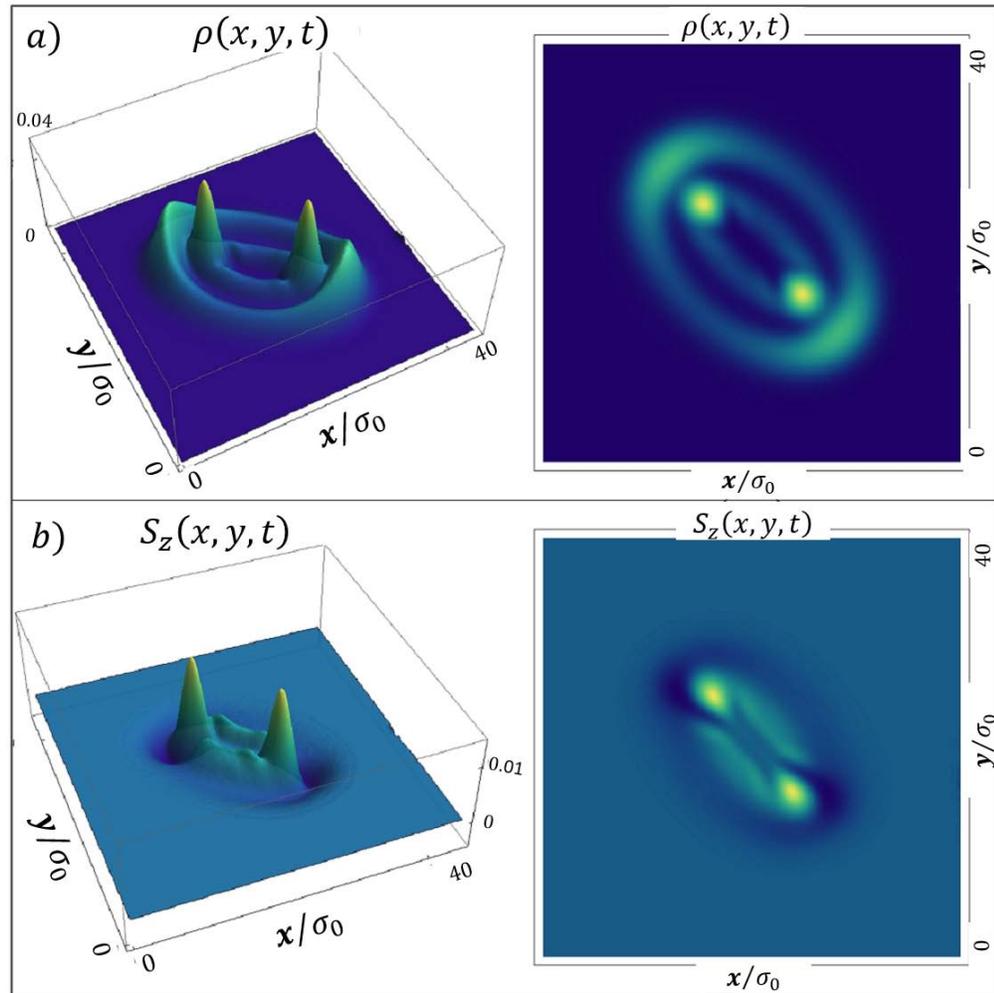


Figura 7.6: Evolución temporal para el caso estacionario para un tiempo de  $t_{max} = 7t_0$ , en a) se grafica la densidad de probabilidad electrónica, mostrando que el paquete inicial se separa en dos partes formando dos paquetes totalmente simétricos, pero con diferente dirección de la velocidad formando dos elipses concéntricas y b) la densidad de probabilidad de espín, del lado derecho de la gráfica se muestra el mapa de intensidades para cada caso. Simulaciones con  $\sigma_0 = 1400\text{\AA}$ ,  $k_0 = 0$ , e intensidades de acoplamiento de Rashba y Dresselhaus de  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$ , respectivamente.

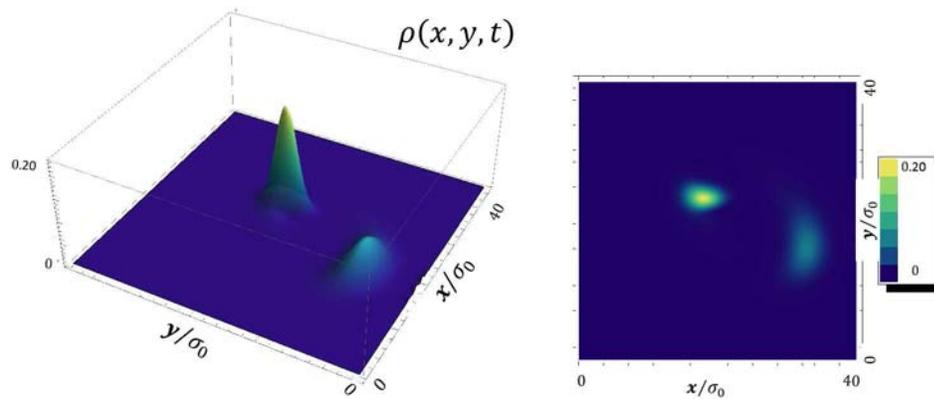


Figura 7.7: Densidad de probabilidad electrónica y de espín para un estado inicial del paquete gaussiano con  $k_{0x} = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\sigma_0 = 1400 \text{Å}$ ,  $\alpha_R = 2\alpha_0$  y el parámetro de Dresselhaus es de  $\alpha_D = 0.5\alpha_0$ . Simulación al tiempo  $t = 6.8t_0$ .

7.7). Físicamente esto se debe a que las contribuciones de las dos interacciones de acoplamiento espín-órbita contribuyen asimétricamente a la  $\rho(x, y, t)$ . Esto se ve más claro de la ecuación para las energías características del sistema dada por

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \sqrt{(\alpha_R k_x - \alpha_D k_y)^2 + (\alpha_R k_y - \alpha_D k_x)^2} \quad (7.1)$$

claramente se observa, que si la contribución para el caso  $\alpha_R$  es mayor que el término  $\alpha_D$ , la contribución relativa es por tanto asimétrica en momento, lo cual es heredado en la descripción del espacio real de la densidad de probabilidad.

### 7.4.3 Caso con acoplamiento $\alpha_R = \alpha_D$

Considere ahora el caso donde los valores de la interacción de acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus son iguales con un paquete de onda inicial estacionario

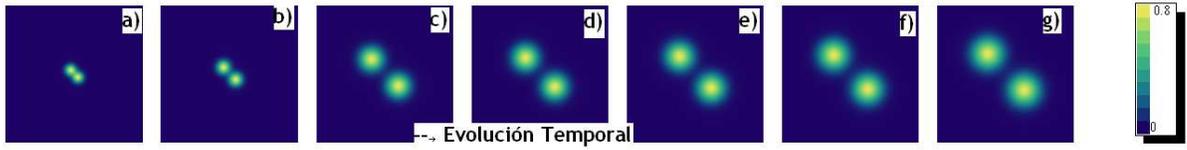


Figura 7.8: Mapas de intensidades para la densidad de probabilidad electrónica para un estado inicial del paquete gaussiano con  $\mathbf{k}_0 = 0$ ,  $\alpha_R = \alpha_D = 0.5\alpha_0$  para diferentes tiempos. [(a)  $t = t_0$ , (b)  $t = 2t_0$ , (c)  $t = 3t_0$ , (d)  $t = 4t_0$ , (e)  $t = 5t_0$ , (f)  $t = 6t_0$ , (g)  $t = 7t_0$ ]

( $\mathbf{k}_0 = 0$ ). Es evidente, que la densidad de probabilidad electrónica es independiente del valor de  $k_0$ , inclusive en presencia de la dependencia en espín. Es decir este resultado coincide exactamente con el resultado teórico conocido para los valores de la energía característica del sistema, considerando  $\alpha_R = \alpha_D$  de (7.5), se obtiene  $E_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha_R \sqrt{2} |k_x + k_y|$ , resultado análogo al obtenido en la figura 7.5. Se consideraron diferentes tiempos con la idea de mostrar la evolución temporal de la densidad de probabilidad y cómo es que los paquetes de onda desdoblados se separan a medida que transcurre el tiempo (figura 7.8).

## 7.5 El *Zitterbewegung*

Finalmente, en esta sección se describirán los resultados obtenidos para el efecto del *Zitterbewegung* en sistemas donde el acoplamiento espín-órbita de Rashba es el acoplamiento de espín dominante. En los capítulos anteriores se puntualizó que el término que da origen al *Zitterbewegung* es proporcional a  $e^{\frac{-2iHt}{\hbar}}$ , dado que es precisamente este término el que conduce a un acoplamiento entre los estados con energías  $+E_p$  y  $-E_p$ ; mas sin embargo, su promedio sobre un estado con energía definida ( $+E_p$  o  $-E_p$ )

es cero. Por lo que es necesario calcular el valor esperado del operador de posición en función del tiempo. En los siguientes cálculos se consideró que el paquete de onda inicial se propaga en dirección  $x$  con  $k_{ox} = 4k_o$ , siendo  $k_o = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ . Primero estudiaremos el comportamiento del valor esperado de la posición como función del tiempo en dirección perpendicular a la propagación, (*i.e.* a lo largo del eje  $y$ ,  $\langle y(t) \rangle$ ) para diferentes dispersiones del paquete gaussiano inicial. Posteriormente se analizará la dependencia de  $\langle y(t) \rangle$  con la intensidad de acoplamiento espín-órbita de Rashba  $\alpha_R$ .

Nuestros cálculos numéricos de  $\langle y(t) \rangle$  muestran el comportamiento característico del *Zitterbewegung* de oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo (figura (7.9)). Se grafican dos casos, para  $\sigma_o = 2100\text{\AA}$  y  $\sigma_o = 1700\text{\AA}$ . Notamos que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la dispersión más grande. El valor esperado de la velocidad  $\langle v_y(t) \rangle$  (no mostrado aquí) produce un resultado similar, consistente con la ecuación (5.26),

$$\langle v_y(t) \rangle = -\frac{\alpha_R}{\hbar} \text{Sen} \left[ \frac{2}{\hbar} \alpha_R k_o t \right] e^{-\left[ \frac{\alpha_R}{\hbar \sigma_o} t \right]^2} \quad (7.2)$$

que nos indica que las oscilaciones decaen más rápido para dispersiones  $\sigma_o$  pequeñas (que es precisamente lo que se observa en la Figura 7.9). Claramente de (7.2), las oscilaciones tienen frecuencia  $\omega = \frac{2}{\hbar} k_o \alpha_R$ , por lo que el período de las oscilaciones ( $\tau = \frac{2\pi}{\omega}$ ) disminuye al aumentar  $\alpha_R$  para una  $k_o$  fija. Note que estas fórmulas fueron derivadas de un análisis unidimensional, esto es, para el caso que se tiene

Rashba 1D. Nuestros cálculos numéricos son en 2D, pero sin embargo podemos utilizar tales fórmulas para estimar los períodos esperados. Esto lo hacemos notando que en 2D,  $k_o = \sqrt{k_{ox}^2 + k_{oy}^2}$ , y notando que el problema con Rashba en 2D es axialmente simétrico, por lo que podemos escoger  $k_{oy} = k_{ox}$  y por tanto  $k_o = \sqrt{2}k_{ox}$ , lo que conduce a un factor de  $\sqrt{2}$  entre el  $k_o$  de 2D y 1D. Luego entonces la frecuencia de las oscilaciones en nuestras simulaciones deberían obedecer  $\omega \rightarrow \tilde{\omega} = \frac{2}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{2}} k_{0x} \alpha_R$ . De nuestros cálculos numéricos de  $\langle y(t) \rangle$  (figura 7.9b) se puede extraer que el período de las oscilaciones es  $\tau \sim 0.36ps$ , mientras que el esperado es  $\tilde{\tau} = \frac{2\pi}{\tilde{\omega}} = 0.37ps$ . Esta casi perfecta concordancia del período de las oscilaciones de nuestros cálculos numéricos con los estimados analíticamente nos muestra una interesante independencia de la frecuencia de las oscilaciones para dispersiones  $\sigma_0 \leq 1700\text{\AA}$ , además de corroborar la exactitud de nuestros cálculos numéricos. Note que para el caso con dispersión  $\sigma_0 = 2100\text{\AA}$  se extrae un período ligeramente mayor ( $\sim 0.46ps$ ) que corresponde a un cambio relativo de los períodos de  $0.46/0.37 = 1.243$  que incidentalmente corresponde al cambio relativo en las dispersiones  $2100/1700 = 1.235$ .

También se realizó el análisis de la dependencia de  $\langle y(t) \rangle$  con la intensidad de acoplamiento espín-órbita de Rashba  $\alpha_R$ . En la figura (7.10) se muestra el comportamiento característico del efecto del *Zitterbewegung* con oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo. Además se observa que la amplitud y el período de las oscilaciones dependen de la intensidad de acoplamiento espín-órbita. Se observa que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la intensidad de acoplamiento espín-órbita más pequeño ( $\alpha_R = \alpha_0$ ). Se estimó el valor del periodo de las oscilaciones que coincide

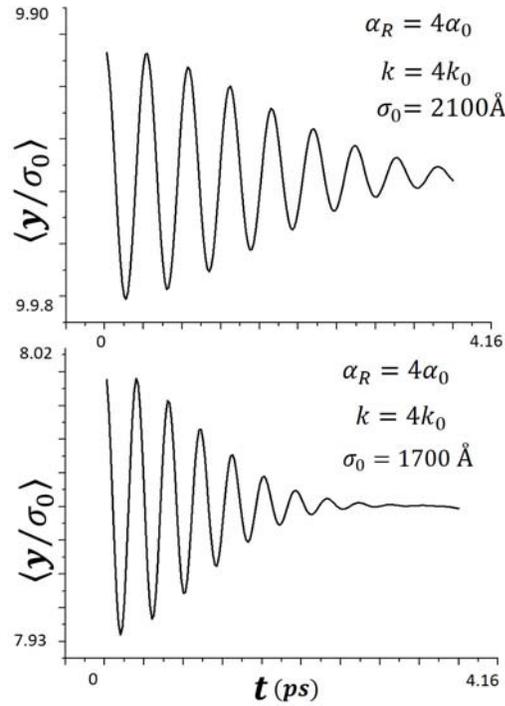


Figura 7.9: El valor esperado de  $\langle y \rangle$  respecto el tiempo  $t$ , para diferentes valores de  $\sigma_0$ , con  $k_{0x} = 4k_0$ , siendo  $k_0 = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\alpha_R = 4\alpha_0$ , y tiempo total de simulación de  $t = 4.158 ps$ . De la gráfica se extrae el periodo de oscilación para el caso con  $\sigma_0 = 2100 \text{ \AA}$  es de  $\tau \sim 0.36 ps$ , mientras que para el caso cuando  $\sigma_0 = 1700 \text{ \AA}$  es de  $\tau \sim 0.46 ps$ . Ambas graficas muestran el comportamiento característico del efecto del *Zitterbewegung* de oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo. Sin embargo se observa que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la dispersión mayor.

exactamente con los valores predichos por la fórmula para  $\tilde{\tau}$  descrita anteriormente.

Por último se muestra el resultado para la densidad de probabilidad de espín  $S_z(x, y, t)$  (figura (7.11)) para diferentes tiempos. Se observa que el paquete inicial se desdobra en dos correspondientes a las dos contribuciones de la densidad de probabilidad de espín que se separan simétricamente con velocidades opuestas.

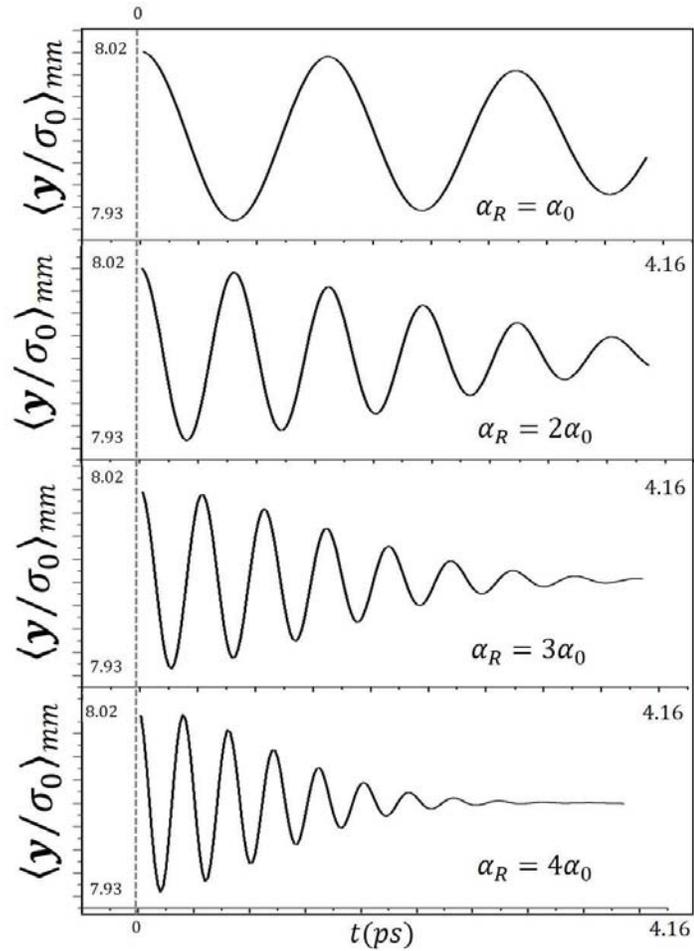


Figura 7.10: *Zitterbewegung*: El valor esperado de  $\langle y \rangle$  respecto al tiempo  $t$ , para diferentes valores de la intensidad de acoplamiento espín-órbita de Rashba  $\alpha_R$ . Con el valor de la dispersión inicial de  $\sigma_0 = 1700 \text{ \AA}$ ,  $k_{0x} = 4k_0$ , siendo  $k_0 = 2.5 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$ . De la gráficas se extrae que el periodo de oscilación para el caso con  $\alpha_R = \alpha_0$  es de  $\tau \sim 1.45 \text{ ps}$ , para el caso cuando  $\alpha_R = 2\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.725 \text{ ps}$ , para el caso cuando  $\alpha_R = 3\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.476 \text{ ps}$  y para el caso de  $\alpha_R = 4\alpha_0$  es de  $\tau \sim 0.36 \text{ ps}$ . En las gráficas se muestran el comportamiento característico del efecto del *Zitterbewegung* de oscilaciones rápidas que decaen con el tiempo. Asimismo la amplitud y el periodo de las oscilaciones dependen de la intensidad de acoplamiento espín-órbita. Se observa que las oscilaciones decaen más lentamente para el valor de la intensidad de acoplamiento espín-órbita más pequeño ( $\alpha_R = \alpha_0$ ).

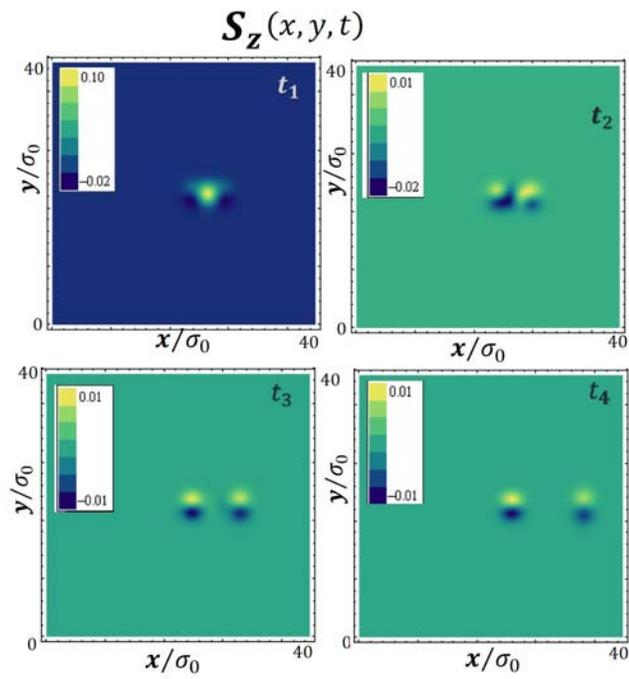


Figura 7.11: Densidad de probabilidad de espín  $S_z(x, y, t)$ , con  $\sigma_0 = 1700\text{\AA}$ ,  $k = 4k_0$  para diferentes tiempos, con  $k_0 = 2.5 \times 10^7 m^{-1}$ ,  $\alpha_R = 4\alpha_0$  y  $t_1 = 20t_0$ ,  $t_2 = 30t_0$ ,  $t_3 = 80t_0$ ,  $t_4 = 100t_0$

## 8. Conclusiones

Se realizó un estudio teórico y numérico del fenómeno del *Zitterbewegung* en gases de electrones bidimensionales formados en heteroestructuras semiconductoras de brecha energética estrecha (grupos *III – V*), en donde las interacciones espín-órbita de Rashba y Dresselhaus son importantes. También se estudió la dinámica de los paquetes de onda con acoplamiento espín-órbita. Se calcularon numéricamente los valores esperados de posición en el tiempo, densidad de probabilidad y polarización de espín, entre otras cantidades físicas que nos permitieron realizar un estudio sistemático del *Zitterbewegung* en tales sistemas.

Se mostró, mediante el análisis mecánico cuántico de la evolución temporal de paquetes de onda electrónicos, que el valor esperado del vector de posición experimenta un comportamiento oscilatorio característico del *Zitterbewegung*. Asimismo, se encontró que si el espín del electrón está inicialmente polarizado (dirección  $z$ , para un espín-órbita en el plano), entonces el movimiento oscilatorio del *Zitterbewegung* es siempre perpendicular a la velocidad de grupo del paquete de ondas.

Se encontró que se exhibe una fuerte dependencia del valor de  $\alpha_R$  en las oscilaciones inducidas por el *Zitterbewegung*. Es decir, cuando la interacción de acoplamiento espín-órbita es débil (*i.e.*  $\alpha_R = \alpha_0$ ), se necesita más tiempo en la evolución temporal para que el paquete electrónico presente oscilaciones bien definidas. Por otro lado, cuando el parámetro de Rashba es relativamente fuerte (*i.e.*  $\alpha_R = 3\alpha_0$ ), las oscilaciones

en la estructura de la densidad de probabilidad son más pronunciadas.

También se mostró que el acoplamiento espín-órbita cambia cualitativamente el carácter de la evolución del paquete de ondas, y que durante su evolución temporal, el paquete gaussiano inicial se convierte en dos partes axialmente simétrico. La parte exterior se propaga con una velocidad de grupo mayor que  $\alpha_R/\hbar$  y la parte interior se mueve con velocidad de grupo menor que  $\alpha_R/\hbar$ . Este desdoblamiento aparece debido a la presencia de dos bandas en el espectro del electrón correspondientes a los estados estacionarios con diferente helicidad.

Se realizó el estudio también las contribuciones de los acoplamientos simultáneos de Rashba y de Dresselhaus, donde  $\alpha_R > \alpha_D$ . Se mostró que el paquete de ondas gaussiano se separa en dos partes simétricas con diferente dirección de la velocidad como en el caso de puro Rashba, pero con la misma amplitud de densidad de probabilidad. No se observa la simetría circular como es el caso con la contribución sólo de  $\alpha_R$ , si no que en este caso se muestra claramente dos elipses concéntricas rotadas y en los extremos del eje mayor de dicha simetría elíptica se observan dos máximos, la intensidad de probabilidad electrónica es mayor en los máximos en la elipse interior. Hemos mostrado que el *Zitterbewegung* de paquetes de ondas en nanoestructuras con acoplamiento espín-órbita puede ser observado experimentalmente en estructuras de baja dimensionalidad. En particular este efecto debería determinar la dinámica del electrón y las características de alta frecuencia del transistor de efecto de campo por Datta y Das [49] y otros dispositivos espintrónicos. De acuerdo a las recientes publicaciones de investigaciones teóricas el fenómeno del *Zitterbewegung*, este debería

en principio aparecer en sólidos, en particular en semiconductores de brecha energética estrecha.

Cómo trabajos a futuro para este modelo y método numérico que desarrollamos en esta tesis sería por ejemplo el incluir dependencia temporal en el parámetro de interacción de Rashba. Otra implementación sería por ejemplo generalizar el método para otro tipo de material, como es el de monocapa y bicapa de Grafeno, debido a las propiedades interesantes de este material. Se pueden incorporar sin mucha dificultad efectos debidos a campos magnéticos y eléctricos externos.

# Bibliografía

- [1] E. Schrödinger, Sitzungsber. Preuss Akad. Wiss. Phys. Math. Kl 24 418 (1930)
- [2] L. Ferrari and G. Russo, Phys. Rev. B 42, 7454 (1990)
- [3] T. M. Rusin and W. Zawadzki, J. Phys.: Condens. Matter 19 136219 (2007)
- [4] W. Zawadzki, Phys. Rev. B 72, 085217 (2005).
- [5] W. Zawadzki, Phys. Rev. B 74, 205439 (2006)
- [6] M. Katsnelson, Eur. Phys. J. B 51, 157 (2006) M. Blanter, and A. F. Morpurgo, Phys. Rev. B 75, 035305 (2007)
- [7] A. Shmueli, Yacoby, and Y. Imry, Europhys. Lett. 29, 711 (1995)
- [8] D. Luri and S. Cremer, Physica Amsterdam 50, 224 (1970)
- [9] J. Schliemann, D. Loss, and R. M. Westervelt, Phys. Rev. Lett. 94, 206801 (2005); Phys. Rev. B 73, 085323 (2006).
- [10] R. Gerritsma, G. Kirchmair, F. Zahring, E. Solano, R. Blatt, C. F. Ross, Nature 463, 68 (2010)

- [11] L.J. LeBlanc, M.C. Beeler , K Jiménez A.R. Perry, S. Sugawa, R.A. Williams, I.B. Spielman, *New Journal of Physics* 15, 073011 (2013)
- [12] E.Rashba, *Sov. Phys. solid State* 2 ,1109 (1960).
- [13] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* , 100, 580 (1954).
- [14] M.I. Dyakonov and V. I. Perel, *Phys. Lett. A* 35 ,459 (1971).
- [15] J. Hirsch, *Phys. Rev. Lett.* 83 , 1834 (1999).
- [16] J. Schliemann, D. Loss, and R.M. Westervelt, *Phys. Rev. Lett.* 94, 206801 (2004).
- [17] V. Ya Demikhovskii, G. N. Maksimova, and E. V. Frolova, *Phys. Rev. B* 78 , 115401 (2008).
- [18] W. Zawadzki, *Phys. Rev. B.* 085217 (2005).
- [19] T. M. Rusin and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* 76, 195439 (2007).
- [20] G. M. Maksimova, V. Ya. Demikhovskii, and E. V. Frolova, *Phys. Rev. B* 78, 235321 (2008)
- [21] M. Hongki , J. E. Hill, N. A. Sinitsyn, B. R. Sahu, Leonard Kleinman, and A. H. MacDonald, *Phys. Rev. B* 74, 165310 (2006)
- [22] D. Lurie and S.Cremer , *Physica* 50 224 , 205307 (1970).
- [23] F. Cannata, L. Ferri and G. Russo 1990 *Sol. St. Comun.* 74 309
- [24] L. Ferri and G. Russo, 1990 *Phys. Rev. B* 42 7454

- [25] S. V. Vonsovskii, M.S. Svirskii and L.M. Svirskaya, 1990, Teor. Matem. Fizika 85 211 (in Russian)
- [26] J. Schliemann, Loss D., and R.M Westervelt. Phys. Rev. Lett. 206801 (2005).
- [27] J. Schliemann, Loss D., and R.M Westervelt. Phys. Rev. B. 085323 (2006).
- [28] S.-Q. Shen, Phys. Rev. Lett. 187203 (2005).
- [29] V. Sih, W. Lau, R. Myers, V.R. Horowitz, A.C. Gossard, and D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. 096605 (2006).
- [30] P. Brusheim and H. Q. Xu. Phys. Rev. B. 205307 (2006).
- [31] R. Winkler, U. Zülicke, J. Bolte, Phys. Rev. B. 75 205314 (2007).
- [32] J.J. Sakurai, Addison-Wesley Publishing Company. Cap. 3, (1999).
- [33] J. D. Jackson ,Classical Electrodynamics, 3ra Edition , (1983)
- [34] S.Gasiorowicz, Quantum Physics, 3ra Edition Cap.7, (2003)
- [35] S. Bandyopadhyay, M. Cahay,Introduction to Spintronics, CRC Press , (2008)
- [36] Y.A. Bychkov and E.I. Rashba, J. Phys. C , 6039 (1984).
- [37] de Andrada ,E. A., LaRocca G.C. Bassani F. Phys. Rev. B 50:8523 (1994)
- [38] F. Mireles y G. Kirczenow. Phys. Rev. B , 24426 (2001).

- [39] R. Winkler, *SpinOrbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer-Verlag. Primera edición Vol. 191. Berlin, 228pp. (2003).
- [40] A. Goldberg, H. M. Schey. Am. J. Phys., 177 (1967). I. Galbrait, Y. Sing, E. Abraham. Am. J. Phys., 52(1) (1984).
- [41] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, y F. Petroff, Phys Rev. Lett. 61, 2472 (1998)
- [42] T. M. Rusin, W. Zawadzki , cond-mat/ 1402.5393v1 (2014)
- [43] J. Sinova ,D. Culcer, Q. Niu, N. Sinitsyn, T. Jungwirth, A. MacDonald, Phys. Rev. Lett. 92 , 126603 (2004)
- [44] R. Shankar, Principles of Quantum Mechanics, (1994)
- [45] V. Ya Demikhovskii, G. N. Maksimova, and E. V. Frolova, Phys. Rev. B 78 , 235321 (2008).
- [46] A. Goldberg, H. M. Schey. Am. J. Phys., 177 (1967).
- [47] I. Galbrait, Y. Sing, E. Abraham. Am. J. Phys., 52(1) (1984).
- [48] F. Mireles, Efectos Inelásticos en el tunelaje electrónico: Simulación numérica, apéndice B. Tesis de Maestría. 1995
- [49] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. 56, 665 (1990).
- [50] K. Hutter and K. Jhnk, Continuum Methods of Physical Modeling, SpringerVerlag Berlin Heidelberg New York, (2004)

## Apéndice A. Ecuación de Dirac: propiedades

La dinámica de partículas cuánticas-relativistas en ausencia de potenciales está gobernada por la ecuación de *Dirac*:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi = (c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + m_0c^2\boldsymbol{\beta})\psi \quad (\text{A.1})$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío y  $m_0$  es la masa en reposo de la partícula en cuestión. Los objetos  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\boldsymbol{\beta}$  son matrices de  $4 \times 4$  escritas en términos de las matrices de Pauli y de la matriz identidad  $\mathbf{1}$ .

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} ; \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \quad \text{con } \boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) \text{ y}$$

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

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

con

$$\varphi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad y \quad \chi = \begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

donde

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) e^{\frac{i\varepsilon t}{\hbar}} \quad (\text{A.4})$$

siendo  $\varepsilon$  la energía total para los estados estacionarios. Sustituyendo (A.4) en términos de (A.3) en (A.1) se llega a:

$$\varepsilon \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = c \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} + m_0 c^2 \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & -\mathbf{1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

que conduce al siguiente par de ecuaciones acopladas,

$$\begin{aligned} \varepsilon \varphi &= c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi + m_0 c^2 \varphi \\ \varepsilon \chi &= c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi - m_0 c^2 \chi, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

sin pérdida de generalidad, los estados con  $\mathbf{p}$  definido como momento, se pueden escribir

$$\begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varphi_0 \\ \chi_0 \end{pmatrix} e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (\text{A.7})$$

por tanto (A.6) se reescribe de la siguiente forma

$$(\varepsilon - m_0 c^2) \mathbf{1} \varphi_0 - c \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \chi_0 = 0$$

$$-c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\varphi_0 + (\varepsilon + m_0c^2)\mathbf{1}\chi_0 = 0 \quad (\text{A.8})$$

Sistema lineal de ecuaciones (A.8) homogéneas para  $\varphi_0$  y  $\chi_0$  tiene soluciones no-triviales, por lo que el determinante de los coeficientes es

$$\begin{vmatrix} (\varepsilon - m_0c^2)\mathbf{1} & -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \\ -c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} & (\varepsilon - m_0c^2)\mathbf{1} \end{vmatrix} = 0, \quad (\text{A.9})$$

es decir

$$\begin{aligned} (\varepsilon^2 - m_0^2c^4)\mathbf{1} - c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) &= 0, \\ \varepsilon^2 &= m_0^2c^4 + c^2p^2, \end{aligned}$$

más compactamente,

$$\varepsilon = \pm E_p, \quad E_p = +c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2}, \quad (\text{A.10})$$

los 2 signos del factor de evolución temporal  $\varepsilon$  corresponden a las soluciones positivas y negativas de la ecuación de Dirac. Por otro lado de la ecuación (A.8), se tiene que

$$\chi_0 = \frac{c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})}{m_0c^2 + \varepsilon}\varphi_0 \quad (\text{A.11})$$

Ahora bien, denotando el espinor  $\varphi_0$  de la forma

$$\varphi_0 = U = \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.12})$$

con normalización

$$U^\dagger U = U_1^* U_1 + U_2^* U_2 = 1 \quad (\text{A.13})$$

donde  $U_1$ ,  $U_2$  son números complejos en general, usando la ec. (A.7) y (A.2) obtenemos el conjunto completo de soluciones positivas y negativas de la ecuación de Dirac:

$$\Psi_{p\lambda}(x, t) = N \left( \begin{array}{c} U \\ \frac{c(\sigma \cdot p)}{m_0 c^2 + \lambda E_p} U \end{array} \right) \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - \lambda E_p t)}}{(\sqrt{2\pi\hbar})^3} \quad (\text{A.14})$$

con  $\lambda = \pm 1$  caracteriza las soluciones positivas y negativas con el factor de evolución temporal  $\varepsilon = \lambda E_p$ . El factor de normalización  $N$  se determina de la condición

$$\int \Psi_{p\lambda}^\dagger(x, t) \Psi_{p'\lambda'}(x, t) d^3x = \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (\text{A.15})$$

por consiguiente,

$$N^2 \left( U^\dagger U + U^\dagger \frac{c^2(\sigma \cdot p)(\sigma \cdot p)}{(m_0 c^2 + \lambda E_p)^2} U \right) = 1 \quad (\text{A.16})$$

o usando ec. (A.10):

$$N^2 \left( 1 + \frac{(c^2 p^2)}{(m_0 c^2 + \lambda E_p)^2} \right) = 1$$

$$N = \sqrt{\frac{(m_0 c^2 + \lambda E_p)}{2\lambda E_p}} \quad (\text{A.17})$$

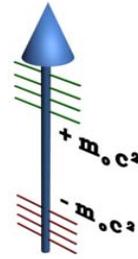


Figura A.1: Se muestra esquemáticamente el espectro de los eigenvalores de la energía para la ecuación de Dirac para la partícula libre. El espectro de energía negativa con  $E < m_0c^2$  son ocupados por positrones.

El espectro de  $\varepsilon_{p\lambda}$ , que corresponde al espinor  $\Psi_{p\lambda}(x, t)$ , se muestra en la ilustración de la figura A.1, donde aparece un dominio de frecuencias negativas y positivas (eigenvalores de la energía), que exhibe una brecha energética de  $2m_0c^2$  que separa el continuo de la energía positiva ( $\varepsilon_{p,1} = +E_p$ ), del continuo de energía negativa ( $\varepsilon_{p,-1} = -E_p$ ). Cabe señalar que para la interpretación de los estados con  $\varepsilon = -E_p$ , Dirac propuso introducir la noción del *positrón* (*i.e.* partícula elemental, que posee la misma cantidad de masa y carga eléctrica que el electrón; sin embargo, ésta es positiva). Los valores negativos de la energía no se refiere entonces a energías negativas del electrón (*i.e.* dado que éste siempre tiene energías positivas) sino a partículas que se encuentran por debajo del nivel 0 de energías. De la ecuación (A.15), vemos que:

$$\mathbf{p}\Psi_{p\lambda} = p\Psi_{p\lambda}(x, t) . \quad (\text{A.18})$$

Para cada momento  $p$  existen 2 tipos de soluciones diferentes, una para  $\lambda = +1$  ( $\varepsilon = +E_p$ ) y la otra para  $\lambda = -1$  ( $\varepsilon = -E_p$ ). Debido a esto, existen dos valores de la velocidad con dirección opuesta (ver sección 4.1). A su vez esta dirección de la

velocidad depende de otro número cuántico, la *Helicidad*, y básicamente es usada para clasificar los estados de una partícula libre. Notamos que el operador

$$\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{p} \quad (\text{A.19})$$

conmuta con el operador del Hamiltoniano de Dirac  $H$ , de aquí

$$\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix} \quad (\text{A.20})$$

es la generalización de 4-dimensiones del operador del vector de espín. Calculamos,

$$[H, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}] = [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta m_0 c^2, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}] = c[\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}] = \mathbf{0}, \quad (\text{A.21})$$

por lo tanto  $[H, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}] = 0$  y naturalmente  $[\mathbf{p}, \boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}] = 0$  como  $\boldsymbol{\Sigma} \cdot \mathbf{p}$ ,  $H$  y  $\mathbf{p}$  conmutan simultáneamente, entonces comparten las mismas eigenfunciones y por lo tanto pueden diagonalizarse conjuntamente. Lo mismo ocurre para el operador de helicidad

$$\boldsymbol{\Lambda}_s = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Sigma} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \mathbf{S} \cdot \frac{\mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} \quad (\text{A.22})$$

La Helicidad tiene una interpretación evidente: es la proyección del espín en la dirección del momento, como se ilustra en la figura A.2, es decir, hay un mismo valor del momento, pero con Helicidad en dirección opuesta.

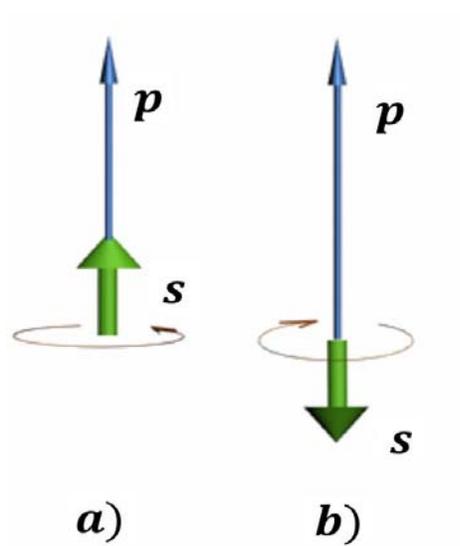


Figura A.2: Se muestra los electrones con helicidad positiva a) y negativa b). En ambos incisos se muestran las posibles rotaciones del electrón.

## Apéndice B. Condiciones iniciales y a la frontera

Para la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se representó el estado inicial de los electrones por un paquete Gaussiano espín polarizado:

$$|\psi(x, y, 0)\rangle = \psi(x, y, 0)|\xi_\sigma\rangle \quad (\text{B.1})$$

con  $|\xi_\sigma\rangle$  polarización del espín,  $|\xi_\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle$  y  $|\xi_\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle$ ; por ejemplo para polarización inicial  $|\uparrow\rangle$  tendríamos,

$$\psi(x, y, t_0) = \frac{1}{(\pi\sigma_0^2)^{(1/2)}} e^{i(k_x x + k_y y)} e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma_0^2} - \frac{(y-y_0)^2}{2\sigma_0^2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.2})$$

donde  $(x_0, y_0)$  es la localización inicial del centroide del paquete gaussiano en  $t = 0$ , siendo  $\sigma_0$  la dispersión inicial del paquete con momento  $(k_x, k_y)$ . Las condiciones a la frontera para la función de onda  $\psi(x, y, t)$  se fijarán de la siguiente manera: supondremos que la partícula ésta confinada dentro de una caja bidimensional de longitud  $L$  de tal manera que las funciones de onda para cada espín asociadas a estas

partículas se anulen en las paredes de dicha caja, a todo tiempo  $t$ , *i.e.*,

$$\psi(x, L; t) = \psi(L, y; t) = \psi(x, 0; t) = \psi(0, y; t) = 0; \quad (\text{B.3})$$

lo anterior es para todas las  $t$ 's. Tal condición restringe por supuesto la elección de los valores de la dispersión inicial ( $\sigma_0$ ), y de la posición del centroide del paquete gaussiano ( $x_0, y_0$ ) para que las funciones de onda sean despreciables cerca y en las fronteras de la caja durante el tiempo de simulación. Generalizando el formalismo de Goldberg [46] para el caso bidimensional:

$$\begin{aligned} k_{0x} = k_{0y} &= \left( \frac{J\lambda}{8N\epsilon} \right); \left( \lambda = \frac{2\epsilon^2}{\delta t} \right) \\ \left( \frac{\sigma_N}{\sigma_0} \right)^2 &= 1 + \left( \frac{4N\epsilon^2}{\lambda\sigma_0^2} \right) \geq 1 \\ \frac{(k_{mx}\epsilon)^2}{12} &= \frac{(k_{my}\epsilon)^2}{12} \ll 1 \\ k_{mx} = k_{my} &\ll \frac{\pi}{\epsilon} \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

donde  $J$  es el valor máximo en el intervalo espacial y  $\epsilon = \delta x$  es el valor de cada intervalo. Para el caso temporal,  $N$  es el valor máximo para cada intervalo  $\delta t$ , similarmente  $\sigma_N$  es el valor de la dispersión en el intervalo  $N$ . Además para el caso del valor máximo del momento se utilizó  $k_{mx}$  y  $k_{my}$ . La precisión de la simulación numérica depende de la elección arbitraria de estos valores en el rango de validez de tales condiciones.

# Apéndice C. Modelo e implementación numérica

En este apéndice se detallará el método de integración, que se utilizó para el estudio del efecto *Zitterbewegung*, en el transporte electrónico bidimensional en materiales semiconductores de tipo *GaAs*, en presencia de la interacción del acoplamiento espín-órbita de Rashba y/o Dresselhaus. (capítulo 6)

## C.1 Implementación numérica: caso Rashba

En la sección (6.2) se definió el valor de las las  $w_\mu$ 's como :  $w_0 = H_0$ ,  $w_1 = V(x, y; t)$ ,  $w_2 = H_R^x$ ,  $w_3 = H_R^y$ ,  $w_4 = H_R^{xy}$ ,  $w_5 = H_D^x$ ,  $w_6 = H_D^y$ ,  $w_7 = H_D^{xy}$  y  $w_8 = H_{RD}$ . Se resolvió la ecuación (6.9) para las  $|\phi_\mu\rangle$ 's.

Para el caso en el que el sistema sólo presenta la interacción espín-órbita de tipo Rashba ( $\alpha_D = 0$ , ausencia de la interacción de Dresselhaus), se escribe de la siguiente forma (aquí en adelante supondremos  $V(x, y)$  uniforme, note que  $[H_0, V(x, y)] = 0$ )

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iV t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^y t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^{xy} t}{\hbar}} |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (C.1)$$

Procedemos ahora a discretizar las ecuaciones (C.1) para resolver el sistema de ecuaciones de diferencias finitas; para esto se introduce primero el ket de la función auxiliar

de  $\phi$  tenemos que  $|\phi(x, y, t)\rangle$ , tal que;

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iV t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^y t}{\hbar}} |\phi(x, y, t)\rangle \quad (C.2)$$

con

$$|\phi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_R^{xy} t}{\hbar}} |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (C.3)$$

usando Cayley la ecuación (C.3) se reescribe de la siguiente forma

$$|\phi(x, y, t)\rangle = \left[ \frac{\mathbf{1} - \frac{iH_R^{xy} t}{2\hbar}}{\mathbf{1} + \frac{iH_R^{xy} t}{2\hbar}} \right] |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (C.4)$$

por lo que podemos escribir

$$\left[ \mathbf{1} + \frac{iH_R^{xy} t}{2\hbar} \right] |\phi(x, y, t)\rangle = \left[ \mathbf{1} - \frac{iH_R^{xy} t}{2\hbar} \right] |\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle \equiv |\chi(x, y, t)\rangle \quad (C.5)$$

discretizamos (C.5) tal que las cordenadas espaciales  $x \rightarrow j\delta x$ ,  $y \rightarrow m\delta y$ , mientras el tiempo  $t \rightarrow n\delta t$  con  $j, m$  y  $n$  enteros, (C.5) en diferencias finitas ( y reemplazando  $|\psi\rangle \rightarrow \psi$ ,  $|\phi\rangle \rightarrow \phi$  y  $|\chi\rangle \rightarrow \chi$  sin pérdida de generalidad)

$$\begin{aligned} (\mathbf{1} + i\gamma_R \sigma_z) \phi_{j,m}^n + i\gamma_R \sigma_z (\phi_{j-1,m-1}^n - \phi_{j-1,m}^n - \phi_{j,m-1}^n) = \\ \psi_{j,m}^n - i\gamma_R \sigma_z (\psi_{j+1,m+1}^n - \psi_{j+1,m}^n - \psi_{j,m+1}^n + \psi_{j,m}^n) = \chi_{j,m}^n \end{aligned} \quad (C.6)$$

con  $\gamma_R = \frac{\alpha_R^2}{2\hbar^2} \left( \frac{N\delta t}{\delta x} \right)^2$ . Las componentes de los espinores  $\phi_{j,m}^n$  estan dados por  $\phi_{\uparrow j,m}^n$  y

$\phi_{\downarrow j,m}^n$ , por tanto

$$\begin{aligned}\phi_{\uparrow j,m}^n &= \frac{1}{(1+i\gamma_R)}\chi_{\uparrow j,m}^n - \frac{i\gamma_R}{(1+i\gamma_R)}(\phi_{\uparrow j-1,m-1}^n - \phi_{\uparrow j-1,m}^n - \phi_{\uparrow j,m-1}^n) \\ \phi_{\downarrow j,m}^n &= \frac{1}{(1-i\gamma_R)}\chi_{\downarrow j,m}^n + \frac{i\gamma_R}{(1-i\gamma_R)}(\phi_{\downarrow j-1,m-1}^n - \phi_{\downarrow j-1,m}^n - \phi_{\downarrow j,m-1}^n)\end{aligned}\quad (C.7)$$

el sistema de ecuaciones (C.7) representa un sistema de ecuaciones de recursión para las  $\phi$ 's, y se resuelve con las condiciones de frontera adecuadas para el valor de las  $\phi$ 's, que se analizaron mediante las condiciones de frontera de las  $\psi$ 's; esto es:  $\phi_{0,0}^n$ ,  $\phi_{0,1}^n = \phi_{1,0}^n = \phi_{1,1}^n = 0$  y  $\phi_{j,0}^n = \phi_{0,m}^n$  para todo  $(j, m)$ . Es decir sabemos que las condiciones de frontera para las  $\psi$ 's conducen las condiciones de frontera para las  $\phi$ 's, de tal forma que  $\psi_{j,0}^0 = \phi_{j,0}^0 = 0$ , similarmente para  $\psi_{0,j}^0 = \phi_{0,j}^0 = 0$ . Una vez conocida la  $\phi_{j,m}^{n=1}$  para todo  $j$  y  $m$  aplicamos la ecuación (C.2) e introducimos otra función auxiliar  $\rho(x, y, t)$  tal que;

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iVt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^y t}{\hbar}} |\rho(x, y, t)\rangle \quad (C.8)$$

con

$$|\rho(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_R^y t}{\hbar}} |\phi(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (C.9)$$

Si siguiendo con el análisis anterior, se utiliza para el operador de evolución temporal la aproximación de *Cayley* la ecuación (C.9) se reescribe de la siguiente forma

$$\left[ \mathbf{1} + \frac{iH_{Rj,m}^y \delta t}{2\hbar} \right] \rho_{j,m}^n = \left[ \mathbf{1} - \frac{iH_{Rj,m}^y \delta t}{2\hbar} \right] \phi_{j,m}^n \equiv \mathbf{Y}_{j,m}^n \quad (C.10)$$

discretizamos (C.10) y en diferencias finitas

$$\rho_{j,m}^n + \eta_R \sigma_x (\rho_{j,m}^n - \rho_{j,m-1}^n) = \phi_{j,m}^n - \eta_R \sigma_x (\phi_{j,m+1} - \phi_{j,m}) = \mathbf{Y}_{j,m}^n \quad (\text{C.11})$$

con  $\eta_R = \frac{\alpha_R}{2\hbar} \frac{N\delta t}{\delta x}$ . Note que (C.11) es una ecuación de recursión para  $\rho_{j,m}^n$  y  $\phi_{j,m}^n$ , la cual se conoce partiendo de las condiciones iniciales de la  $\phi$  a un tiempo  $t_0$  por ende se conoce para todo espacio  $(j, m)$  y para  $n$ , por lo que conocemos el valor de  $\phi_{j,m}^{n=0}$  en donde las componentes de los espinores está dado por  $\rho_{\uparrow j,m}^n$  y  $\rho_{\downarrow j,m}^n$

$$\begin{aligned} \rho_{\uparrow j,m}^n + \eta_R (\rho_{\downarrow j,m}^n - \rho_{\downarrow j,m-1}^n) &= \mathbf{Y}_{\uparrow j,m}^n \\ \rho_{\downarrow j,m}^n + \eta_R (\rho_{\uparrow j,m}^n - \rho_{\uparrow j,m-1}^n) &= \mathbf{Y}_{\downarrow j,m}^n \end{aligned} \quad (\text{C.12})$$

el sistema de ecuaciones (C.12) representa un sistema de ecuaciones de recursión para las  $\rho$ 's acopladas en espín. Para la solución de (C.12) se desacoplaron las ecuaciones obteniendo un sistema de ecuaciones lineales desacopladas, que se resolvieron numéricamente. Para lo anterior usamos una transformación unitaria,  $\mathbf{U}$  que conecte a un nuevo espinor  $|\theta_{j,m}^n\rangle$  con  $|\rho_{j,m}^n\rangle$ , esto es

$$\begin{bmatrix} \theta_{+j,m}^n \\ \theta_{-j,m}^n \end{bmatrix} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} \rho_{\uparrow j,m}^n \\ \rho_{\downarrow j,m}^n \end{bmatrix} \quad (\text{C.13})$$

con

$$\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{C.14})$$

tal que

$$\theta_{\pm j, m}^n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_{\uparrow j, m}^n \pm \rho_{\downarrow j, m}^n) \quad (\text{C.15})$$

con (C.15) y haciendo álgebra básica se reescribir el sistema de ecuaciones (C.12) de tal forma que

$$\theta_{\pm j, m}^n = \frac{1}{\sqrt{2}(1 \pm \eta_R)} (\mathbf{Y}_{\uparrow j, m}^n \pm \mathbf{Y}_{\downarrow j, m}^n) \pm \frac{\eta_R}{1 \pm \eta_R} \theta_{\pm j, m-1}^n \quad (\text{C.16})$$

para poder resolver la ecuación (C.16) necesitamos conocer el valor de  $\theta_{\pm j, m-1}^n$ , la cual se obtiene de la ecuación (C.15)

$$\theta_{\pm j, m-1}^n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\rho_{\uparrow j, m-1}^n \pm \rho_{\downarrow j, m-1}^n) \quad (\text{C.17})$$

donde (C.17) se resuelve fácilmente usando las condiciones de frontera para las  $\rho_{\uparrow j, m-1}^n$  y  $\rho_{\downarrow j, m-1}^n$ . Reescribiendo el sistema de ecuaciones (C.17)

$$\begin{aligned} \rho_{\uparrow j, m}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\theta_{+j, m}^n + \theta_{-j, m}^n) \\ \rho_{\downarrow j, m}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\theta_{+j, m}^n - \theta_{-j, m}^n) \end{aligned} \quad (\text{C.18})$$

con el sistema de ecuaciones (C.18) obtenemos el valor de las  $\rho$ 's para cada intervalo  $(j, m)$  a un tiempo inicial  $n_0 = 0$ . De tal forma que hasta aquí conocemos el valor de

las  $\rho$ 's y la ecuación (C.8) se reescribe

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iV(x,y)t}{\hbar}} \underbrace{e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} |\rho(x_0, y_0, t_0)\rangle}_{|\mathbf{M}(x,y,t)\rangle} \quad (\text{C.19})$$

análogamente se define una función auxiliar  $\mathbf{M}$ , tal que  $|\mathbf{M}(x, y, t)\rangle$

$$|\mathbf{M}(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} |\rho(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.20})$$

Similarmente, utilizamos para el operador de evolución temporal la aproximación de *Cayley* y en diferencias finitas

$$\left[ \mathbf{1} + \frac{iH_{Rj,m}^x \delta t}{2\hbar} \right] \mathbf{M}_{j,m}^n = \left[ \mathbf{1} - \frac{iH_{Rj,m}^x \delta t}{2\hbar} \right] \rho_{j,m}^n \equiv \mathbf{X}_{j,m}^n \quad (\text{C.21})$$

reescribiendo (C.21)

$$\mathbf{M}_{j,m}^n - \eta_R \sigma_y (\mathbf{M}_{j,m}^n - \mathbf{M}_{j-1,m}^n) = \rho_{j,m}^n + \eta_R \sigma_y (\rho_{j+1,m} - \rho_{j,m}) = \mathbf{X}_{j,m}^n \quad (\text{C.22})$$

Note que (C.22) es una ecuación de recursión para  $\mathbf{M}_{j,m}^n$  y  $\rho_{j,m}^n$ , la cual se conoce partiendo de las condiciones iniciales de la función de onda para un tiempo inicial  $t_0$ , por ende se conoce para todo el espacio  $(j, m)$  y para  $n$ , por lo que conocemos el valor de  $\rho_{j,m}^{n=0}$  y el valor de las  $\mathbf{X}_{j,m}^n$ . Tal que las componentes de los espinores esta dado por  $\mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n$  y  $\mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n$

$$\begin{aligned}
\mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n + i\eta_R(\mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n - \mathbf{M}_{\downarrow j-1,m}^n) &= \mathbf{X}_{\uparrow j,m}^n \\
\mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n - i\eta_R(\mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n - \mathbf{M}_{\uparrow j-1,m}^n) &= \mathbf{X}_{\downarrow j,m}^n
\end{aligned} \tag{C.23}$$

análogamente el sistema de ecuaciones (C.23) representa un sistema de ecuaciones de recursión para las  $\mathbf{M}$ 's y están acopladas en espín, para resolver (C.23), primero se desacoplan el sistema de ecuaciones obteniendo ecuaciones lineales desacopladas, que se resolverán numéricamente. Para lo anterior usamos una transformación unitaria,  $\mathbf{U}'$  que conecte a un nuevo espínor  $|\kappa_{j,m}^n\rangle$  con  $|\mathbf{M}_{j,m}^n\rangle$ , esto es

$$\begin{bmatrix} \kappa_{+j,m}^n \\ \kappa_{-j,m}^n \end{bmatrix} = \mathbf{U}' \begin{bmatrix} \mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n \\ \mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n \end{bmatrix} \tag{C.24}$$

con

$$\mathbf{U}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & i \\ 1 & -i \end{pmatrix} \tag{C.25}$$

es decir

$$\kappa_{\pm j,m}^n = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n \pm i\mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n) \tag{C.26}$$

con la ecuación (C.26) y haciendo álgebra básica podemos reescribir (C.23) de la

siguiente forma

$$\kappa_{\pm j,m}^n = \frac{1}{\sqrt{2}(1 \pm \eta_R)} (\mathbf{X}_{\uparrow j,m}^n \pm \mathbf{X}_{\downarrow j,m}^n) \pm \frac{\eta_R}{1 \pm \eta_R} \kappa_{\pm j-1,m}^n \quad (\text{C.27})$$

para poder resolver la ecuación (C.27) necesitamos conocer el valor de  $\kappa_{\pm,j-1,m}$ , es decir, reescribiendo la ecuación (C.26)

$$\kappa_{\pm,j-1,m}^n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\mathbf{M}_{\uparrow,j-1,m}^n \pm i \mathbf{M}_{\downarrow,j-1,m}^n) \quad (\text{C.28})$$

la ecuación (C.28) se resuelve fácilmente usando las condiciones de frontera para conocer las  $\mathbf{M}_{\uparrow,j-1,m}^n$  y  $\mathbf{M}_{\downarrow,j-1,m}^n$ . Ahora bien, reescribiendo el sistema de ecuaciones (C.28)

$$\begin{aligned} \mathbf{M}_{\uparrow j,m}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\kappa_{+j,m}^n + \kappa_{-j,m}^n) \\ \mathbf{M}_{\downarrow j,m}^n &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\kappa_{+j,m}^n - \kappa_{-j,m}^n) \end{aligned} \quad (\text{C.29})$$

con el sistema de ecuaciones (C.29), obtenemos el valor de las  $\mathbf{M}$ 's para cada intervalo  $(j, m)$  a un tiempo inicial  $n_0 = 0$ . Reescribiendo la ecuación (C.19)

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iVt}{\hbar}} |\mathbf{M}(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.30})$$

llegamos a una expresión que ya no depende del acoplamiento espín-órbita de Rashba no hay términos acoplados en espín y como  $[H_0, V] = 0$ . Se puede reescribir  $H_0 =$

$H_0^x + H_0^y$ ; tal que la ecuación (6.2),  $H_0^x = -\frac{\hbar^2}{2m^*}(\frac{\partial^2}{\partial x^2})$  y  $H_0^y = -\frac{\hbar^2}{2m^*}(\frac{\partial^2}{\partial y^2})$ . Por lo que (C.30) se reescribe como

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iVt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_x t}{\hbar}} \underbrace{e^{-\frac{iH_y t}{\hbar}} |\mathbf{M}(x_0, y_0, t_0)\rangle}_{|\mathbf{N}(x, y, t)\rangle} \quad (\text{C.31})$$

análogamente se define la función auxiliar  $|\mathbf{N}(x, y, t)\rangle$ , de tal forma que nos permita escribir la ecuación (C.31) de la siguiente forma

$$|\mathbf{N}(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_y t}{\hbar}} |\mathbf{M}(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.32})$$

siguiendo con el formalismo, utilizamos la aproximación de *Cayley* y en diferencias finitas

$$\left[ \mathbf{1} + \frac{iH_{j,m}^y \delta t}{2\hbar} \right] \mathbf{N}_{j,m}^n = \left[ \mathbf{1} - \frac{iH_{j,m}^y \delta t}{2\hbar} \right] \mathbf{M}_{j,m}^n \equiv \mathbf{P}_{j,m}^n \quad (\text{C.33})$$

reescribiendo (C.33)

$$\mathbf{N}_{j,m}^n - i\lambda(\mathbf{N}_{j,m+1}^n + \mathbf{N}_{j,m-1}^n - 2\mathbf{N}_{j,m}^n) = \mathbf{M}_{j,m}^n + i\lambda(\mathbf{M}_{j,m+1}^n + \mathbf{M}_{j,m-1}^n - 2\mathbf{M}_{j,m}^n) = \mathbf{P}_{j,m}^n \quad (\text{C.34})$$

con  $\lambda_R = \frac{\hbar}{4m^*} \frac{N\delta t}{\delta x^2}$ . Cabe señalar que la ecuación (C.34) ya no depende de la interacción de acoplamiento espín-órbita, solo se evalúa el valor de las  $\mathbf{M}$ 's para cada intervalo  $(j, m)$  y a su vez nos permite conocer el valor de las  $\mathbf{P}$ 's para cada  $(j, m)$  a un tiempo

inicial  $t_0 = 0$ , y reescribiendo la ecuación (C.31)

$$-i\lambda\mathbf{N}_{j,m+1}^n + (1 + 2i\lambda)\mathbf{N}_{j,m}^n + -i\lambda\mathbf{N}_{j,m-1}^n = \mathbf{P}_{j,m}^n \quad (\text{C.35})$$

Claramente el sistema de ecuaciones (C.35) es un sistema de la forma tridiagonal para las  $\mathbf{N}$ 's que se resuelve fácilmente, conociendo los valores de  $\mathbf{P}$ 's para cada intervalo  $(j, m)$  a un tiempo inicial  $t_0 = 0$ . Ahora bien, de aquí conocemos todas  $\mathbf{N}$ 's, por lo que reescribiendo la ecuación (C.34)

$$|\psi(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iV(x,y)t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\mathbf{N}(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.36})$$

reescribiendo (C.36)

$$\underbrace{e^{\frac{iV(x,y)t}{2\hbar}} |\psi(x, y, t)\rangle}_{|\psi^*(x,y,t)\rangle} = e^{-\frac{iH_0^x t}{\hbar}} \underbrace{e^{-\frac{iV(x,y)t}{2\hbar}} |\mathbf{N}(x_0, y_0, t_0)\rangle}_{|\mathbf{N}^*(x,y,t_0)\rangle} \quad (\text{C.37})$$

siguiendo con el formalismo, se define del lado izquierdo de la ecuación (C.37)  $|\psi^*(x, y, t)\rangle$  y del lado derecho  $|\mathbf{N}^*(x, y, t)\rangle$ . Entonces reescribiendo las ecuaciones explícitamente;

$$\begin{aligned} |\psi^*(x, y, t)\rangle &= e^{\frac{iV(x,y)t}{2\hbar}} |\psi(x, y, t)\rangle \\ |\mathbf{N}^*(x, y, t_0)\rangle &= e^{-\frac{iV(x,y)t}{2\hbar}} |\mathbf{N}(x_0, y_0, t_0)\rangle \end{aligned} \quad (\text{C.38})$$

el conjunto de ecuaciones (C.38), interesantemente muestra la relación que nos permitirá, conocer el valor de las  $\mathbf{N}^*$ 's que dependen del valor de las  $\mathbf{N}$ 's, que hasta aquí ya

conocemos su valor, para todo espacio. Ahora bien, también muestra la dependencia de las  $\psi^*$ 's y  $\psi$ 's, que permite reescribir (C.38) de la siguiente forma;

$$|\psi^*(x, y, t)\rangle = e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} |\mathbf{N}^*(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.39})$$

ciertamente de la ecuación (C.39) se obtienen los valores para las  $\psi^*$ 's, los cuales nos permitirá, de la ecuación (C.37), conocer las  $\psi$ 's. Similarmente, para la solución de este sistema de ecuaciones utilizamos para el operador de evolución temporal la aproximación de *Cayley* de nuevo

$$|\psi^*(x, y, t)\rangle = \left[ \frac{\mathbf{1} - \frac{iH_0^x t}{2\hbar}}{\mathbf{1} + \frac{iH_0^x}{2\hbar}} \right] |\mathbf{N}^*(x_0, y_0, t_0)\rangle \quad (\text{C.40})$$

reescribiendo la ecuación (C.40)

$$\left[ \mathbf{1} + \frac{iH_0^x t}{2\hbar} \right] |\psi^*(x, y, t)\rangle = \left[ \mathbf{1} - \frac{iH_0^x t}{2\hbar} \right] |\mathbf{N}^*(x_0, y_0, t_0)\rangle \equiv |\mathbf{Q}(x, y, t)\rangle \quad (\text{C.41})$$

en el esquema de diferencias finitas (C.41)

$$\begin{aligned} \frac{-i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \psi_{j+1,m}^{*n+1} + \left( 1 + \frac{i\hbar N\delta t}{2m^* \delta x^2} \right) \psi_{j,m}^{*n+1} - \frac{i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \psi_{j-1,m}^{*n+1} = \\ \frac{i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \mathbf{N}_{j+1,m}^{*n} + \left( 1 - \frac{i\hbar N\delta t}{2m^* \delta x^2} \right) \mathbf{N}_{j,m}^{*n} + \frac{i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \mathbf{N}_{j-1,m}^{*n} = \\ \mathbf{Q}_{j,m}^n \end{aligned} \quad (\text{C.42})$$

evaluando todas las  $\mathbf{N}$ 's para cada  $(j, m)$ , se obtiene el valor de las  $\mathbf{Q}$ 's y reescribiendo

la ecuación (C.38)

$$\frac{-i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \psi_{j+1,m}^{*n+1} + \left( 1 + \frac{i\hbar N\delta t}{2m^* \delta x^2} \right) \psi_{j,m}^{*n+1} - \frac{i\hbar}{4m^*} \left( \frac{N\delta t}{\delta x^2} \right) \psi_{j-1,m}^{*n+1} = \mathbf{Q}_{j,m}^n \quad (\text{C.43})$$

la ecuación anterior es un sistema tridiagonal para las  $\psi_{j,m}^{*n}$  que puede resolverse fácilmente conociendo  $\mathbf{Q}_{jm}^n$  [48]. Regresando a la ecuación (C.41) se tiene que

$$\psi_{j,m}^{n+1} = e^{-\frac{iVN\delta t}{2\hbar}} \psi_{j,m}^{*n+1} \quad (\text{C.44})$$

Finalmente hemos resuelto el sistema con interacción de Rashba, en donde la ecuación (6.27), nos da el valor de la función de onda para todo el espacio  $(j, m)$  a un tiempo  $(n + 1)$ , que depende del valor de la función auxiliar  $\psi^*$  que ya se conoce. La implementación de este formalismo para el caso considerando solo la interacción de Dresselhaus . Recapitulando podemos escribir

$$|\psi(x, y, t)\rangle = \underbrace{e^{-\frac{iH_0 t}{\hbar}} e^{-\frac{iVt}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^x t}{\hbar}} e^{-\frac{iH_R^y t}{\hbar}}}_{|\mathbf{M}(x,y,t)\rangle} \underbrace{e^{-\frac{-iH_R^{xy} t}{\hbar}}}_{|\rho(x,y,t)\rangle} \underbrace{|\psi(x_0, y_0, t_0)\rangle}_{|\phi(x,y,t)\rangle}$$

$$|\psi(x, y, t)\rangle = \prod_{\mu=0}^8 e^{-iw_{\mu} t} |\psi(x_0, y_0; t_0)\rangle \quad (\text{C.45})$$

y resolver sucesivamente en cada iteración de tiempo para las  $\psi$ ,  $\phi$ ,  $\rho$ ,  $\mathbf{M}$ , etc. Dadas las condiciones iniciales y de frontera del problema.

## Apéndice D. Álgebra de conmutadores

En este apéndice se incluye el álgebra para los conmutadores de los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus de interés para este trabajo, en particular

$$\begin{aligned}
 [H_R, H_D] &= \left[ \frac{\alpha_R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \frac{\alpha_D}{\hbar} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right] \\
 &= \frac{\alpha_R \alpha_D}{\hbar^2} \{ [\sigma_x p_y, \sigma_y p_y] - [\sigma_x p_y, \sigma_x p_x] - [\sigma_y p_x, \sigma_y p_y] + [\sigma_y p_x, \sigma_x p_x] \}
 \end{aligned} \tag{D.1}$$

con

$$[\sigma_x p_y, \sigma_y p_y] = \sigma_x \sigma_y p_y^2 - p_y^2 \sigma_y \sigma_x = [\sigma_x, \sigma_y] p_y^2 = 2i \sigma_z p_y^2 \tag{D.2}$$

$$[\sigma_x p_y, \sigma_x p_x] = \sigma_x^2 [p_y, p_x] = 0 \tag{D.3}$$

$$[\sigma_y p_x, \sigma_y p_y] = \sigma_y^2 [p_x, p_y] = 0 \tag{D.4}$$

$$[\sigma_y p_x, \sigma_x p_x] = -[\sigma_x, \sigma_y] p_x^2 = -2i \sigma_z p_x^2 \tag{D.5}$$

usando las ecuaciones anteriores (D.1) se reescribe compactamente de la siguiente forma,

$$[H_R, H_D] = \left( \frac{2\alpha_R \alpha_D}{\hbar^2} \right) i \sigma_z (p_y^2 - p_x^2) \quad . \tag{D.6}$$

Partiendo de la interacción de Rashba de  $H_R = \frac{\alpha_R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) = H_R^x + H_R^y$ , tenemos lo siguiente

$$[H_R^x, H_R^y] = \frac{\alpha_R^2}{\hbar^2}[\sigma_x p_y, -\sigma_y p_x] = -\frac{\alpha_R^2}{\hbar^2}p_x p_y[\sigma_x, \sigma_y] = -\frac{\alpha_R^2}{\hbar^2}2i\sigma_z p_x p_y \quad (\text{D.7})$$

similarmente para el caso de Dresselhaus de  $H_D = \frac{\alpha_D}{\hbar}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) = H_D^x + H_D^y$ , llegamos a la siguiente expresión,

$$[H_D^x, H_D^y] = \frac{\alpha_D^2}{\hbar^2}[\sigma_y p_y, -\sigma_x p_x] = \frac{\alpha_D^2}{\hbar^2}p_x p_y[\sigma_x, \sigma_y] = \frac{\alpha_D^2}{\hbar^2}2i\sigma_z p_x p_y \quad (\text{D.8})$$

## Apéndice E. Esquema de diferencias finitas

Sea  $f(x)$  una función definida en  $(a, b)$  que tiene hasta la  $k$ -ésima derivada, entonces la expansión de  $f(x)$  usando series de Taylor alrededor del punto  $x_i$  contenido en el intervalo  $(a, b)$  será

$$f(x) = f(x_i) + \frac{(x - x_i)}{1!} \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{(x - x_i)^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_i} + \dots + \frac{(x - x_i)^k}{k!} \frac{d^k f}{dx^k} \Big|_{\epsilon} \quad (\text{E.1})$$

donde  $\epsilon = x_i + \theta(x - x_i)$  y  $0 < \theta < 1$ . Existen distintas formas de generar la aproximación a la primera derivada, nos interesa, una que nos de la mejor precisión posible con el menor esfuerzo computacional. Considerando el caso para diferencias progresivas, la ec.(E.1) con  $k = 2$  y  $x = x_i + \Delta x$ , tenemos

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_p} \quad (\text{E.2})$$

de esta ecuación obtenemos la siguiente expresión para aproximación de la primera derivada

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_p} \quad (\text{E.3})$$

en este caso la aproximación de  $f'(x)$  mediante diferencias progresivas es de primer orden, o sea  $O(\Delta x)$ . Siendo  $O_p(\Delta x)$  el error local de truncamiento, definido como

$$O_p(\Delta x) = -\frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_p} . \quad (\text{E.4})$$

Es común escribir la anterior expresión como

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i)}{\Delta x} - O_p(\Delta x) \quad (\text{E.5})$$

como

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_i}{\Delta x} \quad (\text{E.6})$$

para simplificar notación.

Ahora bien, considerando el caso para diferencias regresivas la ec. (E.1) con  $k = 2$  y  $x = x_i + \Delta x$ , tenemos

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_r} \quad (\text{E.7})$$

de esta ecuación obtenemos la siguiente expresión para aproximación de la primera derivada

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_r} \quad (\text{E.8})$$

en este caso la aproximación de  $f'(x)$  mediante diferencias regresivas es de primer

orden, o sea  $O(\Delta x)$ . Siendo  $O_r(\Delta x)$  el error local de truncamiento, definido como

$$O_r(\Delta x) = -\frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{\epsilon_r} . \quad (\text{E.9})$$

Es común escribir la anterior expresión como

$$\frac{df}{dx} \Big|_{x_i} = \frac{f(x_i) - f(x_i - \Delta x)}{\Delta x} - O_r(\Delta x) \quad (\text{E.10})$$

como

$$f'(x_i) = \frac{f_i - f_{i+1}}{\Delta x} \quad (\text{E.11})$$

para simplificar notación. Similarmente para el caso de diferencias centrada se considero la ec.(E.1) con  $k = 3$  y escribiendo  $f(x)$  en  $x = x_i + \Delta x$  y  $x = x_i - \Delta x$ , tenemos

$$f(x_i + \Delta x) = f(x_i) + \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{\epsilon_r} \quad (\text{E.12})$$

y

$$f(x_i - \Delta x) = f(x_i) - \Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{d^2 f}{dx^2} \Big|_{x_i} - \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{\epsilon_r} \quad (\text{E.13})$$

restando la ec.(E.12) de la Ec.(E.13), se tiene

$$f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x) = 2\Delta x \frac{df}{dx} \Big|_{x_i} + \frac{\Delta x^3}{3!} \left[ \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{\epsilon_p} + \frac{d^3 f}{dx^3} \Big|_{\epsilon_r} \right] \quad (\text{E.14})$$

esta última expresión lleva a la siguiente aproximación de la primera derivada mediante diferencias centradas

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} + O_c(\Delta x^2) \quad (\text{E.15})$$

con un error local de truncamiento de segundo orden  $O_c(\Delta x^2)$ , es decir

$$O_c(\Delta x^2) = \frac{\Delta x^2}{3!} \left[ \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\epsilon_p} + \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{\epsilon_r} \right] \quad (\text{E.16})$$

es común encontrar expresada la derivada

$$\left. \frac{df}{dx} \right|_{x_i} = \frac{f(x_i + \Delta x) - f(x_i - \Delta x)}{2\Delta x} \quad (\text{E.17})$$

como

$$f'(x_i) = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2\Delta x} \quad (\text{E.18})$$

De forma análoga se construyen aproximaciones en diferencias finitas de orden dos, aquí desarrollaremos la forma de calcular la derivada de orden dos en diferencias centradas. Partiendo del desarrollo de Taylor y eliminando las derivadas primeras, sumando las ecuaciones se encuentra que

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} - \frac{\Delta x^2}{12} f^{(4)}(\xi_c) \quad (\text{E.19})$$

así, la aproximación a la segunda derivada usando diferencias centradas con un error

de truncamiento  $O_c(\Delta x^2)$  es

$$f''(x_i) = \frac{f(x_i - \Delta x) - 2f(x_i) + f(x_i + \Delta x)}{\Delta x^2} \quad (\text{E.20})$$

es común escribir la anterior expresión como

$$f''(x_i) = \frac{f_{i-1} - 2f_i + f_{i+1}}{\Delta x^2} \quad (\text{E.21})$$

Ahora bien para el caso de las derivadas en dos dimensiones, de forma análoga se construyen aproximaciones en diferencias finitas de primer y segundo orden en dos dimensiones. Usando el teorema de Taylor para funciones en dos variables  $x$  y  $y$ , es posible escribir de forma exacta para el punto  $x_i$  y  $y_j$

$$f(x_i + \Delta x, y_j) = f(x_i, y_j) + \Delta x \frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} + \frac{\Delta x}{2} \frac{\partial^2 f(x_i + \theta_1 \Delta x, y_j)}{\partial x^2} \quad (\text{E.22})$$

$$f(x_i, y_j + \Delta y) = f(x_i, y_j) + \Delta y \frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} + \frac{\Delta y}{2} \frac{\partial^2 f(x_i, y_j + \theta_2 \Delta y)}{\partial y^2} . \quad (\text{E.23})$$

Así, la aproximación en diferencias hacia delante de  $\partial f/\partial x$  y  $\partial f/\partial y$  es

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_i + \Delta x, y_j) - f(x_i, y_j)}{\Delta x} \quad (\text{E.24})$$

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f(x_i, y_j + \Delta y) - f(x_i, y_j)}{\Delta y} \quad (\text{E.25})$$

o en su forma simplificada (para simplificar la notación, asociamos  $\Delta x = h$  y  $\Delta y = k$ ),

tenemos

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f_{i+1,j} - f_{i,j}}{h} \quad y \quad \frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j}}{k}. \quad (\text{E.26})$$

La aproximación en diferencias hacia atrás de  $\partial f/\partial x$  y  $\partial f/\partial y$  es

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_i, y_j) - f(x_i - \Delta x, y_j)}{\Delta x} \quad (\text{E.27})$$

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f(x_i, y_j) - f(x_i, y_j - \Delta y)}{\Delta y} \quad (\text{E.28})$$

o en su forma simplificada, tenemos

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f_{i,j} - f_{i-1,j}}{h} \quad y \quad \frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f_{i,j} - f_{i,j-1}}{k}. \quad (\text{E.29})$$

Por último la aproximación en diferencias centradas de  $\partial f/\partial x$  y  $\partial f/\partial y$  es

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f(x_i + \Delta x, y_j) - f(x_i - \Delta x, y_j)}{2\Delta x} \quad (\text{E.30})$$

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f(x_i, y_j + \Delta y) - f(x_i, y_j - \Delta y)}{2\Delta y} \quad (\text{E.31})$$

o en su forma simplificada, tenemos

$$\frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial x} \simeq \frac{f_{i+1,j} - f_{i-1,j}}{2h} \quad y \quad \frac{\partial f(x_i, y_j)}{\partial y} \simeq \frac{f_{i,j+1} - f_{i,j-1}}{2k}. \quad (\text{E.32})$$

Por otro lado, la aproximación en diferencias centradas de  $\partial^2 f/\partial x^2$  y  $\partial^2 f/\partial y^2$  es

$$\frac{\partial^2 f(x_i, y_j)}{\partial x^2} \simeq \frac{f(x_i + \Delta x, y_j) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i - \Delta x, y_j)}{\Delta x^2} \quad (\text{E.33})$$

$$\frac{\partial^2 f(x_i, y_j)}{\partial y^2} \simeq \frac{f(x_i, y_j + \Delta y) - 2f(x_i, y_j) + f(x_i, y_j - \Delta y)}{\Delta y^2} \quad (\text{E.34})$$

en forma simplificada, tenemos (ref. [50])

$$\frac{\partial^2 f(x_i, y_j)}{\partial x^2} \simeq \frac{f_{i+1,j} - 2f_{i,j} + f_{i-1,j}}{h^2} \quad y \quad \frac{\partial^2 f(x_i, y_j)}{\partial y^2} \simeq \frac{f_{i,j+1} - 2f_{i,j} + f_{i,j-1}}{k^2}. \quad (\text{E.35})$$