



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

ESTUDIO AUTOCONSISTENTE DE LA INTERACCIÓN
ESPÍN-ÓRBITA DE RASHBA EN POZOS CUÁNTICOS
SEMICONDUCTORES

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

PRESENTA:
ALDO GERARDO RODRÍGUEZ GUERRERO

TUTOR PRINCIPAL
DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA
CNyN-UNAM

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR
MANUEL HERRERA ZALDIVAR
CNyN-UNAM
JORGE VILLAVICENCIO AGUILAR
UABC

ENSENADA, MAYO, 2016



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

Primeramente, quiero agradecer a mis padres, Luis Rodríguez Tolosa y Olga Guerrero Messina, muchas gracias por todas sus enseñanzas, y sobre todo por haberme enseñado por medio del ejemplo.

A mi asesor, el Dr. Francisco Mireles Higuera, por su paciencia y el haber compartido un subconjunto de sus saberes conmigo.

A mis hermano, Patricia, Luis, Sandra y Rocío Rodríguez, por ser un ejemplo ferviente de familia.

A mis compañeros, Juan Antonio Peralta, Carlos Gonzales, Aritz Barrondo y Margot Sainz, por su invaluable apoyo.

A mis compañeros, Guadalupe Moreno Armenta, Armando Reyes, Renée Papritz, Oscar Edel Contreras, sin sus palabras de sabiduría esta tesis no sería.

A mi amigos y compañeros en esta travesía, Catalina Hernandez, Antonio León, Ana María Gómez, Fabiola del Castillo, Axel Fabela, Rodrigo Manriquez, Alfredo Salaz, Martín Celaya, José Luis Álvarez, Mayra Ramirez, Marysol Ochoa, y todos los que me han ayudado a ser quien soy.

Un culombio es la carga eléctrica de 6.241×10^{18} electrones.

-¿Tántos? ¿Millones de billones de trillones de electrones?

-Ajá.

-¿Y quién los contó?

-Yo.

-¡Ah! si fue usted, compadre, el que los contó, entonces sí le creo.

Fernando Vallejo, Manualito de imposturología física.

Resumen

Se realizó un estudio teórico del acoplamiento espín-órbita de Rashba presente en gases de electrones bidimensionales contenidos en nanoestructuras semiconductoras III-V con dopaje modulado. En particular se presenta un estudio sistemático de la influencia del dopaje modulado y campos eléctricos externos en pozos de potencial que contienen al gas de electrones bidimensional con la magnitud del parámetro de acoplamiento α_R de Rashba.

Se desarrolló un método computacional para resolver de forma autoconsistente la ecuación de Schrödinger y la ecuación de Poisson para tales sistemas con dopaje modulado. Esto nos permitió obtener el perfil de potencial, concentración electrónica en el pozo con gran precisión y eficacia en tiempo de cómputo. El modelo consiste en una hibridación de metodologías reportadas en la literatura basada en convenientes transformaciones unitarias el Hamiltoniano de la heterounión en conjunto con una refinada y eficaz solución de la ecuación de Poisson, todo esto realizado en un esquema de diferencias finitas con malla no-uniforme.

Una vez en encontrada la convergencia para los estados electrónicos se calcularon los valores esperados del parámetro de Rashba α_R dentro del modelo $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ de teoría de masa efectiva y se compararon nuestros resultados con los reportados por experimentos en la literatura.

En particular, se realizó el estudio del comportamiento del parámetro de Rashba α_R como función de la densidad de donadores de carga de un lado de un pozo de potencial de AlSb/InAs/AlSb en el rango de $Dop = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ a $Dop = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Encontrando que la magnitud del parámetro de Rashba es mínimo a densidades de dopaje alrededor de $Dop = 2.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, arrojando un valor de $\alpha_R = 0.592 \text{ meVnm}$, consistente con lo observado en el comportamiento físico de la nanoestructura.

Asimismo se realizó un análisis de la variación del parámetro de Rashba con campos eléctricos externos típicamente inducidos en experimentos vía potenciales de compuerta. Observamos que la magnitud del parámetro de Rashba presenta un comportamiento creciente como función del campo externo, entre $\phi_{ext} = 0 \text{ kV/cm}$ y $\phi_{ext} = 50 \text{ kV/cm}$, este potencial eléctrico es grande pero realizable en experimentos actuales. Nuestro método también nos permitió aplicar voltajes de compuerta aún mayores, para fines ilustrativos, hasta llegar a $\phi(z) = 500 \text{ kV/cm}$, lo que es un valor extremadamente grande, pero nos permitió ver un comportamiento más interesante de el parámetro α_R , se obtuvo un incremento considerable del parámetro de Rashba ($\alpha_R = 14.310 \text{ meVnm}$) a un campo externo extremadamente grande $\phi(z) = 170 \text{ kV/cm}$. El incremento del valor de α_R es de gran interés en la espintrónica para aplicaciones en dispositivos como transistores de espín, por lo que nuestros resultados pueden ser de relevancia para la implementación práctica de tales dispositivos.

Palabras Clave: Parámetro de Rashba, Dopaje modulado, GE2D, Schrödinger-Poisson.

Índice general

Abstract	IV
1. Introducción	1
2. Teoría de masa efectiva	6
2.1. Hamiltoniano efectivo para una impureza	6
2.2. Impurezas hidrogenoides	13
2.3. Teoría de masa efectiva en heteroestructuras	14
3. Nanoestructuras con dopaje modulado	20
4. Acoplamiento espín-órbita en semiconductores	24
4.1. Semiconductores con asimetría de inversión espacial	26
5. Método para la solución de la ecuación de Schrödinger y Poisson	33
5.1. Ecuación de Schrödinger en el esquema de diferencias finitas	36
5.2. Ecuación de Poisson en el esquema de diferencias finitas	39
6. Estudio numérico de nanoestructuras con solución analítica conocida.	45
6.1. Solución numérica para pozo finito y pozo triangular	45
6.1.1. Pozo cuántico finito	45

	VI
6.1.2. Pozo cuántico triangular	47
6.2. Cálculos auto-consistentes	53
6.2.1. Solución auto-consistente	54
6.2.2. Solución auto-consistente con campo eléctrico externo	56
6.2.3. Solución auto-consistente con dopaje modulado	56
6.2.4. Solución auto-consistente con campo eléctrico externo y dopaje modulado	58
7. Cálculo del parámetro de Rashba	62
7.1. Caracterización del pozo finito de InAs/AlSb	63
7.1.1. Caso: pozo de potencial cuántico finito	63
7.1.2. Caso: pozo finito con campo eléctrico externo	65
7.1.3. Caso: pozo finito con dopaje modulado	65
7.1.4. Caso: pozo finito con dopaje y campo externo	68
7.2. Análisis del comportamiento del parámetro de Rashba con nuestro método	68
7.2.1. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a la den- sidad de donadores de carga	70
7.2.2. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a un campo eléctrico externo	75
7.2.3. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a un campo eléctrico externo con dopaje modulado	79
7.2.4. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto al dopaje modulado a un campo eléctrico externo	81
8. Conclusiones	83

A. Apéndice A: Método de diferencias finitas

Índice de tablas

2.1. Energías de amarre predichos por la teoría de masa efectiva (TME) y la energía de amarre medida experimentalmente en donadores típicos en semiconductores zincblenda III-V [1]. Note la excelente concordancia con los datos experimentales, lo que valida el modelo de impurezas hidrogenoides en la TME	14
4.1. En esta tabla se presenta la estimación de la α_R para distintos materiales, utilizando la ecuación 4.16 y un campo electrostático externo $\phi(z) = 50 \text{ kV/cm}$	32
4.2. Rango de valores del parámetro de acoplamiento de Rashba $\alpha_R = 2k_F\alpha_R$ medidas experimentalmente y el desdoblamiento de espín Δ_R en la energía de Fermi ε_F [2].	32
6.1. Parametros utilizados por Chuang para resolver el pozo finito.	46
6.2. Comparaciones del valor del estado base Chuang [3] y el método SPalpha.	47
6.3. En esta tabla se pueden apreciar los valores de la energía los tres primeros estados ligados del pozo cuántico triangular 6.3, obtenidos mediante la solución analítica y numérica utilizando el método presentado en esta tesis.	51
7.1. Resultados obtenidos de el pozo cuántico	63

7.2. Resultados obtenidos de el pozo cuántico con un campo eléctrico externo de 50 kV/cm	65
7.3. Resultados obtenidos de el pozo cuántico con dopaje modulado.	68
7.4. Resultados obtenidos de el pozo cuántico con dopaje modulado.	68

Índice de figuras

- 2.1. (a) Una representación esquemática de la función envolvente, curva suave. La curva con múltiples oscilaciones es generada por las funciones de onda asociadas a los núcleos atómicos, las cuales varían rápidamente en la aproximación de estos. (b) La posición de los tomos atómicos son señalados por los puntos; también se puede apreciar al potencial asociado a los núcleos atómicos de la red cristalina [4]. 9
- 2.2. En esta figura se muestra de forma esquemática la interfaz entre dos materiales semiconductores A y B, con una desempatamiento entre sus bandas de conducción de ΔE_C , la cual sería la diferencias entre ambas bandas de conducción E_C^A y E_C^B 16
- 2.3. En esta figura se muestra la función de onda completa $\phi(z)$, incluyendo las funciones de Bloch $\psi(z)$, las cuales varían rápidamente en posición. La función envolvente construida uniendo los máximos de las funciones de Bloch. Se puede observar un cambio ligeramente abrupto en la interfaz entre los materiales, cómo se puede esperar dada la condición de continuidad (ecuación 2.20) [5]. 18

3.1. (a) En esta figura se muestra de una manera esquemática como los electrones de los donadores migran de la capa de AlGaAs con dopaje tipo n a la heterointerfaz. (b) Esto crea un pozo de potencial en el cual quedan atrapados los electrones dejando atrás a los átomos de los donadores ionizados, lo que y crean un campo electrostático interno que a su vez modifica el perfil de la banda de conducción [5] 21

3.2. Ilustración de una heterounión entre dos semiconductores con dopaje modulado (InAs/GaSb), en el cual se indican los dos estados ligados más bajos, al igual que el nivel de Fermi ε_F [6]. 23

4.1. Aquí se muestra de forma esquemática el rompimiento de la degeneración en momento debido a la existencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba. 26

4.2. Esquema del diagrama de dispersión de bandas en el punto Γ de simetría típica de semiconductores III-V. 27

5.1. Figura esquemática de el sistema. 35

6.1. Pozo finito GaAs/AlGaAs/GaAs con $l_p = 10\text{ nm}$ de ancho, rodeado de un par de barreras de $l_b = 15\text{ nm}$. Este cálculo se realizó resolviendo la ecuación de Schrödinger (ec. 5.1) mediante el método de diferencias finitas con un total de 2048 particiones. Se muestra el perfil de la banda de conducción en rojo y los 3 estados ligados (con $\varepsilon_0 = 30.70\text{ meV}$, $\varepsilon_1 = 120.67\text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 245.49\text{ meV}$) de color azul, el eje derecho es el que pertenece a dicha función de onda asociado a cada estado ligado. 48

6.2. Esta gráfica muestra las funciones de Airy $Ai(s)$ y $Bi(s)$, en donde se puede apreciar el comportamiento de ambas soluciones matemáticamente validas para el problema del pozo triangular. Si embargo, sólo la función $Ai(z)$ tiene relevancia física. 50

- 6.3. En esta figura se muestran los primeros tres estados obtenidos de la solución analítica (línea azul continua), y las funciones de onda obtenidas numéricamente por nuestro método (cruces), así como la barrera de potencial triangular (rojo). Para este sistema se tomó $F = 50 \text{ kV/cm}$, el sistema es GaAs con $m^* = 0.0665$ 52
- 6.4. El sistema propuesto por Roan *et al.* [7], que consta de un pozo de potencial de GaAs con un ancho de 100 \AA , con una barrera de potencial a cada lado del pozo de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ de un grosor de 200 \AA , en algunos casos los últimos 50 \AA son dopados con Si (donadores), y el sistema se encuentra embebido en AlAs. 53
- 6.5. Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método. En (a) y (c) se presenta el perfil de la banda de conducción y la energía de las tres funciones de onda, el pozo con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados. En (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estado ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitados. 55

- 6.6. Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método. En (a) y (c) se muestran al perfil de la banda de conducción con un campo eléctrico aplicado de 50 kV/cm a el pozo de potencial con linea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las lineas rectas a la energía asociada a las primeras tres primeras funciones de onda. En (b) y (d) se muestran los estados ligados, la linea sólida corresponde a el primer estado ligado y las lineas discontinuas a los primeros estados excitado. 57
- 6.7. Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método; En (a) y (c) se muestran el perfil de la banda de conducción y la energía de los tres primeros estados al dopar ambos extremos con una densidad de donadores $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, el perfil de la banda de potencial del pozo con linea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las lineas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados, en (b) y (d) se muestran los estados ligados, la linea sólida corresponde a el primer estado ligado y las lineas discontinuas a los primeros estados excitados, en esta gráfica se puede apreciar el fuerte desplazamiento de la banda de conducción sobre todo en el centro del pozo ya que nuestras condiciones de frontera para el potencial electrostático ($\phi(z)$) son los de una onda estacionaria, también se puede apreciar que el segundo estado excitado $\psi_3(z)$ es desplazado fuera del pozo de potencial. 59

- 6.8. Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método; El (a) y (c) se presenta al perfil de la banda de conducción con un campo eléctrico aplicado de 50 kV/cm y con dopaje modulado en ambos extremos de la nanoestructura con densidad de donadores de $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, así como la energía de los tres primeros estados, el pozo con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados, en (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estados ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitados. 61
- 7.1. En esta figura se muestran los tres estados ligados de un pozo finito conformado por InAs con un espesor de 10 nm , mismo que es acotado por dos capas de AlSb de 20 nm , las energías de dichos estados se muestran en la tabla 7.1, es importante resaltar que en este caso que se resolvió sólo la ecuación de Schrödinger *per se*. 64
- 7.2. En esta figura se puede apreciar la banda de conducción (línea roja) del pozo cuadrado con un campo eléctrico externo aplicado de 50 kV/cm , lo que induce una pendiente en dicha banda; también son mostrados los dos primeros estados ligados con energías mostradas en la tabla 7.2. 66

- 7.3. En esta gráfica se puede observar como el perfil de la banda de conducción es modificado por una capa con impurezas de Si con una concentración de $1.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, se puede apreciar como la banda de conducción es modificada por la redistribución de cargas, las cuales quedan atrapadas en la vecindad de la interfase (al rededor de los primeros 20 nm), también se puede ver que el campo generado es de carácter local, ya que después de el pozo la banda de conducción se comporta de manera constante, recorrida por el campo interno; el perfil de la banda de conducción original es mostrado por la línea roja punteada y el resultando del cálculo autoconsistente con la línea roja sólida. También se pueden observar los tres primeros estados ligados. 67
- 7.4. En esta figura se puede apreciar el perfil de la banda de conducción y los tres primeros estados ligados. 69
- 7.5. En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 0.0 \text{ kV/cm}$. 71
- 7.6. En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 5.0 \text{ kV/cm}$. 72
- 7.7. En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el Δ_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 10.0 \text{ kV/cm}$ 73
- 7.8. En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 50.0 \text{ kV/cm}$ 74

- 7.9. Se muestra la respuesta del parámetro de acoplamiento α_R de Rashba al ser variado el campo eléctrico aplicado de manera externa de $\phi(z) = 0.0 \text{ kV/cm}$ a $\phi(z) = 50.0 \text{ kV/cm}$ 76
- 7.10. En esta figura se muestra el comportamiento del parámetro α_R de Rashba al variar el campo eléctrico externo de $\phi(z) = 0 \text{ kV/cm}$ hasta $\phi(z) = 500 \text{ kV/cm}$ 77
- 7.11. En esta figura se puede apreciar el comportamiento de el parámetro α_R de Rashba con respecto a la variación del campo eléctrico externo aplicado a la nanoestructura, estado esta dopada con un exceso de portadores de carga ($Dop = 2.0 \times 10^{16}$) 78
- 7.12. En esta figura se puede observar como se comporta el parámetro de acoplamiento espín-órbita (α_R) en función de un campo electrostático externo para distintas concentraciones de dopaje modulado (Dop). . . 80
- 7.13. En esta figura se puede observar como se comporta el parámetro de acoplamiento espín-órbita (α_R) en función de la densidad de impurezas donadoras (Dop) para distintos campo electrostático externo. 82

1. Introducción

En el año de 1990 Datta y Das [8] publican un artículo en el que proponen una idea novedosa, la implementación de un análogo electrónico al modulador opto-electrónico, ahora mejor conocido como el *Transistor de espín*. Su funcionamiento se basa en el efecto espín-órbita en semiconductores, estudiado años atrás (1959) por Emmanuel Rashba [9]. La posibilidad de basar la electrónica convencional en otra propiedad de la materia, como el momento magnético intrínseco del electrón o *espín* (a demás de la carga del mismo), como fue propuesto por Datta y Das, abrió toda una nueva rama de la física llamada *espintrónica* [10](del inglés spintronics, SPIN TRansport electrONICS). El efecto espín-órbita de Rashba también dio origen a toda una nueva fenomenología física basada en el espín, tales como la corriente de espín polarizadas [11], el efecto Hall de espín [12], incluyendo su versión cuantizada [13], el efecto zitterbewegung [14], entre otros. Recientemente el efecto espín-órbita es un campo de investigación muy activo en el tema de de los aislantes topológicos.

La importancia de la interacción espín-órbita (IEO) para la estructura de bandas de los electrones de Bloch fue señalada primero en 1954 por Elliott [15] y Dresselhaus *et al.* [16]. Elliott señala en este importante artículo que se encuentra una degeneración en el espín en las bandas de energía $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ para cada vector de onda \mathbf{k} de la zona de Brillouin. Lo anterior, siempre y cuando la inversión espacial sigue siendo una buena simetría de la estructura cristalina. Dresselhaus *et al.* [16] por otro lado demostró que el desdoblamiento del espín (SS, por sus siglas en inglés) de los orbitales atómicos tipo-*p* podrían cualitativamente alterar el espectro de resonancias del ciclotrón en semiconductores como Silicio y Germanio.

Posteriormente en un trabajo pionero Dresselhaus [17] utiliza teoría de grupos e

invariantes realiza un estudio de los efectos de el acoplamiento SO en semiconductores tipo zincblenda con asimetría de inversión de bulto (AIB), que es la estructura cristalina de muchas semiconductores (tipo III-V y tipo II-VI) de interés tales como el GaAs, InSb y CdTe. Predijo un desdoblamiento de espín en la dispersión $\varepsilon(\mathbf{k})$, de orden cúbico en el vector de onda \mathbf{k} para bandas de conducción con simetría Γ_6 . Este es conocido actualmente como *acoplamiento de espín-órbita de tipo Dresselhaus*.

En el artículo ampliamente citado de Bychkov y Rashba (1984) [9] presentan el famoso hamiltoniano de Rashba, en este artículo Bychkov y Rashba no mencionan la asimetría de inversión espacial, ahora se conoce la necesidad de que exista la AIE en la dirección de crecimiento del cristal para que el efecto Rashba se presente en las nanoestructuras. Algunos autores pensaron que el desdoblamiento del espín en la banda de conducción era proporcional a el campo eléctrico en la banda de conducción. Malcher *et al.* en 1986 [18] observó que el promedio del campo eléctrico no es cero si la función de onda del electrón penetra a una a una región con distinta masa efectiva. Lassnig en 1985 [19] utilizando la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, fue el primero en reconocer que el efecto de espín-órbita tipo Rashba en la banda de conducción tiene una dependencia con el gradiente del potencial incluyendo el desempatamiento de la banda de valencia en la interfaz.

La primera teoría del desdoblamiento del espín debido a la asimetría de inversión espacial para las bandas de valencias tipo- p fueron llevadas acabo por Ohkawa y Uemura (1975) [20], Bangert y Landwehr (1976) [21], y Ando (1985) [22].

Por la parte experimental, la primera vez que se reportó el desdoblamiento en el espín debido a la asimetría de inversión espacial es en el trabajo de Stormer *et al.* (1983) [23], quien observó patrones de nodos en las oscilaciones de Shubnikov-de Haas (ShdH) y un desdoblamiento en las frecuencias de resonancia del ciclotrón de huecos en una nanoestructura de GaAs/GaAlAs. La primera observación del des-

doblamiento en el espín en la banda de conducción fue reportada en 1988 por Luo *et al.* en un pozo cuántico de GaSb/InAs [24] e independientemente por Das *et al.* (1989) en una nanoestructura de $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_y\text{Al}_{1-y}\text{As}$ [25], ambos usando los patrones de nodos de las oscilaciones de ShdH. Posteriormente Dresselhaus *et al.* en 1992 [26] demostraron que el desdoblamiento en el espín puede ser medido mediante el efecto de antilocalización débil en la magnetoconductancia a muy bajos campos magnéticos. Jusserand *et al.* en 1995 [27] y Richard *et al.* en 1996 [28] proveyeron los datos más completos del SS disponible hasta hoy (2015) mediante la dispersión de Raman de los electrones de conducción en pozos cuánticos de GaAs/GaAlAs. Engels *et al.* en 1997 [29] y Nitta *et al.* en 1997 [30] comenzaron a realizar experimentos de el efecto de campos eléctricos externos en el SS en heteroestructuras con compuertas, lo que esta directamente relacionado con posibles aplicaciones espintrónicas. Khodaparast *et al.* en 2001 midieron el SS relacionado a la AIE en pozos cuánticos de InSb/InAlSb directamente mediante la resonancia de espín [31].

De los métodos experimentales para medir el acoplamiento de Rashba en nanoestructuras, el método más accesible es por medio de los patrones de nodos en la oscilación de la magnetoconductancia de ShdH. Los niveles de Landau de cada población de espín origina oscilaciones de la magnetoconductancia con una diferencia de fase entre ambas poblaciones de espín, lo que origina nodos en las oscilaciones, la fase entre ambas poblaciones de espín es proporcional a la diferencia de energía entre ellas. La separación de los distintos estados de espín puede ser determinada contando el número de oscilaciones entre dos nodos, o mediante la simulación numérica de los patrones de nodos de ShdH y comparando estas con las experimentales, como fue publicado por Luo *et al.* [24].

Recientemente, diversos autores han investigado el SS y su dependencia con un campo eléctrico externo en heteroestructuras con compuertas. Esto con particular

interés después de que Datta y Das (1990) [8] propusieran su famoso análogo electrónico al modulador óptico, el cual basa su funcionamiento en este efecto. Un campo eléctrico externo afecta el SS de dos maneras distintas. Primero, cambiando la densidad de portadores de carga en el pozo cuántico, *i.e.* el vector de Fermi k_F . Segundo, cambiando la asimetría del pozo de potencial cuántico.

Engels *et al.* en 1997 [29] demostró que el parámetro α de Bychkov-Rashba es modificado por un campo eléctrico externo, una descripción teórica en total concordancia con los datos experimentales. En particular, fue demostrado que la principal contribución al parámetro α es debido a la asimetría de la función de onda en la interface. Schäpers *et al.* en 1998 [32] expandió el anterior trabajo de Engels *et al.* [29].

En 2009, Nitta *et al.* presentan un estudio teórico y experimental sobre la manipulación del espín de electrón por medio de el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba en heteroestructuras semiconductoras, la parte experimental se realizó midiendo las antilocalizaciones débiles, encontrando una dependencia del valor absoluto de la α_R inversa a la densidad superficial N_s , explicado mediante la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. En la tabla 4.2 se muestran valores típicos de el parámetro de Rashba α_R para distintos semiconductores tipo III-V.

En el año 2015, 25 años después del impetuoso artículo publicado por Datta y Dass [8], Pojen Chuang *et al.* [33], publican un interesante artículo en el que reportan la fabricación de un *all-electric all semiconductor spin field-effect transistors*; un transistor de efecto de campo de espín controlado eléctricamente y fabricado sólo con materiales semiconductores. La forma con la que logran superar los distintos problemas asociados a la fabricación de el sFET es mediante QPCs (por sus siglas en ingles).

El obtener la constante de Rashba (α_R) en una heteroestructura así como poder estimar de manera certera su dependencia con el campo eléctrico externo, la densidad

de las impurezas con las que es dopada la heteroestructura, así como de las distintas configuraciones del sistema, nos ayudaría dar un gran paso en el diseño de futuros dispositivos que aprovechen la IEO. Por lo que esta tesis se encuentra orientada a el desarrollo de un método para estimar el posible valor del parámetro de Rashba (α_R) en una nanoestructura arbitraria, conociendo sólo las propiedades de bulto del mismo (Δ_{SO} , m_r , E_g , ϵ_r , etc.)

En el capítulo 2 se hará una revisión de la aproximación de masa-efectiva, siendo ésta teoría la base para la solución de la ecuación de Schrödinger; seguido por el capítulo 3 donde se trata el tema de heteroestructuras con dopaje modulado y el gas de electrones bidimensional; el capítulo 4 trata del acoplamiento espín-órbita, después se detallará el método presentado en esta tesis en el capítulo 5; en el capítulo 6 se analizarán distintos casos reportados en la literatura para mostrar la confiabilidad de nuestro método, al final en el capítulo 7 se expondrán los resultados obtenidos al analizar un sistema que presenta IEO con energías viables para el desarrollo de dispositivos como el expuesto por Datta y Das [8].

2. Teoría de masa efectiva

La teoría de masa efectiva es una de las teorías más versátiles y poderosas en estado sólido. Esto es justificado por su capacidad de predecir resultados consistentes con los obtenidos mediante métodos experimentales. Por constituir la base teórica fundamental para el desarrollo de nuestro estudio en esta tesis, en este capítulo haremos una revisión de la *teoría de masa efectiva* lo que nos permitirá establecer las ecuaciones básicas que utilizamos en este trabajo.

2.1. Hamiltoniano efectivo para una impureza

Supongamos que se agrega una perturbación como una impureza a un cristal semiconductor perfecto al cual, en principio tiene funciones de onda y espectro energético conocido. Siendo más precisos, la perturbación podría ser una impureza atómica que genera un pozo cuántico, una barrera de potencial, una súper red. La idea es encontrar las nuevas eigenfunciones así como las nuevas eigenenergías producidas al introducir dicha impureza. La dinámica de los electrones en el cristal con la perturbación dentro del esquema de partícula independiente estará gobernada por la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo,

$$[\hat{\mathbf{H}}_0 + V_{imp}(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\Psi(\mathbf{r}), \quad (2.1)$$

dónde $\hat{\mathbf{H}}_0$ es el hamiltoniano para el cristal perfecto dado por $\hat{\mathbf{H}}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\nabla^2 + V_0$, con m_0 la masa del electrón libre, V_0 es el potencial periódico del cristal perfecto, $V_{imp}(\mathbf{r})$ la contribución adicional de la impureza, $\Psi(\mathbf{r})$ es la función de onda de los electrones en la posición \mathbf{r} y ε es la energía. La ecuación de Schrödinger para el cristal

perfecto puede ser resuelto mediante el uso de funciones con un mismo periodo a que concuerda con el del cristal perfecto (*i. e.* utilizando el teorema de Bloch), pero al introducir impurezas se rompe la simetría del cristal, así que la ecuación 2.1 presenta un gran reto para resolverse de manera analítica.

Sin embargo, como veremos más adelante, utilizando la teoría de masa efectiva es posible conocer soluciones simples para el caso en que las impurezas son creadas por donadores o aceptores de electrones en un semiconductor. Un donador se comporta como si tuviese una carga positiva asociada a ella ya que al ionizarse libera al electrón extra, por lo general en una nanoestructura III-V los donadores son átomos del grupo IV embebido en el material del grupo III, por lo que cuentan con un electrón que no participa en la formación de la nanoestructura, en el caso de los aceptores el signo es invertido. La impureza entonces se comporta como un átomo de Hidrógeno, pero con la masa rescalada a la masa efectiva de los electrones o huecos. Así mismo la carga es apantallada por la constante dieléctrica del semiconductor huésped. Ambos efectos reducen la energía de ionización substancialmente de 13.6 eV para el átomo de Hidrógeno a solamente 5 meV para un donador de electrones en GaAs (por ejemplo). Esta estimación teórica es consistente con las mediciones obtenidas experimentalmente para las energías de amarre típicas de impurezas donadoras en GaAs. Estas situaciones se puede justificar por la teoría de la masa efectiva, la cual describiremos en forma resumida a continuación.

Sin perder generalidad para simplificar la notación considérese un sistema unidimensional. Suponga que se ha resuelto la ecuación de Schrödinger para el cristal perfecto

$$\hat{\mathbf{H}}_0 \phi_{nk}(z) = \varepsilon_n(k) \phi_{nk}(z), \quad (2.2)$$

donde ϕ_{nk} y ε_n , son las eigenfunciones y eigenvalores del hamiltoniano $\hat{\mathbf{H}}_0$ con n rep-

representando la n -ésima solución con momento k . Como éstas soluciones $\phi_{nk}(z)$ forman un conjunto completo, la función de onda $\Psi(z)$ del sistema con la impureza puede entonces ser expandida en términos de $\phi_{nk}(z)$ de la forma,

$$\Psi(z) = \sum_n \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}_n(k) \phi_{nk}(z) \frac{dk}{2\pi}, \quad (2.3)$$

donde $\tilde{\psi}_n(k)$ son los coeficientes de la expansión. Esta ecuación tiene una sumatoria sobre todas las n bandas electrónicas, a es la periodicidad de la red cristalina. La integral en k que incluye todos los estados en la primera zona de Brillouin del cristal. Podemos sustituir la expansión 2.3 e intentar encontrar $\tilde{\psi}_n(k)$. Sin embargo, esta sigue siendo una solución exacta, a pesar de que no es más sencilla de resolver, en principio, que la ecuación original. Para poder proceder adelante, la función de onda debe simplificarse, apropiadamente.

El primer paso es asumir que sólo la función de onda de una sola banda toma el papel principal en la conducción. De esta forma la sumatoria sobre n se pueda eliminar. Tomando a un donador en el GaAs como ejemplo, esperamos que el estado principal (base) este cerca del fondo de la banda de conducción (Γ_6 para estructuras tipo zincblenda). Los estados en la banda de valencia o en la banda de conducción con mayor energía deberían de tener, en principio, una menor contribución para este tipo de semiconductores. Esto debe ser demostrado *a posteriori*. Experimentos de fotoluminiscencia catodoluminiscencia muestran que la energía del donador está cerca a la banda de conducción, pero lejana a las demás bandas. Por lo tanto la aproximación mencionada en la teoría de masa efectiva es razonablemente buena.

Cómo segundo paso suponemos que sólo los estados en una pequeña porción del espacio- k contribuyen significativamente a la integral. En el caso de una impureza donadora, esperamos que k se encuentre alrededor de 0, al igual que el fondo de la

banda de conducción es encontrada en el punto de simetría Γ en semiconductores zincblenda para energías cercanas a cero. Por tanto la función de Bloch se puede escribir cómo $\phi_{nk}(z) = u_{nk}(z) \exp(ikz)$, donde $u_{nk}(z)$ es una función periódica en z . Suponemos ahora que la mayoría de las variaciones en $\phi_{nk}(z)$ en k vienen de ondas planas y que $u_{nk}(z)$ puede ser tratada independientemente de k en una pequeña región del espacio- k . Por lo que escribimos (para valores pequeños de k),

$$\phi_{nk}(z) = u_{nk}(z)e^{ikz} \approx u_{n0}(z)e^{ikz} = \phi_{n0}(z)e^{ikz}. \quad (2.4)$$

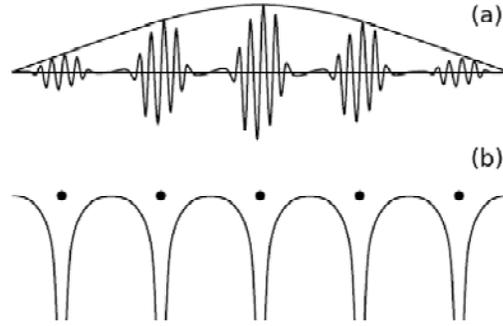


Figura 2.1: (a) Una representación esquemática de la función envolvente, curva suave. La curva con múltiples oscilaciones es generada por las funciones de onda asociadas a los núcleos atómicos, las cuales varían rápidamente en la aproximación de estos. (b) La posición de los tomos atómicos son señalados por los puntos; también se puede apreciar al potencial asociado a los núcleos atómicos de la red cristalina [4].

Note que con estas dos simplificaciones, la función de onda 2.3 toma la forma de una transformada inversa de Fourier,

$$\Psi(z) \approx \phi_{n0}(z) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}(k) e^{ikz} \frac{dk}{2\pi} = \phi_{n0}(z) \psi(z). \quad (2.5)$$

Éste es el primer resultado significativo de la teoría de masa efectiva. La función de onda puede reescribirse aproximadamente cómo el producto de la función de Bloch del extremo local de la banda de energía del material anfitrión y una *función envolvente*

$\psi(z)$. Suponiendo que $\tilde{\psi}(k)$ contiene solo un pequeño rango de números de onda, esto a su vez significa que $\psi(z)$ debe ser una función que varía lentamente en el espacio real. Por ejemplo, se sabe que el radio de un donador es alrededor de 10 nm en el GaAs, el cual es grande para la constante de red que es alrededor de 0.5 nm .

Éste es un paso adelante, ahora necesitamos una ecuación para esta función envolvente. Sustituimos la ecuación (2.3) en la ecuación de Schrödinger (2.1). El problema principal es el efecto de $\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + V_{imp}(z)$. Si hacemos la reducción a una sola banda obtenemos

$$\begin{aligned} \hat{H}\Psi(z) &= \hat{H} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}(k) \phi_{nk}(z) \frac{dk}{2\pi} \\ &= \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}(k) \varepsilon_n(k) \phi_{nk}(z) \frac{dk}{2\pi} \\ &\approx \phi_{n0}(z) \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}(k) \varepsilon_n(k) e^{ikz} \frac{dk}{2\pi}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Note que el hamiltoniano \hat{H} actúa sólo en la dirección z , por lo tanto sólo afecta a $\phi_{nk}(z)$. Además sabemos que ésta última es una eigenfunción de la ecuación de Schrödinger para el cristal perfecto (2.2), por tanto el operador puede ser sustituido por su eigenvalor $\varepsilon_n(k)$. Finalmente, hacemos la aproximación (2.4) para la función de Bloch. Seguidamente expandimos la banda de energía como una serie infinita de potencias de k : $\varepsilon_n(k) = \sum_m a_m k^m$, con m entera. Con esto obtenemos

$$\hat{H}\Psi(z) \approx \phi_{n0}(z) \sum_m a_m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \tilde{\psi}(k) k^m e^{ikz} \frac{dk}{2\pi}. \quad (2.7)$$

Ahora utilizaremos el resultado estándar de la transformada de Fourier de una derivada. Primero note que la integral (por partes),

$$\int \frac{df(z)}{dz} e^{-ikz} dz = ik \int f(z) e^{-ikz} dz = ik \tilde{f}(k), \quad (2.8)$$

lo que nos indica que la transformada inversa de Fourier de $k\tilde{f}(k)$ es simplemente $-idf(z)/dz$. Este resultado puede ser generalizado para mostrar que la transformada inversa de $k^m\tilde{f}(k)$ es $(-id/dz)^m f(z)$, para toda m . Por lo que la ecuación (2.7) se convierte en

$$\hat{H}\Psi(z) \approx \phi_{n0} \sum_m a_m \left(-i\frac{d}{dz}\right)^m \psi(z) \equiv \phi_{n0}(z)\varepsilon_n \left(-i\frac{d}{dz}\right) \psi(z). \quad (2.9)$$

Cabe aclarar que la expresión poco convencional $\varepsilon_n(-id/dz)$ no es nada más que una abreviación de la expresión de la izquierda. Esto quiere decir que uno debe tomar $\varepsilon_n(k)$, expandirla a una serie de potencias de k , y remplazar a k por $-id/dz$ en cada término. En general existe un número infinito de términos tal que $\varepsilon_n(-id/dz)$ es una expresión compleja a pesar de su clara notación.

Hemos reducido entonces la ecuación de Schrödinger (2.1) a una forma más simplificada, ya que los términos restantes $V_{imp}\Psi$ y $\varepsilon\Psi$ son simplemente una multiplicación escalar de la función de onda. Eliminando el factor común ϕ_{n0} , llegamos a

$$\left[\varepsilon_n \left(-i\frac{d}{dz}\right) + V_{imp}(z)\right] \psi(z) = \varepsilon\psi(z). \quad (2.10)$$

Éste es nuestro resultado final importante, esto es, una ecuación de Schrödinger para la función envolvente con un *hamiltoniano efectivo*. En el proceso, la función de Bloch se ha eliminado del problema, tal cómo el potencial periódico del huésped a favor de un complicado operador de energía cinética que contiene la estructura de bandas. En tres dimensiones, $\varepsilon_n(-id/dz)$ es reemplazado por $\varepsilon_n(-i\nabla)$. La normalización de la función envolvente no representa gran dificultad, por que la función de onda completa es el producto de ψ y ϕ_{n0} , estas dos componentes usualmente son tratadas y normalizadas por separado, tal que

$$\int |\psi(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1, \quad \int |\phi_{n0}(\mathbf{r})|^2 d^3\mathbf{r} = 1, \quad (2.11)$$

donde ambas integrales son sobre el volumen Ω de la muestra. Por tanto, debemos utilizar $\Psi(\mathbf{r}) = \Omega^{1/2}\psi(\mathbf{r})\phi_{n0}(\mathbf{r})$ para que el producto obedezca la normalización. El hamiltoniano efectivo aún sería complicado de resolver si hubiésemos mantenido la estructura de bandas completa de $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Sin embargo, ya hemos supuesto que la función de onda es obtenida de una pequeña región del espacio \mathbf{k} , y que podemos simplificar a $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ para que sea consistente con este argumento. Por ejemplo, el fondo de la banda de conducción de GaAs es aproximadamente

$$\varepsilon_n(\mathbf{k}) \approx E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.12)$$

donde $m^* = m_0 m_r$ es la masa efectiva del electrón en la heteroestructura, siendo m_0 es la masa del electrón y m_r es la masa relativa del electrón en el material, la cual es claramente adimensional. Reemplazando a $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ obtenemos que

$$\varepsilon_n(-i\nabla) \approx E_c - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \quad (2.13)$$

Sustituyendo esto en la ecuación de Schrödinger efectiva (2.10), y pasando E_c al lado derecho de la ecuación, obtenemos finalmente

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V_{imp}(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = (\varepsilon - E_c) \psi(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Note que con este procedimiento finalmente llegamos a una ecuación de Schrödinger que se asemeja a la de un electrón libre, con la excepción de una masa efectiva (renormalizada) y con la energía medida desde el fondo de la banda de conducción.

2.2. Impurezas hidrogenoides

Ahora analizaremos el caso de una impureza en un semiconductor con características de un donador. El potencial coulombiano atractivo asociado a la impureza $V(\mathbf{r})_{imp} = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon^*R(\mathbf{r})}$, donde $R(\mathbf{r}) = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ es la distancia entre la impureza hidrogenoide en \mathbf{r}' y la función de onda del electrón, la ecuación de Schrödinger se convierte en,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon^*R} \right] \psi(\mathbf{r}) = (\epsilon - E_c)\psi(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Note que esta ecuación describe exactamente al átomo de hidrógeno con excepción de la masa efectiva m^* y la constante dieléctrica ϵ^* del semiconductor. Por tanto, podemos utilizar los resultados para el átomo de Hidrógeno y simplemente insertar las constantes en los resultados para el átomo de hidrógeno. Por lo que el estado de más baja energía es $E = E_c - R_y$, donde R_y es la *energía de Rydberg efectiva* (energía de amarre), la cual se define con la siguiente ecuación,

$$R_y = \frac{\hbar^2}{2m^*a_0^2} = \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon^*a_0}, \quad (2.16)$$

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon^*\hbar^2}{m^*e^2}, \quad (2.17)$$

donde a_0 es el *radio efectivo de Bohr*. La función de onda correspondiente al primer estado es $\psi(R) = (\pi a_0^2)^{-1/2} \exp(-R/a_0)$. Por ejemplo, para donadores en GaAs, usando $m^* = 0.0665$. La energía de amarre y el radio de Bohr efectivo para los donadores son, respectivamente, $R_y \approx 5.72 \text{ meV}$ y $a_0 \approx 10 \text{ nm}$. Esto en excelente concordancia con las energías de amarre determinadas experimentalmente, por ejemplo, para impurezas de Si y Ge en GaAs se han medido energías de 5.84 meV y 5.88 meV, respectivamente (ver Tabla 2.1 [1]).

Note que en este modelo hidrogenoide es genérico, esto es, no distingue entre diferentes impurezas en un mismo semiconductor. Sin embargo, la teoría de masa efectiva (TME) permite, inclusive, refinar las estimaciones de las energías de amarre de donadores y aceptores en los que distingue entre las energías asociadas a distintas especies de impurezas en un mismo semiconductor anfitrión. Tal refinamiento fue realizado en semiconductores de banda ancha III-V (nitruros) por F. Mireles y S. E. Ulloa utilizando pseudopotenciales atómicos locales [34][35][36].

Tabla 2.1: Energías de amarre predichos por la teoría de masa efectiva (TME) y la energía de amarre medida experimentalmente en donadores típicos en semiconductores zincblenda III-V [1]. Note la excelente concordancia con los datos experimentales, lo que valida el modelo de impurezas hidrogenoides en la TME

Semiconductor	Teórico (meV)	Experimental (meV)
GaAs	5.72	Si _{Ga} (5.84; Ge _{Ga} (5.88) S _{As} (5.87); Se _{As} (5.79)
InP	7.14	7.14
InSb	0.6	Te _{Sb} (0.6)
CdTe	11.6	In _{Cd} (14); Al _{Cd} (14)
ZnSe	25.7	Al _{Zn} (26.3); Al _{Zn} (27.9) F _{Se} (29.3); Cl _{Se} (26.9)

2.3. Teoría de masa efectiva en heteroestructuras

Para el caso de heteroestructuras semiconductoras, se debe de prestar un poco más de cuidado al aplicar la teoría de la masa efectiva. Recordemos que la función de onda en el bulto (sólido) total es el producto de una función envolvente que varía lentamente con respecto a la posición y la función de Bloch del extremo local en la estructura de bandas del huésped (ecuación 2.5). Para el caso de la unión de dos materiales en cualquier lado de la heterounión, la función de Bloch debe ser similar para que la aproximación de la masa efectiva sea válida. Una condición lógica sería que pertenezcan al mismo punto en la energía del n -ésimo eigenestado $\varepsilon_n(\mathbf{k})$. Esto

fallaría, por ejemplo, para la banda de conducción del GaAs y el AlGaAs, donde las bandas de conducción se encuentran en el punto Γ y en X , respectivamente. Aún que los mínimos sean los mismos, tal cómo en el GaAs y el $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, uno podría aventurarse a afirmar que la función de Bloch deberían ser casi idénticas. Esto es por que sus energías cinéticas son muy altas, tal que las diferencias en la función de Bloch podrían fácilmente introducir errores que pueden cambiar las energías de alrededor o menores de 0.1 eV , energías en las cuales normalmente estamos interesados. Sin embargo, cálculos detallados de primeros principios confirman que la teoría de la masa efectiva permanece aceptable a pesar de las pequeñas variaciones en la funciones de Bloch en los diferentes materiales.

Un segundo punto importante es el empatamiento de la función envolvente en la interfaz. Considere una unión en $z = 0$ entre un par de regiones neutras de un material A y uno B (GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con $0 < x < 0.45$, por ejemplo) como se esquematiza en la figura 2.2. La ecuación de Schrödinger para la función envolvente en las dos regiones, si consideramos solamente una dimensión por simplicidad, tenemos,

$$\begin{aligned} \left(E_c^A - \frac{\hbar^2}{2m_A^*} \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(z) &= \varepsilon\psi(z), \\ \left(E_c^B - \frac{\hbar^2}{2m_B^*} \frac{d^2}{dz^2} \right) \psi(z) &= \varepsilon\psi(z). \end{aligned} \tag{2.18}$$

donde E_c^A (E_c^B) y m_A^* (m_B^*) indican el fondo de la banda de conducción y la masa efectiva en el material A (B).

La diferencia en el fondo de la banda de conducción actúa cómo un potencial escalón con el material B más arriba por $\Delta E_c = E_c^B - E_c^A$. Si los materiales fuesen los mismos simplemente igualaríamos los valores y las derivadas de la función de onda en la interfaz, dando las condiciones conocidas ¹

¹Esta condición de continuidad de la derivada se deduce directamente de la conservación de carga a través de la interfaz e integrando la ecuación de Schrödinger al rededor de z_0 .

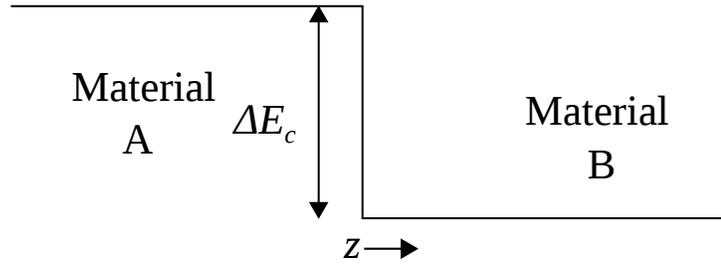


Figura 2.2: En esta figura se muestra de forma esquemática la interfaz entre dos materiales semiconductores A y B, con una desempatamiento entre sus bandas de conducción de ΔE_C , la cual sería la diferencias entre ambas bandas de conducción E_C^A y E_C^B .

$$\begin{aligned} \psi_A(0) &= \psi_B(0), \\ \frac{d}{dz} \psi_A(z)|_{z=0} &= \frac{d}{dz} \psi_B(z)|_{z=0}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde ψ_A (ψ_B) se refiere a la función de onda en el material A (B). Sin embargo, la simple condición (2.19) no es correcta para una heterounión con dos distintas masas efectivas. La forma correcta de escribir las condiciones de continuidad es

$$\begin{aligned} \psi_A(0) &= \psi_B(0), \\ \frac{1}{m_A} \frac{d}{dz} \psi_A(z)|_{z=0} &= \frac{1}{m_B} \frac{d}{dz} \psi_B(z)|_{z=0}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

Note que la condición de igualdad entre las derivadas ahora incluye a las masas efectivas. Ya que la derivada esencialmente es el operador de momento, la ecuación (2.20) requiere que las velocidades sean las mismas en ambos lados para conservar la corriente. La función envolvente obtiene un discontinuidad de la derivada en la interfaz si $m_A \neq m_B$.

Un argumento más matemático es decir que la errónea condición de continuidad (2.19) implícitamente asume que la ecuación de Schrödinger tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*(z)}\frac{d^2}{dz^2}\psi(z) + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z). \quad (2.21)$$

donde $m^*(z)$ depende del material en que se encuentra, para la mayoría de las heteroestructuras, una función escalón. Esta ecuación no es hermitiana (o de la forma de Sturm-Liouville) si $m^*(z)$ varía, y muchas de las propiedades de la función de onda desaparecen como consecuencia de ello. La aparentemente trivialidad de reescribir la ecuación en la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{d}{dz}\left[\frac{1}{m_r(z)}\frac{d}{dz}\psi(z)\right] + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z) \quad (2.22)$$

restaura la naturaleza hermitiana. Esto puede ser justificada rigurosamente por la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ para multibandas. Existe una teoría exacta de Burt, la cual preserva el orden correcto de los operadores y resuelve el problema llegando a una forma hermitiana de la ecuación de Schrödinger [37] y para estructuras tipo wurtzita fue formulado posteriormente por Mireles y Ulloa [38]. Note que ambas versiones se reducen a la misma ecuación de Schrödinger para una heteroestructura, pero la segunda forma asegura que las funciones de onda sean ortogonales, los eigenvalores sean reales y se conserve la corriente, así como otras condiciones que son importantes. El precio es una distinta condición de continuidad (ecuación 2.20).

La aparente discontinuidad en la función envolvente en la heterointerfaz podría poner en duda la validez, porque las funciones de onda 'reales' deben ser suaves. Afortunadamente, la aproximación de la masa efectiva continúa siendo válida si la función envolvente varía suavemente en escala atómica. La figura 2.3 muestra un ejemplo de forma esquemática de la función de onda completa (incluyendo la función de Bloch) para un pozo cuántico de GaAs de 6 nm de ancho. Esta función es suave, pero la función envolvente es construida burdamente uniendo los máximos, la cual tiene

una abrupto cambio de pendiente en la heterointerfaz. Por lo que el cambio abrupto en la pendiente de la función envolvente impuesta por la condición de continuidad (ecuación 2.20) correctamente refleja un cambio a escala atómica en la función de onda completa [5].

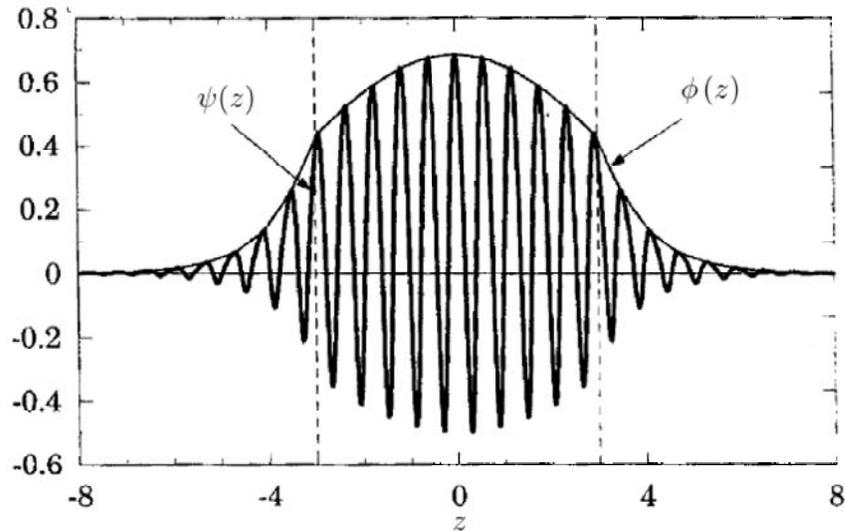


Figura 2.3: En esta figura se muestra la función de onda completa $\phi(z)$, incluyendo las funciones de Bloch $\psi(z)$, las cuales varían rápidamente en posición. La función envolvente construida uniendo los máximos de las funciones de Bloch. Se puede observar un cambio ligeramente abrupto en la interfaz entre los materiales, cómo se puede esperar dada la condición de continuidad (ecuación 2.20) [5].

Cabe señalar que en el modelo que se desarrolla en esta tesis utilizaremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo como se muestra en la ecuación 2.22, ya que al introducir una masa variable, sigue siendo hermitiana. Más adelante en el capítulo 5 procederemos a discretizarla, lo que nos llevará a una matriz hermitiana ya que es simétrica y real. A continuación haremos una revisión de las heteroestructuras con dopaje modulado y como es modificada la banda de conducción al generarse un campo eléctrico interno, ya que para poder obtener un perfil de la banda de conducción más apegado a la que se encuentra en la nanoestructura se deben de resolver de manera autoconsistente la ecuación de Schrödinger y la de Poisson como

describiremos en detalle más adelante.

3. Nanoestructuras con dopaje modulado

El gas de electrones bidimensional (GE2D) atrapado en una heterounión semiconductor con dopaje modulado es uno de los sistemas de bajas dimensiones más importante para el transporte electrónico. Forma el núcleo del transistor de efecto de campo, que es llamado por muchos acrónimos incluyendo transistor de efecto de campo con dopaje modulado (MODFET, por sus siglas en inglés) y transistor con movilidad alta de electrones (HEMT, por sus siglas en inglés). En estos transistores el confinamiento de los electrones es en una una dimensión, quedando así estos libres de moverse en un cuasi-plano bidimensional perpendicular a el plano de crecimiento de las capas semiconductoras, de ahí su nombre. Como su nombre lo señala, en el HEMT se requiere que los electrones tengan alta movilidad, lo que se puede traducir a un camino libre medio alto ($\lambda_s \approx 1 - 5 \mu m$).

La forma más obvia de introducir portadores de carga para producir un GE2D en una heteroestructura semiconductor es dopando la región donde se desea tener electrones o huecos. Desafortunadamente, las impurezas son ionizadas, formando un potencial hidrogenoide, como ya vimos en el pasado capítulo, lo cuales causa dispersiones de los portadores de carga debido a la interacción coulombiana (dispersión por impureza ionizada). Esto evidentemente afecta la propagación electrónica dentro de la estructura cuidadosamente crecida, ya que los niveles de energía son modificados y se alteran las interfaces entre las funciones de onda de los electrones que se ocupan para producir efectos cuánticos como el tunelaje resonante. Este problema puede ser resuelto utilizando *dopaje modulado* o *remoto*, donde el dopaje es crecido en una región pero los portadores de carga migran a otra. Esto se encuentra ilustrado para el caso de una heterojunción entre AlGaAs con dopaje modulado tipo n y GaAs sin

dopaje en la Figura 3.1.

El material es neutro en todo el espacio y las bandas son lisas si los electrones se mantienen con sus donadores en el AlGaAs (Figura 3.1(a)). Los electrones comienzan a viajar después de haber sido liberados y algunos migran hacia el GaAs. Ahí pierden energía y son atrapados al no pueden subir a la barrera presente por ΔE_C . Esta migración separa a los electrones negativamente cargados de sus donadores con carga positiva, lo que da lugar a un potencial electrostático $\phi(z)$ que tiende a permitir el regreso de los electrones al AlGaAs (figura 3.1(a)).

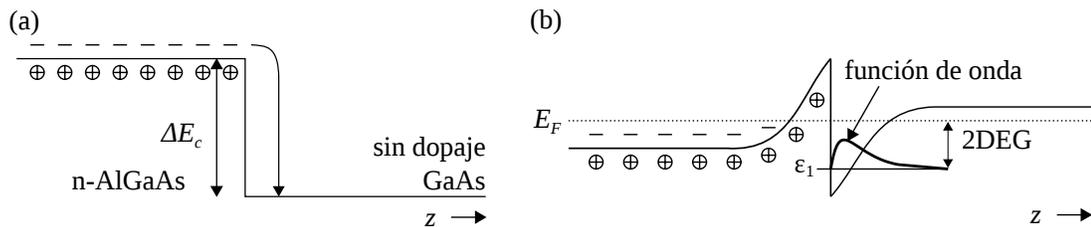


Figura 3.1: (a) En esta figura se muestra de una manera esquemática como los electrones de los donadores migran de la capa de AlGaAs con dopaje tipo n a la heterointerfaz. (b) Esto crea un pozo de potencial en el cual quedan atrapados los electrones dejando atrás a los átomos de los donadores ionizados, lo que y crean un campo electrostático interno que a su vez modifica el perfil de la banda de conducción [5]

La energía total para los electrones es la suma la energía cinética y potencial. Claramente la energía cinética de los electrones viene dada por la estructura de bandas, en particular, esta no varía con la posición dentro de cada material pero cambia en la heterojunción. El efecto principal viene dado por la discontinuidad ΔE_C . La energía potencial es originada por el potencial electrostático $-e\phi(z)$; para los electrones, esto debe ser añadido a la energía cinética para dar la energía total para el mínimo de la banda de conducción $E_c(z)$, como se muestra el la Figura 3.1(b). Los argumentos son exactamente los mismos que para el diagrama de bandas de una heterojunción ordinaria tipo $p-n$, excepto para el elemento crucial de ΔE_C . Esta discontinuidad tiene mayor efecto por que previene al campo eléctrico de regresar a los electrones

a sus donadores; el campo solo puede concentrar a los electrones contra la interfaz, donde son atrapados en un pozo de potencial casi triangular. Este pozo es típicamente unos 10 nm de ancho a la energía de Fermi de los electrones. Los niveles de energía en dirección de z son cuantizadas en una forma similar a las de un pozo cuadrado.

Usualmente solo los niveles más bajos están ocupados. Todos los electrones ocupan el mismo estado en z , pero se mantienen libres en las dimensiones a lo largo de x y y . Con esto se forma el *gas de electrones bidimensional* (GE2D).

Con el dopaje modulado se obtienen dos beneficios, *(i)* se separan a los electrones de sus donadores para reducir la dispersión debido a las impurezas ionizadas, y *(ii)* producir el confinamiento de los electrones en dos dimensiones. Un refinamiento puede ser logrado al dejar una capa de AlGaAs sin dopaje entre la de n-AlGaAs y la de GaAs. Esto incrementa la separación entre electrones y donadores, lo que reduce aún más la dispersión, con el costo de bajar la densidad de electrones en el GE2D. Una movilidad alta es vital para muchos experimentos físicos pero la densidad electrónica no es importante típicamente, así que comúnmente se utiliza una separación grande entre la región con dopaje modulado y la heterounión donde se desea obtener el GE2D.

En la figura 3.2 se puede observar con más detalle una heterounión como la mostrada en la figura 3.1(b), en esta imagen se puede observar que el pozo cuántico creado en la heterounión no es del todo triangular, esto es debido que un campo eléctrico interno es generado al ionizarse las impurezas introducidas mediante dopaje modulado junto con la contribución de los estados localizados dentro de este pozo cuántico.

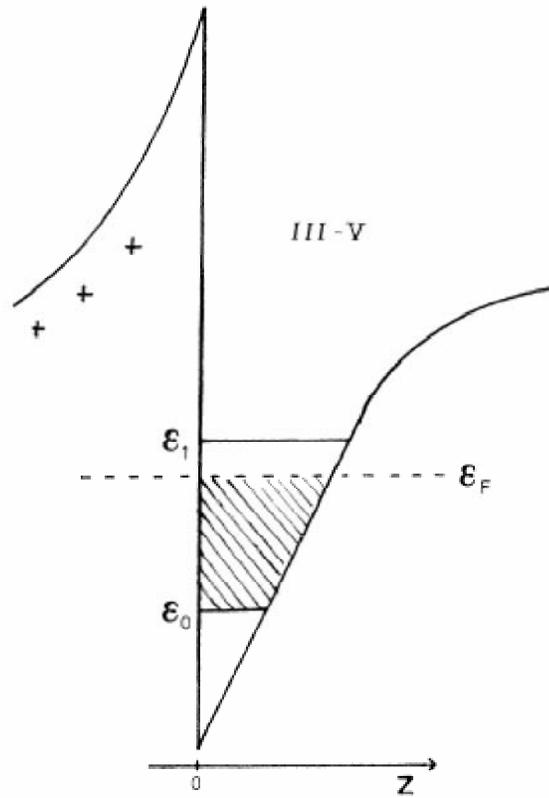


Figura 3.2: Ilustración de una heterounión entre dos semiconductores con dopaje modulado (InAs/GaSb), en el cual se indican los dos estados ligados más bajos, al igual que el nivel de Fermi ϵ_F [6].

4. Acoplamiento espín-órbita en semiconductores

Al aplicar la relatividad especial a las ecuaciones de Maxwell, se predice que el movimiento de un electrón en presencia de un campo eléctrico produce un campo magnético efectivo en el sistema de referencia del electrón (Jackson 3ed. [39]). El acoplamiento del espín del electrón con tal campo magnético efectivo se le denomina interacción espín-órbita (IEO) [2] y esta se encuentra gobernado por la siguiente hamiltoniano ¹,

$$\hat{\mathbf{H}}_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \mathbf{p} \cdot (\hat{\sigma} \times \nabla V) = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \hat{\sigma} \cdot \nabla V \times \mathbf{p} = -\mu_B \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{eff}(\mathbf{p}), \quad (4.1)$$

donde m_0 es la masa del electrón libre, c es la velocidad de la luz, $\hat{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es un vector cuyas componentes son las matrices Pauli, y V es el potencial eléctrico; del lado derecho de la Eq. (4.3), \mathbf{p} representa el momento canónico y $\mathbf{B}_{eff}(\mathbf{p})$ es el campo magnético efectivo. En presencia de un campo magnético externo $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, \mathbf{p} debería ser reemplazado por su momento cinético $\mathbf{P} = \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A}$. En el caso de átomos, por ejemplo, la IEO se refiere a la interacción del espín del electrón con el potencial coulombiano de los núcleos atómicos y los demás electrones del átomo.

Similarmente, en sólidos la IEO es determinado por la interacción del espín del electrón, pero con el campo eléctrico promedio que corresponde al potencial cristalino periódico. Cabe señalar que otros campos eléctricos internos o externos pueden

¹Este hamiltoniano se puede derivar formalmente de la ecuación de Dirac considerando velocidades cuasi-relativistas y expandiéndolo hasta orden v^2/c^2 .

también producir términos adicionales de IEO.

La ecuación 4.3 puede también ser reescrita de la siguiente manera,

$$\hat{\mathbf{H}}_{SO} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \nabla V \cdot (\hat{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}), \quad (4.2)$$

En sólidos cristalinos el coeficiente α_R se ve renormalizado lo que conduce a dos tipos de acoplamiento espín-órbita, Rashba y Dresselhaus. El primero aparece en sistemas con asimetría de inversión espacial (AIE) y el segundo con asimetría de inversión de bulto (AIB). Para el caso de un pozo cuántico con $\nabla V \neq 0$ se tiene un campo eléctrico efectivo en la interface α_R , por lo que llegamos a la siguiente expresión

$$\hat{\mathbf{H}}_{SO} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\hat{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}), \quad (4.3)$$

la cual es conocida como el hamiltoniano de Rashba [9].

Para un gas de electrones bidimensional el hamiltoniano viene dado por la siguiente expresión

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}_{GE2D} &= \hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}_{SO} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) & \alpha_R (ik_x + k_y) \\ \alpha_R (-ik_x + k_y) & \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (4.4)$$

Resolviendo la ecuación de Schrödinger con el hamiltoniano para un gas de electrones bidimensional, en el esquema de electrón libre 4.4, esto es,

$$\hat{\mathbf{H}}_{GE2D} |\psi\rangle = \varepsilon |\psi\rangle, \quad (4.5)$$

con soluciones del tipo $|\psi\rangle = e^{i(k_x x + k_y y)}$, se obtiene una dispersión de energía dada por,

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha_R k, \quad (4.6)$$

donde $k = |\mathbf{k}|$.

Note que la degeneración en k se rompe cuando el parámetro de Rashba $\alpha_R \neq 0$, con una separación $2\alpha_R k$, lo cual es mostrada de forma esquemática en la figura 4.1

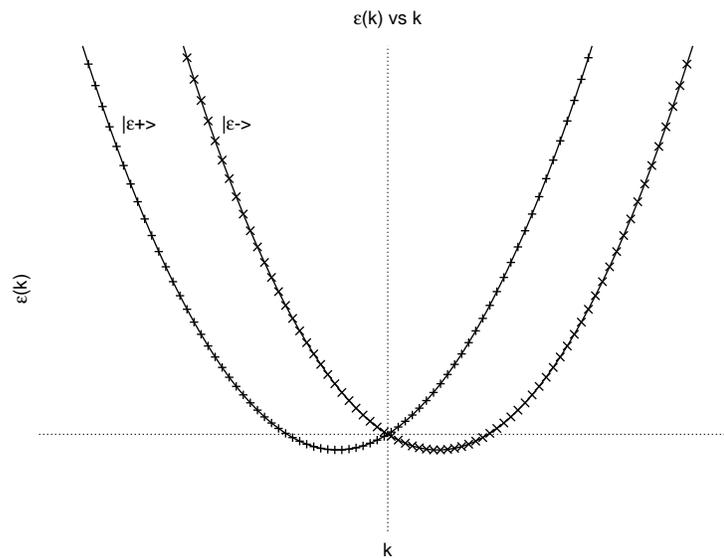


Figura 4.1: Aquí se muestra de forma esquemática el rompimiento de la degeneración en momento debido a la existencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba.

4.1. Semiconductores con asimetría de inversión espacial

Semiconductores elementales como el Silicio cuentan con simetría de inversión espacial. Para dichos semiconductores los estados se encuentran doblemente degenerados en el momento (*i. e.* $\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} = \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow}$). La simetría de inversión temporal requiere que $\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} = \varepsilon_{-\mathbf{k}\downarrow}$, ya que al realizar una inversión temporal ² $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ y $\sigma = \uparrow$ cambia a

²Realizar una inversión espacial significa tomar $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$, dejando el espín fijo.

$\sigma = \downarrow$ (degeneración de Kramers). Sin embargo, al romperse la simetría de inversión espacial (i. e. $\varepsilon_{\mathbf{k}} \neq \varepsilon_{-\mathbf{k}}$) surge la IEO tipo Rashba. La simetría de inversión espacial puede romperse por una variación espacial en el potencial, al cual se encuentran sujetos los electrones ($\nabla V \neq 0$), esto se puede lograr simplemente aplicando un campo eléctrico externo ϕ , dejando al potencial como $V(\mathbf{r}) = V_0(\mathbf{r}) - e\phi(\mathbf{r})$. Esto también puede ser logrado cuando se generan campos internos en un heteroestructura debido a el reacomodo de cargas cuando se cuenta con dopaje modulado como ya vimos en el capítulo 3.

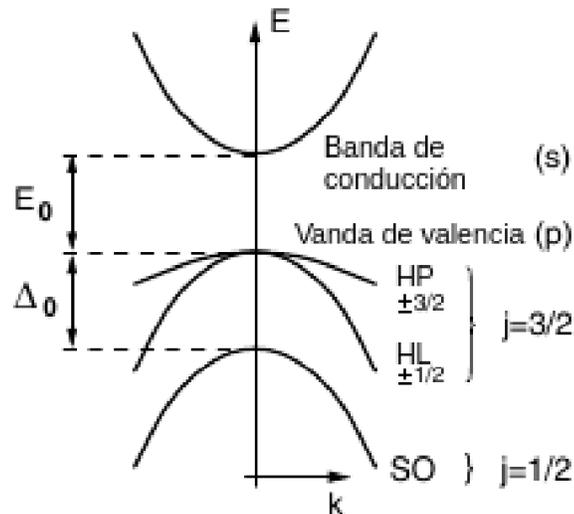


Figura 4.2: Esquema del diagrama de dispersión de bandas en el punto Γ de simetría típica de semiconductores III-V.

El hamiltoniano de espín-órbita tipo Rashba (ecuación 4.3) puede ser derivado formalmente de la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ utilizando el modelo de Kane de 8-bandas [40], como es descrito por de Andrada e Silva *et. al.* [41] y por la teoría de invariantes, como fue propuesta originalmente por E. I. Rashba y V. I. Sheka [42]. Estos extienden el esquema propuesto como fue por Marques y Sham [43] para poder incluir la bandas del split-off, ya que éstas resultan sumamente importantes para la IEO en la banda de conducción, como veremos más adelante. En el modelo de Kane [40] los eigenestados

base en el bulto en la banda de conducción cerca del punto Γ así como las tres bandas de valencia tienen simetría S , X , Y y Z , y están dadas por,

$$\begin{aligned}
u_1 &= |S \uparrow\rangle, \\
u_2 &= \left| \sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow + \sqrt{\frac{1}{6}} (iX \uparrow + Y \downarrow) \right\rangle, \\
u_3 &= -\sqrt{\frac{1}{2}} |-iX \uparrow + Y \downarrow\rangle, \\
u_4 &= -\sqrt{\frac{1}{3}} |Y \downarrow (Z - iX) \uparrow\rangle, \\
u_5 &= S \downarrow, \\
u_6 &= \sqrt{\frac{2}{3}} |Z \downarrow + \sqrt{\frac{1}{6}} (iX \downarrow + Y \uparrow)\rangle, \\
u_7 &= -\sqrt{\frac{1}{2}} |-iX \downarrow + Y \uparrow\rangle, \\
u_8 &= -\sqrt{\frac{1}{3}} |Y \uparrow (Z - iX) \downarrow\rangle,
\end{aligned} \tag{4.7}$$

donde \uparrow y \downarrow denotan el estado del espín a lo largo de la dirección del eje y , k_{\parallel} es el vector de onda, el cual es perpendicular a la dirección de crecimiento z . La función de onda envolvente viene dada entonces por,

$$|\psi(\mathbf{r})\rangle = e^{ik_x x + ik_y y} \sum_{j=1}^8 f_j(z) |u_j(\mathbf{r})\rangle, \tag{4.8}$$

con f_j como las funciones envolventes. En esta base (4.7) el hamiltoniano de masa efectiva es diagonal a bloques,

$$\hat{\mathbf{H}} = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{H}}_+ & 0 \\ 0 & \hat{\mathbf{H}}_- \end{bmatrix} \tag{4.9}$$

con

$$\hat{\mathbf{H}}_{\pm} = \begin{bmatrix} V(z) & E_P \left[\frac{d}{dz} \mp \frac{k_{\pm}}{2} \right] & \mp \frac{\sqrt{3}}{2} E_P k_{\pm} & \frac{P}{\sqrt{2}} \left[\frac{d}{dz} \pm k_{\pm} \right] \\ E_P \left[\frac{d}{dz} \mp \frac{k_{\pm}}{2} \right] & V(z) - E_g & 0 & 0 \\ \mp \frac{\sqrt{3}}{2} E_P k_{\pm} & 0 & V(z) - E_g & 0 \\ \frac{E_P}{\sqrt{2}} \left[\frac{d}{dz} \pm k_{\pm} \right] & 0 & 0 & V(z) - E_g - \Delta \end{bmatrix}, \quad (4.10)$$

donde $k_{\pm} = k_x \mp ik_y$, $V(z)$ denota el potencial de confinamiento, m_0 como la masa del electrón, E_g es la brecha energética, Δ es la separación de energía de espín-órbita y $E_P = \sqrt{\frac{2}{3}} \frac{\hbar}{m_0} \langle iS | p_x | X \rangle$, con valores típicos en semiconductores $E_P \approx 25 eV$. Los términos de la partícula libre de segundo orden en k son despreciados en los elementos de la diagonal ya que típicamente la masa efectiva del electrón en semiconductores es muy pequeña (por ejemplo, para el GaAs es $0.0665m_0$), por lo que la dispersión viene dada esencialmente por los elementos fuera de la diagonal.

La ecuación de masa efectiva multibandas con el hamiltoniano 4.9 da lugar a dos grupos de cuatro ecuaciones acopladas para los dos grupos de funciones envolventes. Se llega a la siguiente ecuación tipo Schrödinger para la función envolvente para la banda de conducción al eliminar los demás componentes,

$$\left[\left(-\frac{\hbar}{2} \frac{d}{dz} \frac{1}{m(z, \varepsilon)} \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m(z, \varepsilon)} + V(z) - \varepsilon \right) \mathbf{I} + \alpha(z, \varepsilon) (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) \right] \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = 0, \quad (4.11)$$

con \mathbf{I} es la matriz identidad, ε es la energía del electrón de conducción, y σ_x y σ_y son las matrices de Pauli para x y y , respectivamente. Note que la masa efectiva de los electrones es explícitamente dependiente de la posición y de la energía,

$$\frac{1}{m(z, \varepsilon)} = \frac{E_P^2}{\hbar^2} \left[\frac{2}{\varepsilon - V(z) + E_g} + \frac{1}{\varepsilon - V(z) + E_g + \Delta} \right] \quad (4.12)$$

y equivalentemente, el parámetro de Rashba depende de la posición y energía, la cual se encuentra dada por la siguiente expresión,

$$\alpha(z, \varepsilon) = \frac{E_P^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\varepsilon - V(z) + E_g} - \frac{1}{\varepsilon - V(z) + E_g + \Delta} \right]. \quad (4.13)$$

El término lineal en k_x y k_y corresponde al acoplamiento espín-órbita de Rashba. El cual es cero (excepto en la interfaz) para el bulto ($V(z) = \text{constante}$), al igual que para pozos cuánticos simétricos. Note que no existe término de tercer orden en k , lo cual implica que sólo la asimetría del pozo de potencial contribuye a la energía de desdoblamiento de espín. El valor esperado de el parámetro de Rashba es simplemente,

$$\alpha_R(\varepsilon) = \frac{E_P^2}{2} \left\langle \psi(z) \left| \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{\varepsilon - V(z) + E_g} - \frac{1}{\varepsilon - V(z) + E_g + \Delta} \right] \right| \psi(z) \right\rangle \quad (4.14)$$

La expresión 4.14 nos es de utilidad para calcular el parámetro de acoplamiento de espín-órbita de Rashba α_R para un pozo de potencial cuántico genérico $V(z)$, lo cual es fundamental para el método desarrollado en este trabajo de tesis. Esta ecuación establece que una vez conocida la soluciones a un sistema cuántico, esto es, las funciones de onda $\psi(z)$ y energía características ε asociadas al perfil de confinamiento $V(z)$ dado por el gas de electrones bidimensional contenidos en la nanoestructura dada, entonces es posible determinar cual es la intensidad del parámetro de acoplamiento de espín-órbita de Rashba α_R . En el trabajo presente determinamos las funciones de onda $\psi_k(z)$ con sus energías asociadas ε_k , así como el perfil de confinamiento $V(z)$ al resolver la ecuación de Schrödinger de forma auto-consistente junto

con la ecuación de Poisson.

Es ilustrativo notar que se puede obtener una expresión analítica aproximada para la constante de acoplamiento de espín-órbita α_R que nos permite realizar estimaciones de su intensidad en distintos materiales. Para esto procederemos de la siguiente manera:

Como nuestro interés es en específico con la banda de conducción, y observamos que cuenta con energías ε mucho menores al resto de los parámetros energéticos que entran en el modelo, *i. e.* E_g y Δ , entonces es posible expandir $\alpha(z, \varepsilon)$ (ecuación 4.13) en potencias del parámetro adimensional

$$\delta = \frac{\varepsilon - V(z)}{E_g + \Delta}. \quad (4.15)$$

Si se expande hasta primer orden en δ obtenemos una ecuación simplificada que es sólo función de los parámetros constantes conocidos del material, y suponemos un campo eléctrico constante $\phi[V(z) = e\phi z]$ [6] llegamos a la expresión

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\Delta}{E_g} \frac{2E_g + \Delta}{(E_g + \Delta)(3E_g + 2\Delta)} e\phi(z) \quad (4.16)$$

Note que $\alpha \approx \frac{\Delta}{E_g}$ por lo que $E_g \ll \Delta$ implica un parámetro de acoplamiento espín-órbita de Rashba α_R grande, al igual que una masa efectiva pequeña $m^* \rightarrow 0$ implica una α_R grande. También se puede observar de la ecuación 4.14 y de la ecuación 4.16 que es necesario que el semiconductor cuente con una banda de espín split-off para que presente acoplamiento espín-órbita tipo Rashba.

En la tabla 4.2 se muestran, un recopilación de valores medidos de manera experimental del parámetro α_R de Rashba en distintas nanoestructuras, trabajo realizado por Fabian *et. al.* [2].

En la siguiente sección se desarrollara a detalle el método central para este trabajo.

Tabla 4.1: En esta tabla se presenta la estimación de la α_R para distintos materiales, utilizando la ecuación 4.16 y un campo electrostático externo $\phi(z) = 50 \text{ kV/cm}$.

Nombre	E_g [eV]	Δ_{SO} [eV]	m_r [m_0]	α_R [meVÅ]
GaAs	1.477	0.341	0.670	0.233
AlAs	3.072	0.280	0.150	0.227
InAs	0.371	0.390	0.026	60.413
AlP	3.605	0.070	0.220	0.030
InP	1.389	0.108	0.080	0.820
GaSb	0.766	0.760	0.039	19.077
AlSb	2.339	0.676	0.140	0.834
InSb	0.206	0.810	0.013	298.895

Tabla 4.2: Rango de valores del parámetro de acoplamiento de Rashba $\alpha_R = 2k_F\alpha_R$ medidas experimentalmente y el desdoblamiento de espín Δ_R en la energía de Fermi ε_F [2].

Sistema	Δ_R (meV)	α_R (meVÅ)	Referencia
AlSb/InAs/AlSb	3.2 – 4.5	60	Heida <i>et al.</i> (1998)
AlSb/InAs/AlSb	0	0	Brosig <i>et al.</i> (1999)
AlSb/InAs/AlSb	0	0	Sasa <i>et al.</i> (1999)
AlGaAs/GaAs/AlGaAs	–	6.9 ± 0.4	Jusserand <i>et al.</i> (1995)
2DEG GaAs/AlGaAs	–	5 ± 1	Miller <i>et al.</i> (2003)
AlGaSb/InAs/AlSb	5.6 – 13	120 – 280	Sasa <i>et al.</i> (1999)
InAlAs/InGaAs/InAlAs	1.5	40	Das <i>et al.</i> (1989)
InAlAs/InGaAs/InAlAs	4.9 – 5.9	63 – 93	Nitta <i>et al.</i> (1997)
InAlAs/InGaAs/InAlAs	–	50 – 100	Hu <i>et al.</i> (1999)
InGaAs/InAs/InGaAs	5.1 – 6.8	60 – 110	Nitta <i>et al.</i> (1998)
InGaAs/InAs/InGaAs	9 – 15	200 – 400	Grundler, (2000)
InGaAs/InP/InGaAs	–	63 – 153	Engels <i>et al.</i> (1997)
GaSb/InAs/GaSb	3.7	90	Luo <i>et al.</i> (1988)
Si/SiGe QW	–	0.03 – 0.12	Malissa <i>et al.</i> (2004)
SiO ₂ /InAs	5.5 – 23	100 – 300	Matsuyama <i>et al.</i> (2000)

5. Método para la solución de la ecuación de Schrödinger y Poisson

El resolver la ecuación de Schrödinger en conjunto con la ecuación de Poisson nos permite determinar el perfil de la banda de conducción, los estados ligados y la energía de Fermi en una heteroestructura semiconductor. Considere una heteroestructura semiconductor con un perfil de potencial dependiente de la posición genérico $V(z)$, por ejemplo, supongamos un sistema como el mostrado en la figura 5.1 el cual consiste en un pozo de potencial finito de un material B rodeado de una material A, en el esquema de la *aproximación de masa efectiva*, la ecuación de Schrödinger en una dimensión (ecuación 2.22) puede ser reescribe de la siguiente manera,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{d}{dz} \right) \psi(z) + V(z)\psi(z) = \varepsilon\psi(z) \quad (5.1)$$

donde \hbar es la constante de Plank dividida por 2π , $m^*(z) = m_0m_r(z)$ es la masa efectiva, ε la energía, ψ la función de onda y $V(z)$ es el perfil de la banda de conducción. Esta última es modificado durante el cálculo autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y Poisson.

Si dicha heteroestructura se encuentra dopada con donadores y/o aceptores de carga, entonces se tienen que tomar en cuenta las interacción electrostática entre las cargas. Por tanto es necesario resolver también la ecuación de Poisson simultáneamente:

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_r(z) \frac{d}{dz} \right) \phi(z) = -\frac{e}{\epsilon_0} \rho(z) \quad (5.2)$$

donde $\epsilon_r(z)$ es la permitividad relativa, ϵ_0 es la permitividad del vacío, e es la carga del electrón, $\phi(z)$ es el campo electrostático total (externo e interno) y $\rho(z)$ es la densidad de carga en la nanoestructura, dada por

$$\rho(z) = N(z) - n(z) \quad (5.3)$$

donde $N(z)$ es la distribución de densidad del dopaje modulado tipo n y $n(z)$ la densidad electrónica en la heteroestructura, el signo es debido a la carga del electrón ($-e$). La ecuación de Schrödinger y la de Poisson se encuentran acopladas por la densidad electrónica dada por la siguiente expresión,

$$n(z) = \sum_{k=1}^{\lambda} \psi_k^*(z) \psi_k(z) n_k \quad (5.4)$$

donde λ es el número de estados ligados, n_k es la probabilidad de que el estado k se encuentre ocupado, dada por

$$n_k = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{\epsilon_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\frac{\epsilon - \epsilon_F}{kT}}} d\epsilon \quad (5.5)$$

es decir, n_k es la integral de la función de distribución de Fermi-Dirac sobre todas las energías ocupadas por la densidad de estados del gas de electrones bidimensional, por otro lado, el potencial electrostático se encuentra relacionado con el potencial de la ecuación de Schrödinger de la siguiente manera,

$$V(z) = \Delta E_C(z) - e\phi(z) \quad (5.6)$$

donde $\Delta E_C(z)$ es el desempate de las bandas de conducción de los distintos materiales que forman a la heteroestructura, como se muestra en la figura 5.1, note que el potencial $V(z)$ tiene una dependencia con el potencial electrostático $\phi(z)$, lo cual

implica que un cambio en $\phi(z)$ afecta a $V(z)$ lo que a su vez modifica las soluciones a la ecuación de Schrödinger, esto es, a las funciones de onda y a las energías propias del sistema. Por tanto las ecuaciones 5.1 y 5.2 deben satisfacer la misma solución, por ello dichas ecuaciones deben ser resueltas de una forma auto-consistente.

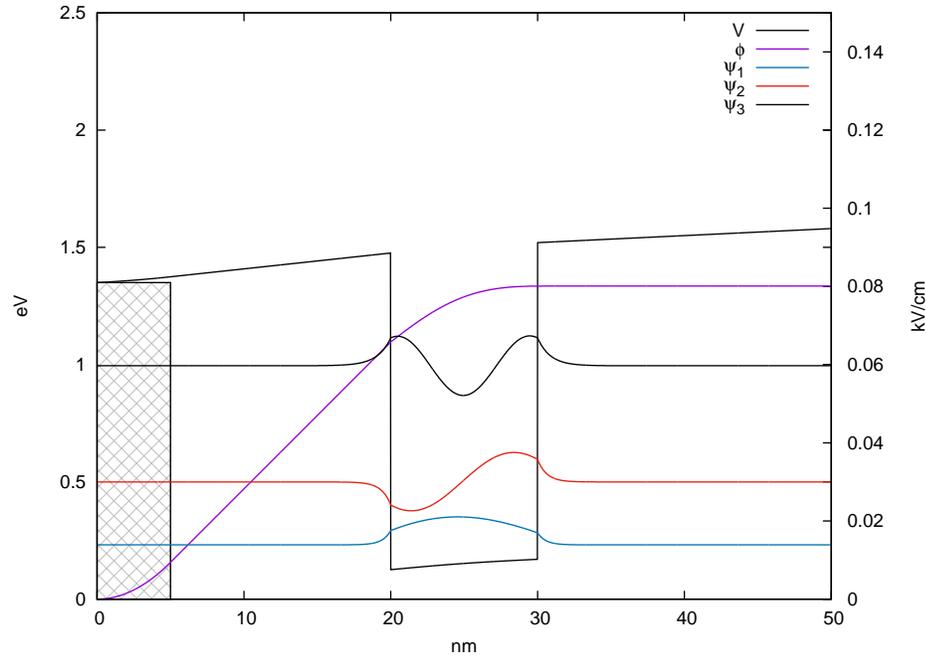


Figura 5.1: Figura esquemática de el sistema.

Este problema será resuelto mediante el método de diferencias finitas (Apéndice A), el cual consiste en discretizar el espacio obteniendo una malla y en ella hacer aproximaciones a las derivadas. En nuestro trabajo aplicaremos una malla no-uniforme, misma que nos dará ventajas sobre la malla uniforme, ya que ésta puede ser adaptada para obtener alta resolución en regiones de interés y una baja resolución en regiones donde la solución cambia lentamente, sin perder precisión y ahorrando tiempo de cómputo.

5.1. Ecuación de Schrödinger en el esquema de diferencias finitas

Primeramente discretizaremos la ecuación de Schrödinger (ecuación 5.1) en el esquema de diferencias finitas en una malla no uniforme [44], siguiendo el procedimiento descrito en el Apéndice A llegamos a la siguiente ecuación,

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2(\psi_{i+1} - \psi_i)}{m_{i+\frac{1}{2}}^* h_i (h_i + h_{i-1})} - \frac{2(\psi_i - \psi_{i-1})}{m_{i-\frac{1}{2}}^* h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \right) + V_i \psi_i = \varepsilon \psi_i \quad (5.7)$$

donde ε es la energía, V_i y ψ_i representan al potencial y la función de onda evaluados en la posición z_i , respectivamente, h_i es la distancia entre los puntos z_{i+1} y z_i , y $m_{i\pm\frac{1}{2}}^*$ representa la masa efectiva tomada en el punto medio de z_i y $z_{i\pm 1}$. Esta ecuación se puede representar en una forma matricial como,

$$\sum_{j=1}^n A_{i,j} \psi_j = \varepsilon \psi_i \quad (5.8)$$

con

$$A_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i+\frac{1}{2}}^* h_i (h_i + h_{i-1})} \right), & j = i + 1 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i-\frac{1}{2}}^* h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \right), & j = i - 1 \\ -A_{i,i+1} - A_{i,i-1} + V_i, & j = i \\ 0, \text{ otros casos} \end{cases} \quad (5.9)$$

Note que la matriz A no es simétrica, por lo que su solución sería más trabajo que si fuese simétrica. sin embargo, si definimos a $L_i^2 = \frac{1}{2}(h_i + h_{i-1})$, podemos escribir,

$$A_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i+\frac{1}{2}}} \frac{1}{h_i} \right) \frac{1}{L_i^2}, & j = i + 1 \\ -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{2}{m_{i-\frac{1}{2}}} \frac{1}{h_{i-1}} \right) \frac{1}{L_i^2}, & j = i - 1 \\ -A_{i,i+1} - A_{i,i-1} + V_i, & j = i \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases} \quad (5.10)$$

y definiendo $B_{i,j} = L_i^2 A_{i,j}$ entonces podemos escribir,

$$B = MA \quad (5.11)$$

donde M es una matriz con L_i^2 en su diagonal. Claramente que B es simétrica, *i.e.*, $B_{i,i+1} = B_{i+1,i}$, por lo que, entonces tenemos,

$$B\psi = MA\psi = \varepsilon M\psi, \quad (5.12)$$

si ahora reescribimos $M = LL$, donde L es diagonal (cuyos elementos son L_i), al multiplicar por la derecha por L^{-1} obtenemos,

$$L^{-1}BL^{-1}L\psi = L^{-1}LLA\psi = \varepsilon L^{-1}LL\psi = \varepsilon L\psi \quad (5.13)$$

lo que conduce a la siguiente ecuación central de eigenvalores y eigenvectores

$$H\Psi = \varepsilon\Psi \quad (5.14)$$

donde $H = L^{-1}BL^{-1}$ y $\Psi = L\psi$.

Con esta transformación obtenemos una matriz tridiagonal simétrica, la cual se puede ser resuelta de manera numérica de una forma más efectiva que una asimétrica. Después de resolver la ecuación de Schrödinger obteniendo los estados ligados (ψ_k) y

sus energías asociadas (ε_k).

En un pozo cuántico, a los electrones en cada subbanda se le considera como un cuasi-GE2D. Al considerar sólo a los estados ligados, los cuales desvanecen en las fronteras el cuasi-nivel de Fermi puede ser considerado como independiente de la posición. En cada subbanda, los electrones ocupan las regiones del pozo y de la barrera, y la distribución entre ambas regiones depende en la distribución de probabilidad de la función de onda en cada región. para la k -ésima subbanda, la densidad electrónica superficial n_k (Ecuación 5.5). La densidad electrónica superficial total puede ser expresada como N_s , la suma de n_k en cada subbanda. Para calcular la energía de Fermi ε_F , es necesario resolver la siguiente igualdad,

$$N_s = \sum_k^m n_k \quad (5.15)$$

Una vez obtenidas las soluciones a la ecuación de onda de Schrödinger del sistema, como lo son las funciones de onda $\psi_k(z)$ con sus energías asociadas ε_k a los estados ligados en la nanoestructura, al igual que la energía de Fermi ε_F , podemos proceder a calcular la densidad electrónica mediante la ecuación 5.4. Una vez obtenida $n(z)$, esta se utiliza en la ecuación de Poisson (ecuación 5.2) multiplicada por la carga del electrón e , como una densidad de carga negativa. Una vez resuelta numéricamente la ecuación de Poisson obtengamos el campo electrostático interno $\phi(z)$, lo que analizaremos en la siguiente sección.

5.2. Ecuación de Poisson en el esquema de diferencias finitas

Para resolver numéricamente la ecuación de Poisson (5.2) utilizaremos el método de Newton, tal como está descrito en el artículo publicado por Snider *et. al.* [45]. Este consiste en hacer correcciones a una primera aproximación al potencial electrostático $\phi(z)$, esto es, si la solución exacta está dada por $\phi^{(0)}(z)$ y la función prueba por $\phi(z)$. El problema es encontrar la corrección $\delta\phi(z)$, tal que, la función prueba más la corrección sean iguales a la exacta, esto es,

$$\phi^{(0)}(z) = \phi(z) + \delta\phi(z) \quad (5.16)$$

si sustituimos $\phi^{(0)}(z)$ en la ecuación de Poisson (5.2) tenemos que:

$$\frac{d}{dz} \left(\epsilon_r \frac{d\phi}{dz} \right) = -\frac{e}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi + \delta\phi]) - \frac{d}{dz} \left(\epsilon_r \frac{d\delta\phi}{dz} \right), \quad (5.17)$$

si ahora definimos $n[\phi + \delta\phi] = n[\phi] + \delta n[\phi]$, podemos reescribir la ecuación 5.17 como

$$-\left[\frac{d}{dz} \left(\epsilon_r \frac{d\phi}{dz} \right) + \frac{e}{\epsilon_0} (N_D - n[\phi]) \right] = \frac{d}{dz} \left(\epsilon_r \frac{d\delta\phi}{dz} \right) - \frac{e}{\epsilon_0} (\delta n[\phi]) \quad (5.18)$$

supondremos que $\delta\phi(z)$ es muy pequeña, de tal suerte que podemos expresar $\delta n[\phi]$ como

$$\delta n[\phi] = \sum_{k=1}^m [\delta(\psi_k^* \psi_k) n_k + \psi_k^* \psi_k \delta n_k] \quad (5.19)$$

explícitamente tenemos que

$$\delta(\psi_k^* \psi_k) = \psi_k^*[\phi + \delta\phi] \psi_k[\phi + \delta\phi] - \psi_k^*[\phi] \psi_k[\phi] \quad (5.20)$$

y

$$\delta n_k = n_k(\phi + \delta\phi) - n_k(\phi). \quad (5.21)$$

De la experiencia numérica se sabe que el primer término de la ecuación (5.19) es mucho menor que el segundo, por lo que podemos escribir

$$\delta n_k[\phi] \approx \sum_{k=1}^m \psi_k^* \psi_k \delta n_k. \quad (5.22)$$

asimismo podemos escribir a δn_k , como

$$\delta n_k = \frac{\delta n_k}{\delta \varepsilon} \delta \varepsilon, \quad (5.23)$$

de manera que cuando $\delta \varepsilon$ tiende a cero, el término $\frac{\delta n_k}{\delta \varepsilon}$ tiende a una derivada, esto es,

$$\delta n_k \approx \frac{\partial n_k}{\partial \varepsilon} \delta \varepsilon = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \left(\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{\varepsilon_k}^{\infty} \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{kT}}} d\varepsilon \right) \delta \varepsilon. \quad (5.24)$$

Con estas aproximaciones finalmente sustituyendo en la ecuación 5.18 obtenemos,

$$-e_i = C_{i,i+1} \delta \phi_{i+1} + \left(C_{i,i} + \frac{e}{\epsilon_0} \sum_{k=1}^m \psi_{k,i}^* \psi_{k,i} \frac{em^*}{\pi \hbar^2 (1 + e^{(\varepsilon - \varepsilon_F)/kT})} \right) \delta \phi_i + C_{i,i-1} \delta \phi_{i-1} \quad (5.25)$$

donde se ha definido

$$e_i = \sum_{j=1}^n C_{i,j} \phi_j + \frac{e}{\epsilon_0} (N_D i - n_i) \quad (5.26)$$

con

$$C_{i,j} = \begin{cases} \frac{2\epsilon_{i+\frac{1}{2}}}{h_i(h_i+h_{i-1})}, & j = i+1 \\ \frac{2\epsilon_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}(h_i+h_{i-1})}, & j = i-1 \\ -C_{i,i+1} - C_{i,i-1}, & i = j \\ 0, & \text{otros casos} \end{cases} \quad (5.27)$$

por lo que para resolver la ecuación de Poisson (5.2) tenemos que resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$C\delta\phi = \xi \quad (5.28)$$

donde C es una matriz tridiagonal asociada a la ecuación de Poisson 5.2 y ξ es el vector con elementos e_i . La que podemos resolver con un método numérico, como una descomposición LU, por ejemplo.

Recapitulando, para resolver la ecuación de Poisson numéricamente comenzamos por evaluar ξ con la ecuación 5.26, después resolvemos el sistema de ecuaciones lineales conformado por las ecuaciones 5.27 y 5.26 para $\delta\phi_i$. Note que en caso de desconocer el campo electrostático (ϕ_i), lo cual sucede en la primera iteración del método, las ecuaciones 5.26 y 5.27, son reducidas a la ecuación 5.2 en el esquema de diferencias finitas.

Con este procedimiento se obtiene el potencial electrostático interno creado por el dopaje modulado y los estados ligados. Este potencial electrostático de nuevo entra a la ecuación de Schrödinger (ecuación 5.7) como parte del potencial V_i como indica

la ecuación 5.6, por lo que se vuelve a resolver el problema hasta que la solución converja o deje de variar considerablemente (en nuestro caso $|\delta\phi| < 10 \times 10^{15} \text{ kV/cm}$), así obteniendo finalmente la solución autoconsistente de la ecuación de Schrödinger y Poisson.

El método desarrollado se basa en una hibridación entre el método publicado por Snider *et. al.* [45] con el publicado por Roan *et. al.* [7], ampliando éstos con el cálculo del parámetro de Rashba con el desarrollo realizados por de Andrada e Silva *et. al.* [6]. El método consiste en forma resumida en los siguientes pasos, también descrito de forma gráfica en el Diagrama 6.1.

1. Resolver la ecuación de Schrödinger utilizando de la aproximación de masa efectiva para contar con un hamiltoniano que sigue cumpliendo las propiedades de hermiticidad bajo el esquema de diferencias finitas utilizando una malla variable con $V(z) = \Delta E_C(z)$.
2. Una vez resuelta la ecuación de Schrödinger contamos con las energía ε_k y funciones propias del sistema $\psi_k(z)$.
3. Procedemos a calcular la energía de Fermi ε_F mediante el método de punto de carga nulo, el cual consiste en encontrar la ε_F necesaria para que las cargas de los estados ligados queden equilibradas con las impurezas introducidos en la heteroestructura como dopaje modulado.
4. Ya calculada ε_F , procedemos a calcular la densidad electrónica $n(z)$ debido a los estados ligados en el pozo de potencial cuántico.
5. Resolvemos la ecuación de Poisson con la densidad de carga aportada por el dopaje modulado $N_D(z)$ y la densidad electrónica $n(z)$, para obtener el potencial

electrostático interno $\phi_{int}(z)$ formado por la suma de todas correcciones $\delta\phi$ a el potencial electrostático inicial $N_D(z)$.

6. Con $\phi_{int}(z)$ volvemos a resolver la ecuación de Schrödinger (paso 1) ya que $\phi_{int}(z)$ entra al potencial de confinamiento como $e\phi_{int}(z)$, donde e es la carga del electrón.
7. Se repite este procedimiento hasta que $\phi(z)$ converja dentro de una tolerancia (10^{-15} en los casos presentados en esta tesis).
8. Una vez contando con las funciones de onda de los estados ligados $\psi_k(z)$ y el potencial electrostático interno $\phi_{int}(z)$, podemos calcular el parámetro de Rashba α_R utilizando la formula 4.14.

Esta metodología fue implementada en Fortran 90/95, en la parte de solución de las ecuaciones de eigenvalores (ecuación de Schrödinger 5.7) y sistema de ecuaciones lineales (ecuación de Poisson 5.27 y 5.26) se utilizaron las subrutinas de la librería MKL de intel; para la ecuación numérica de eigenvalores se utilizó la implementación del método de Múltiples Representaciones Relativamente Robustas (DSTEVR) y para la solución de el sistema de ecuaciones lineales se utilizó la descomposición LU (DGTTRF) junto con el método de sustitución progresiva y regresiva (DGTTRS).

En el siguiente capítulo realizaremos el análisis de distintos casos conocidos de la literatura para verificar la veracidad de el método desarrollado en esta tesis.

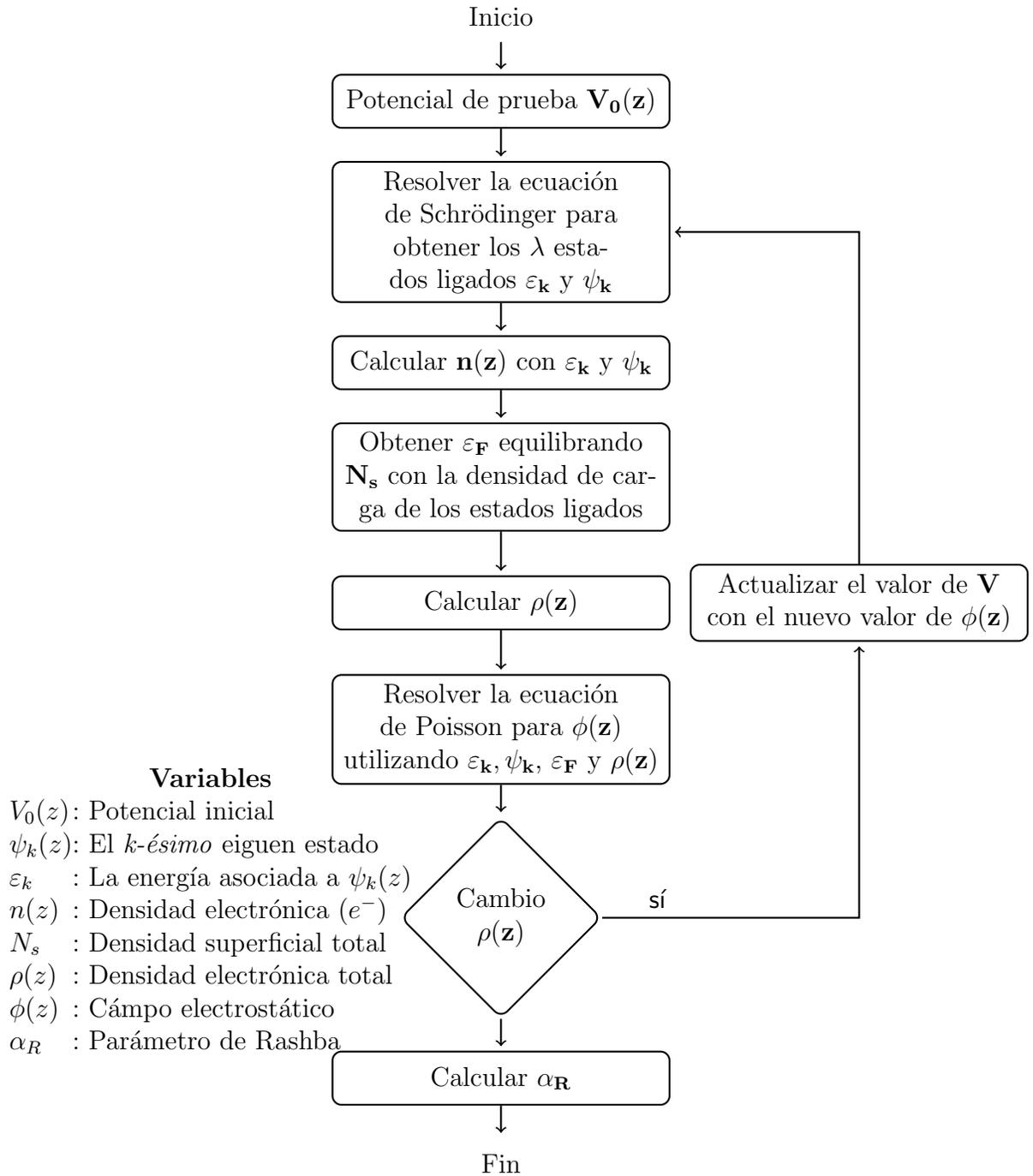


Diagrama 6.1: Se muestra el diagrama de flujo del método implementado para obtener el parámetro de acoplamiento de Rashba α_R .

6. Estudio numérico de nanoestructuras con solución analítica conocida.

Este capítulo es dedicada a la revisión de la veracidad y precisión del método desarrollado en esta tesis con algunos casos bien conocidos de la literatura, como lo son: El pozo cuadrado finito, el pozo triangular y el pozo finito (con dopaje modulado con y sin campo eléctrico externo).

6.1. Solución numérica para pozo finito y pozo triangular

En esta sección se estudian dos sistemas clásicos: (i) El pozo de potencial finito embebido en una nanoestructura, y (ii) el pozo cuántico triangular, cabe señalar que con frecuencia este último es utilizado como aproximación a los pozos de potencial formados en las heterouniones con dopaje modulado. El propósito de esta sección es realizar un cálculo comparativo entre nuestro método numérico y estos casos con soluciones analíticas conocidas.

6.1.1. Pozo cuántico finito

En esta sección analizaremos el problema de un pozo de potencial finito, el cual consta de una capa de Arsenuro de Galio (GaAs) de 10 nm de ancho situado entre dos barreras de Arsenuro de Galio con una concentración de Aluminio de $x = 0.3$ ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) de 15 nm ¹. En este caso la discontinuidad de la banda de conducción

¹Nos interesa calcular los estados ligados y eigenfunciones asociadas para tal heteroestructura, ya que el sistema de interés para el estudio del comportamiento de la α_R de Rashba es también un

ΔE_c y la masa efectiva del electrón m^* como función de la concentración x están dadas por,

$$\begin{aligned} m^* &= (0.0665 + 0.0835x)m_0 \\ \Delta E_c(x) &= 0.67\Delta E_g(x) \end{aligned} \tag{6.1}$$

donde m_0 es la masa del electrón libre y ΔE_g la discontinuidad de la brecha energética entre los semiconductores GaAs y AlAs, dada como,

$$\Delta E_g(x) = 1.247x \quad (eV) \tag{6.2}$$

Los parámetros utilizados para resolver la ecuación de Schrödinger 5.1 se presentan en la tabla 6.1 [3],

Tabla 6.1: Parametros utilizados por Chuang para resolver el pozo finito.

	Capa	$m^*(m_0)$	$E_g(eV)$	Ancho (nm)
Barrera	Al _{0.3} Ga _{0.7} As	0.0916	1.798	15
Pozo	GaAs	0.0665	1.424	10

La solución analítica consta en dividir el espacio en tres regiones en las que el potencial se mantiene constante. Como nuestro interés son los estados ligados y sus correspondientes funciones de onda, las energías estarán por debajo de ΔE_C , lo que implica funciones exponenciales evanescentes para la función de onda conforme se alejan del pozo (GaAs), mientras la función de onda es de tipo $sen(z)$ y $cos(z)$ en la región del pozo. Aplicando las condiciones de continuidad (de la función de onda y sus derivadas) en las fronteras de las regiones, es trivial llegar a la siguiente ecuación transcendental para este problema,

pozo cuántico finito.

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{m_b^*}{m_p^*} k \tan\left(k \frac{l_p}{2}\right) \quad (\text{para las soluciones impares}) \\ \gamma &= -\frac{m_b^*}{m_p^*} k \cot\left(k \frac{l_p}{2}\right) \quad (\text{para las soluciones pares})\end{aligned}\tag{6.3}$$

con

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m_b^*(V - \varepsilon)}{\hbar^2}}\tag{6.4}$$

y

$$k = \sqrt{\frac{2m_p^*\varepsilon}{\hbar^2}}\tag{6.5}$$

donde $V(z)$ es el potencial, ε la energía, m_b^* y m_p^* son la masa efectiva en la barrera y en el pozo, respectivamente; la cual es resuelta por un método numérico para obtener las energías permitidas, las cuales son los puntos de cruce entre ambas $\gamma(\varepsilon)$.

Para obtener este resultado nuestro método (SPalpha) resolvió sólo la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en un esquema de *diferencias finitas*, empleando una malla no-uniforme como la descrita en el apéndice A.

Tabla 6.2: Comparaciones del valor del estado base Chuang [3] y el método SPalpha.

	Exacto (meV)	SPalpha (meV)
E_0	30.7	30.70
E_1	120.69	120.67
E_2	245.03	245.48

Se puede observar en la tabla 6.2 el resultado de el estado base es exactamente el mismo que el descrito por Chuang [3].

6.1.2. Pozo cuántico triangular

Tal como se mencionó anteriormente, el estudio del pozo de potencial triangular es de gran interés por su utilización como primera aproximación al pozo formado en

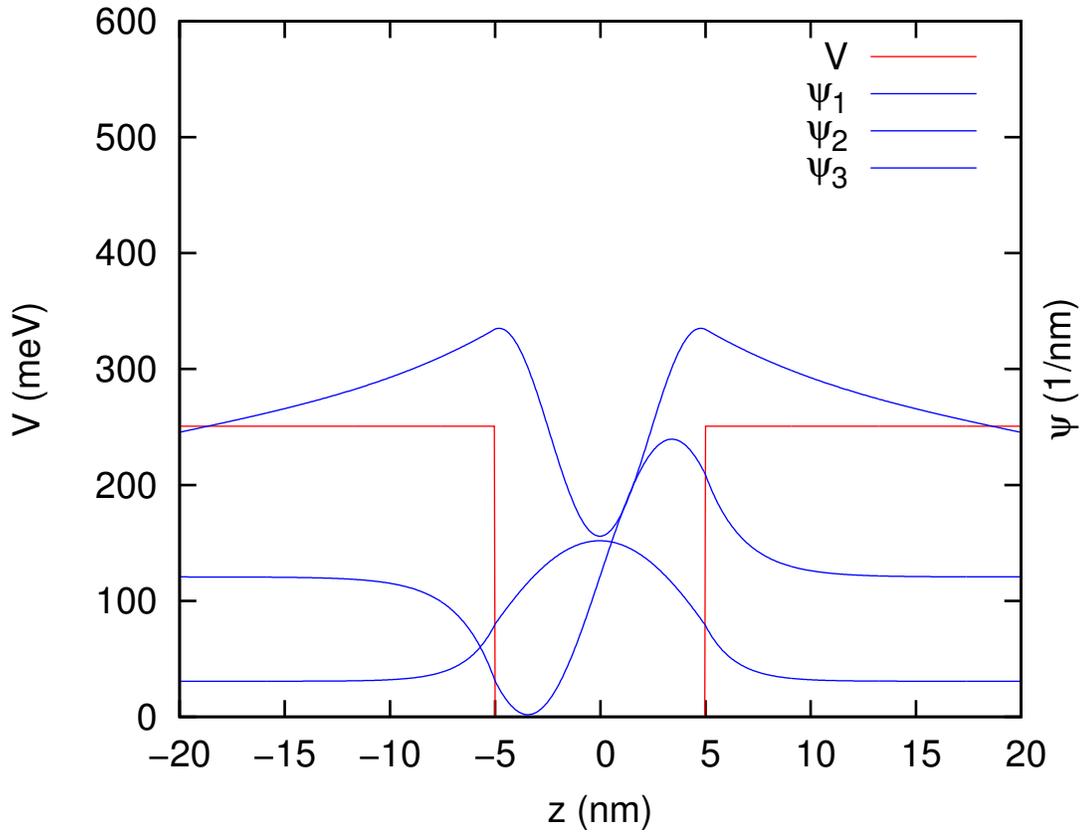


Figura 6.1: Pozo finito GaAs/AlGaAs/GaAs con $l_p = 10 \text{ nm}$ de ancho, rodeado de un par de barreras de $l_b = 15 \text{ nm}$. Este cálculo se realizó resolviendo la ecuación de Schrödinger (ec. 5.1) mediante el método de diferencias finitas con un total de 2048 particiones. Se muestra el perfil de la banda de conducción en rojo y los 3 estados ligados (con $\varepsilon_0 = 30.70 \text{ meV}$, $\varepsilon_1 = 120.67 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 245.49 \text{ meV}$) de color azul, el eje derecho es el que pertenece a dicha función de onda asociado a cada estado ligado.

una heterounión con dopaje modulado. Dicha aproximación consta de una barrera infinitamente alta en $z \leq 0$ y un potencial lineal $V(z) = eFz$ para $z > 0$, con eF como la pendiente del potencial, de tal forma que el potencial $V(z)$ describa una carga e dentro de un campo eléctrico $F = 50kV/cm$ (asumiendo como positivo el producto eF) en un sistema de GaAs.

Se debe resolver la ecuación de Schrödinger (Ec. 5.1) sujeta a las condiciones de frontera $\psi(z = 0) = 0$ y $\psi(z \rightarrow \infty) = 0$ y $\psi'(z = 0) = 0$ y $\psi'(z \rightarrow \infty) = 0$ impuesta por la barrera infinita. Utilizando los siguientes factores de escala para posición z_0 y energía ε_0 , tenemos que

$$\bar{z} = \frac{z}{z_0}, \quad z_0 = \left(\frac{\hbar^2}{2m^*eF} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (6.6)$$

$$\bar{\varepsilon} = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}, \quad \varepsilon_0 = \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m^*} \right]^{\frac{1}{3}} = eFz_0, \quad (6.7)$$

con lo que la ecuación de Schrödinger puede ser reescrita de la siguientes manera

$$\frac{d^2}{d\bar{z}^2} \psi(\bar{z}) = (\bar{z} - \bar{\varepsilon}) \psi(\bar{z}). \quad (6.8)$$

Esta ecuación puede ser simplificada aún más definiendo una nueva variable independiente $s = \bar{z} - \bar{\varepsilon}$. Con esto la ecuación 6.8 es reducida a la ecuación de Stokes o Airy,

$$\frac{d^2}{ds^2} \psi(s) = s\psi(s). \quad (6.9)$$

Esta popular ecuación tiene dos soluciones independientes conocidas como las funciones de Airy, $Ai(s)$ y $Bi(s)$, las cuales son mostradas en la figura 6.2. Un requisito importante impuesto por los postulados de la mecánica cuántica, es que la función de

onda sea bien comportada en $z \rightarrow \pm\infty$, lo que es equivalente a $s \rightarrow \pm\infty$. Esto significa que la solución dada por $Bi(s)$ no es físicamente viable, ya que diverge en $s \rightarrow +\infty$.

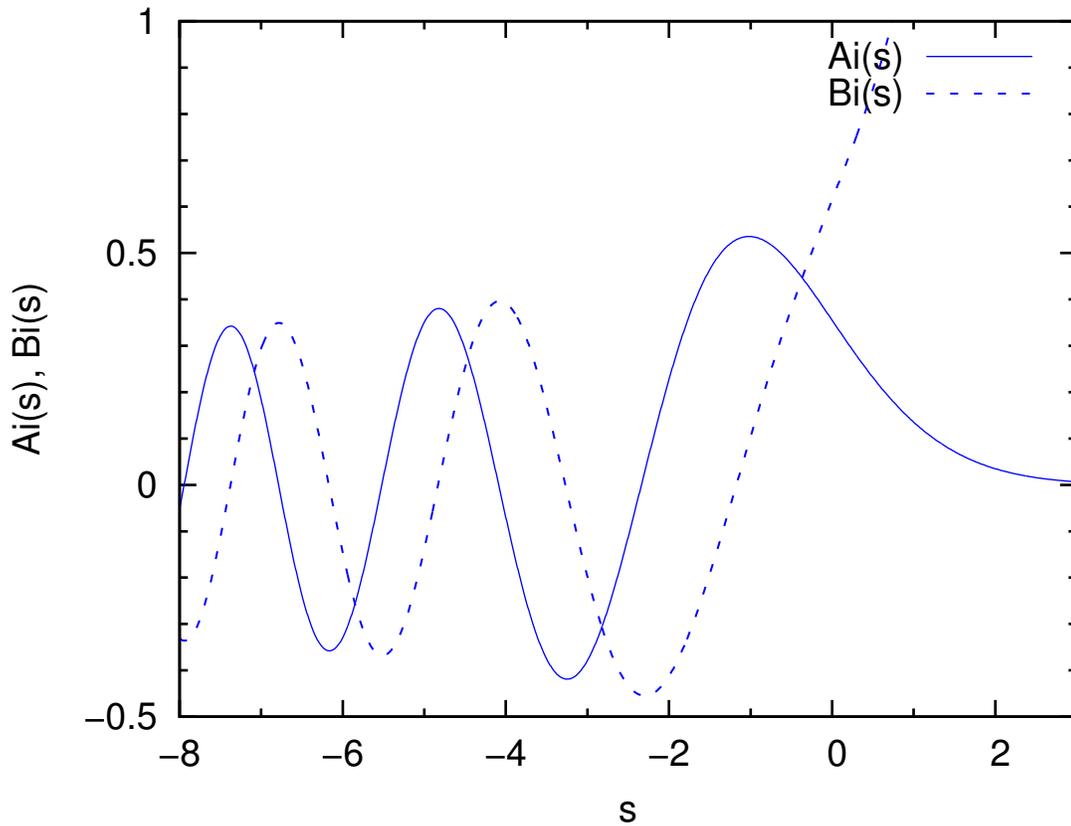


Figura 6.2: Esta gráfica muestra las funciones de Airy $Ai(s)$ y $Bi(s)$, en donde se puede apreciar el comportamiento de ambas soluciones matemáticamente válidas para el problema del pozo triangular. Si embargo, sólo la función $Ai(z)$ tiene relevancia física.

La condición de frontera en $z = 0$ requiere que $\psi(z = 0) = \psi(s = -\bar{\epsilon}) = 0$. La Figura 6.3 muestra que existe un número infinito de valores de s donde $Ai(s) = 0$ denotado por $a_n k$, o $-c_k$ para remover el signo. Por lo tanto, es necesario que $\bar{\epsilon} = c_k$ para asegurar que la función de onda desvanezca en $z = 0$, y las energías permitidas están dadas por

$$\varepsilon_k = c_k \left[\frac{(eF\hbar)^2}{2m^*} \right]^{\frac{1}{3}}, n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.10)$$

y la función de onda sin normalizar por

$$\psi_k(s) = Ai(s) = Ai(\bar{z} - \bar{\varepsilon}) = Ai\left(\frac{eFz - \varepsilon}{\varepsilon_k}\right) \quad (6.11)$$

Todas las funciones de onda $\psi_k(s)$ tienen la misma forma funcional y simplemente son desplazadas en z al cambiar la energía: ψ_1 contiene medio ciclo, ψ_2 contiene dos medios ciclos, y así sucesivamente. En la figura 6.3 podemos observar los tres primeros estados ligados y sus eigenfunciones asociadas. En la tabla 6.3 se muestran las energías asociadas a los tres primeros estados ligados

Tabla 6.3: En esta tabla se pueden apreciar los valores de la energía los tres primeros estados ligados del pozo cuántico triangular 6.3, obtenidos mediante la solución analítica y numérica utilizando el método presentado en esta tesis.

	Analítico (meV)	SPalpha (meV)
ε_1	56.348	56.759
ε_2	99.128	99.209
ε_3	133.987	133.944

Una vez establecida la precisión y veracidad de nuestro método numérico para resolver la ecuación de Schrödinger en el pozo cuántico finito y en el pozo triangular, al comparar los resultados obtenidos de forma analítica con los obtenidos por nuestro método.

En la siguiente sección procederemos a estudiar soluciones autoconsistentes de la ecuación de Schrödinger y de Poisson, para un pozos cuánticos finitos de GaAs entre dos barreras $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ con distintas configuraciones, con/sin dopaje modulado y/o campo electrostático externo.

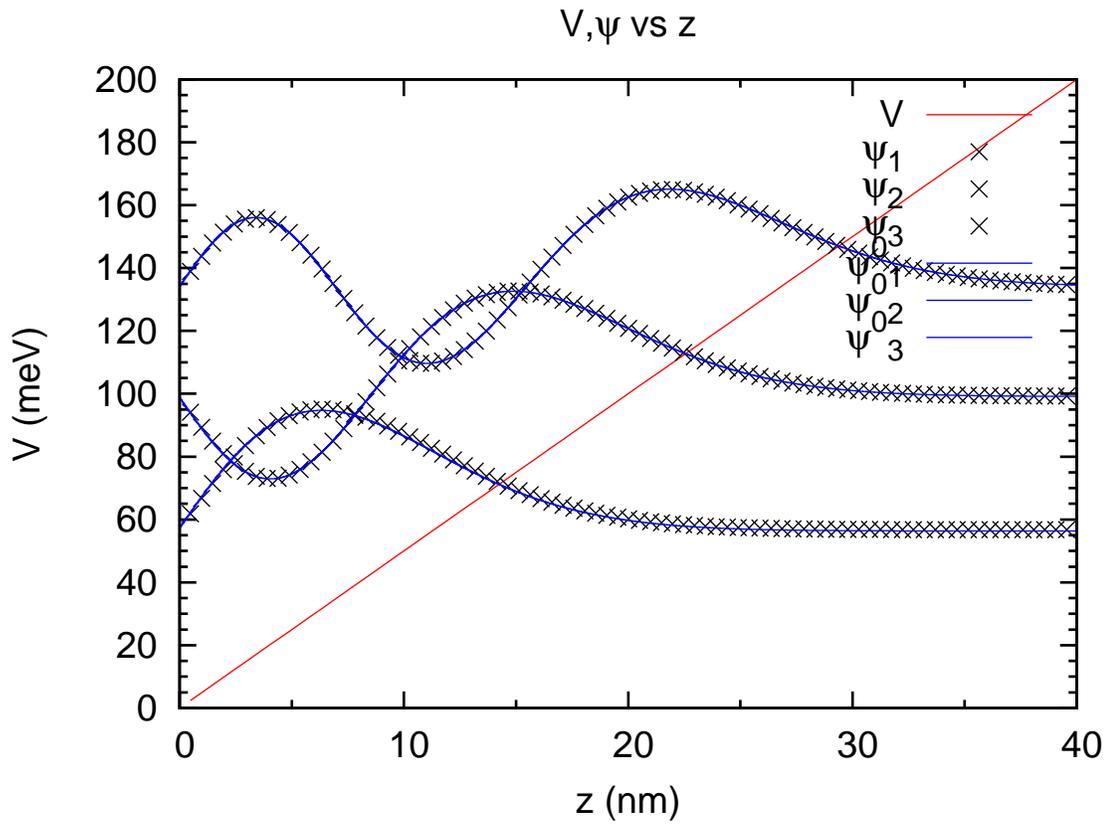


Figura 6.3: En esta figura se muestran los primeros tres estados obtenidos de la solución analítica (línea azul continua), y las funciones de onda obtenidas numéricamente por nuestro método (cruces), así como la barrera de potencial triangular (rojo). Para este sistema se tomó $F = 50 \text{ kV/cm}$, el sistema es GaAs con $m^* = 0.0665$

6.2. Cálculos auto-consistentes

En esta sección analizaremos la parte auto-consistente de nuestro método, por lo que resolveremos el problema de un pozo de potencial finito en una nanoestructura la cual consiste de un pozo de potencial de GaAs de 100 \AA , rodeado por barreras de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ de 200 \AA , a su vez este sistema se encuentra embebido entre dos barreras de AlAs, como es mostrado en la Figura 6.4, tal sistema fue analizado por Roan *et al.* [7].

Con nuestro método, se reprodujeron los cálculos realizados en la Sección III de el trabajo publicado por Roan *et al.* [7], en el que realizan un cálculo autoconsistente de las ecuaciones de Schrödinger y de Poisson, para obtener el perfil de la banda de conducción para distintos casos aplicables también a nuestro método.

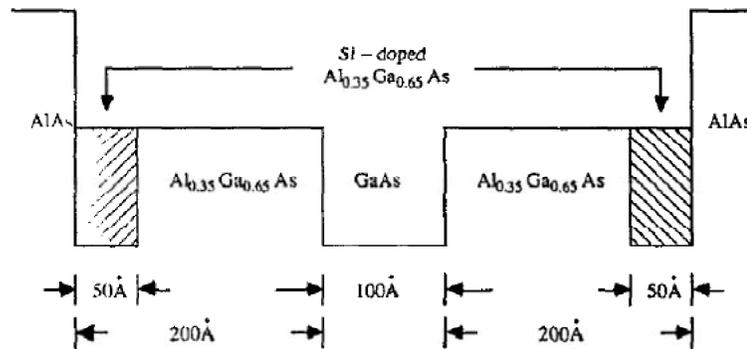


Figura 6.4: El sistema propuesto por Roan *et al.* [7], que consta de un pozo de potencial de GaAs con un ancho de 100 \AA , con una barrera de potencial a cada lado del pozo de $\text{Al}_{0.35}\text{Ga}_{0.65}\text{As}$ de un grosor de 200 \AA , en algunos casos los últimos 50 \AA son dopados con Si (donadores), y el sistema se encuentra embebido en AlAs.

Los parámetros utilizados en la simulación de esta heteroestructura son:

$$m^* = (0.0665 + 0.0835x)m_0, \quad (6.12)$$

la barrera de potencial a la temperatura T viene dada por [7],

$$V_0 = \Delta E_C = 0.6[1.247x - 5.405 \times 10^{-4}T^2/(T + 204)]eV, \quad (6.13)$$

y con constante dieléctrica,

$$\epsilon = (13.1 - 3.0x)\epsilon_0, \quad (6.14)$$

donde x es la fracción molar de Al, m_0 y ϵ_0 son la masa del electrón libre y la constante dieléctrica de el vacío, respectivamente.

En la siguiente sección resolveremos el sistema de este pozo de potencial de forma auto-consistente, para resolver el pozo cuántico finito es necesario resolverlo de manera auto-consistente, ya que en una nanoestructura en la que existen estados localizados, estos al contar con carga eléctrica deforman la banda de conducción generando un campo electrostático interno.

6.2.1. Solución auto-consistente

Primeramente analizaremos el caso auto-consistente de este sistema (Figura 6.4) sin incluir el dopaje modulado en los extremos, ni campo eléctrico externo, por lo que el cálculo autoconsistente incluye sólo los estados ligados, en la Figura 6.5(b) se encuentran los estados reportados por Roan *et al.* [7], en el cual se puede observar una pequeña deformación del potencial debido a las cargas localizadas en el pozo de potencial (estados ligados).

La energía de transición entre el estado base y el primer estado excitado es de 92.03 meV , en nuestro método obtenemos una energía de transición interbandas de 92.33 meV , con el potencial y estados ligados como se muestran en la Figura 6.5(b)(d).

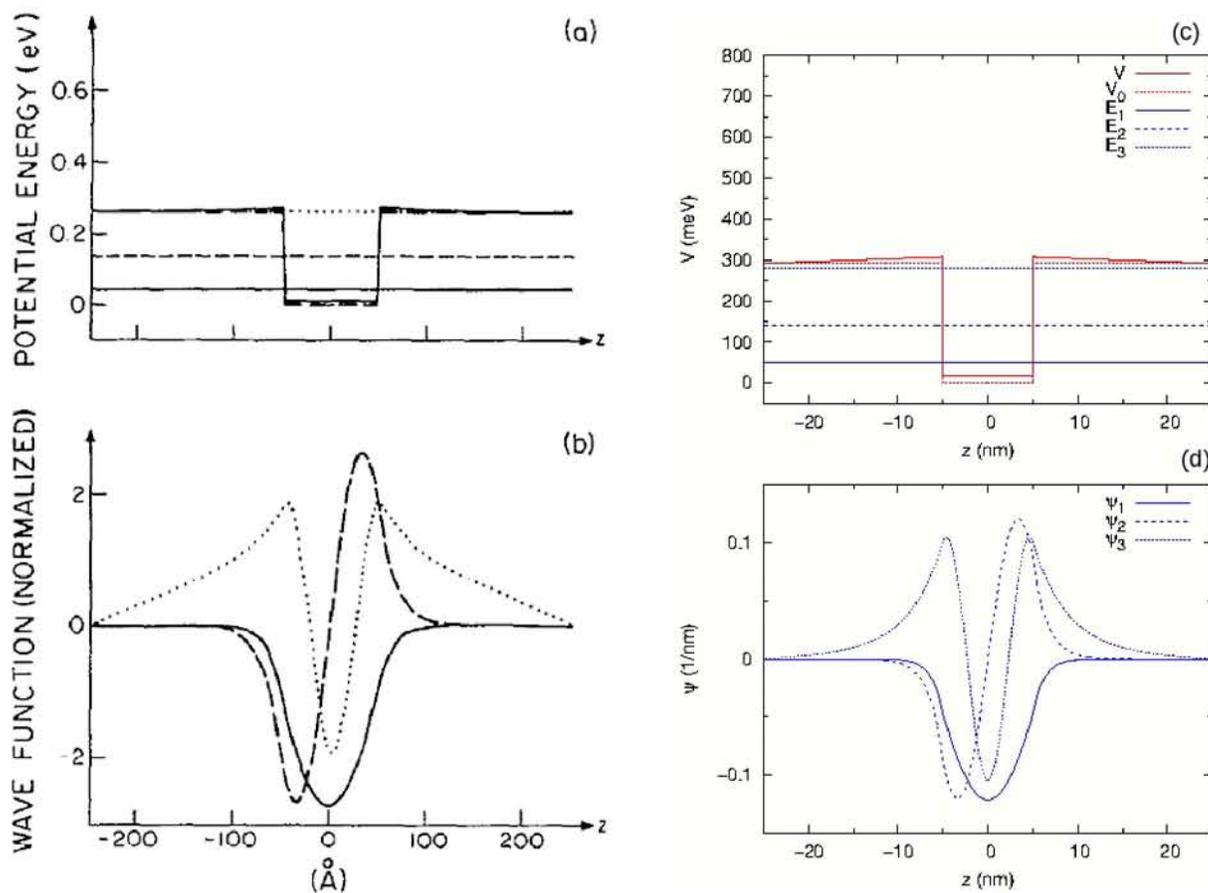


Figura 6.5: Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método. En (a) y (c) se presenta el perfil de la banda de conducción y la energía de las tres funciones de onda, el pozo con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados. En (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estado ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitados.

6.2.2. Solución auto-consistente con campo eléctrico externo

En esta sección analizaremos el caso del pozo de potencial finito, en un sistema similar al descrito en la pasada sección (figura 6.4), con la adición de un campo electrostático externo $\phi(z) = 50 \text{ kV/cm}$. Al aplicar un campo electrostático constante esperamos que el perfil de la banda de conducción obtenga una inclinación con pendiente $e\phi$.

Al adquirir una pendiente, el perfil de la banda de conducción pierde la simetría de inversión espacial, con lo que la heteroestructura rompe su degeneración en el momento, esto es debido a el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba que surge al contar con asimetría de inversión espacial.

En el sistema reportado en el trabajo de referencia es mostrado en la Figura 6.6, donde se puede apreciar claramente una pendiente proporcional a el campo eléctrico aplicado.

Note que el tercer estado es desplazado hacia fuera del pozo, también se puede observar que las funciones de onda son desplazadas hacia el lado negativo de z , lo cual se puede observar más claramente en el estado base.

En dicho sistema es reportado una diferencia de energía entre el estado base y el primer estado excitado es de 93.54 meV en el caso de referencia [7] y 94.08 meV en nuestro método con el perfil de la banda de conducción y los primeros estados mostrados en la Figura 6.6

6.2.3. Solución auto-consistente con dopaje modulado

En este caso, se introduce una capa con dopaje modulado con 50 nm de ancho en los extremos de la heteroestructura, con lo que se obtiene una mayor deformación de la banda de conducción, esto es debido a el exceso de cargas libres en los extremos

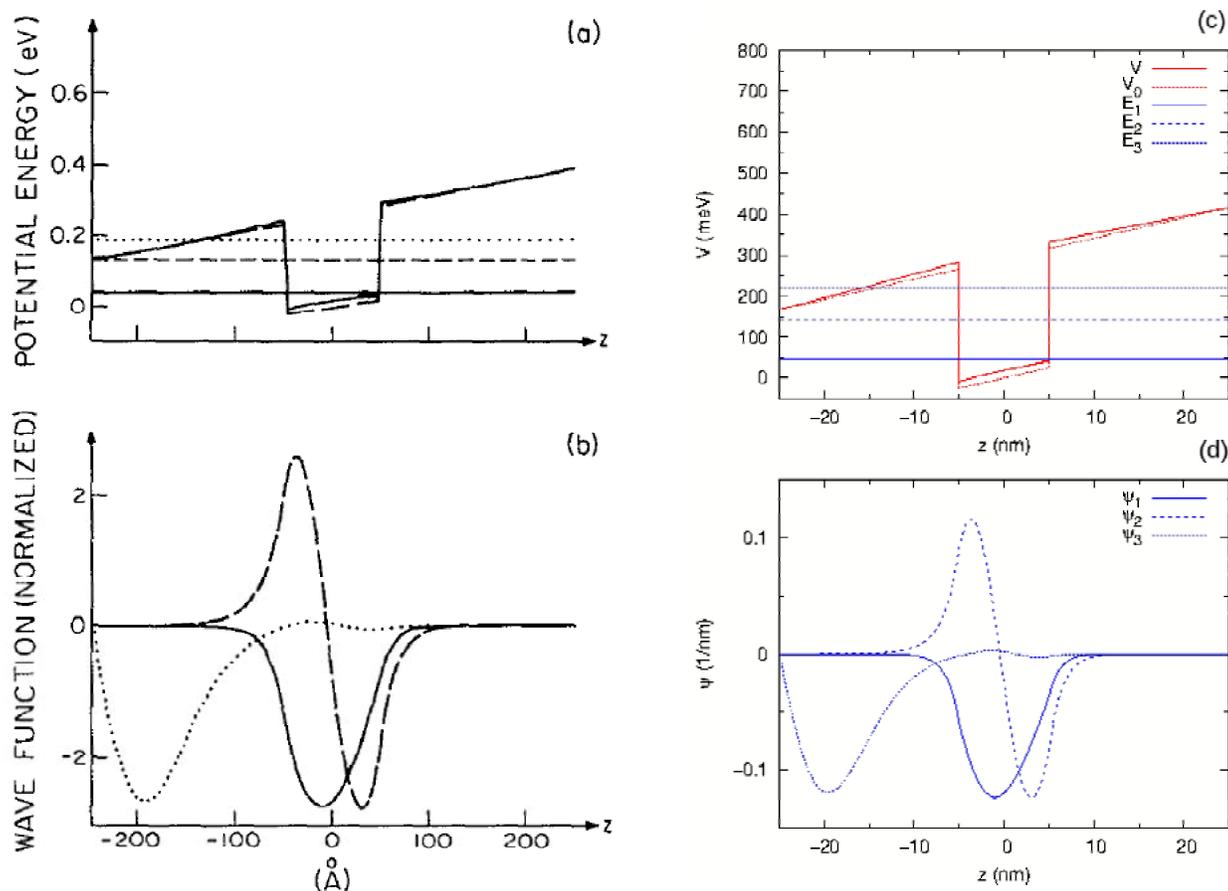


Figura 6.6: Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método. En (a) y (c) se muestran al perfil de la banda de conducción con un campo eléctrico aplicado de 50 kV/cm a el pozo de potencial con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a las primeras tres primeras funciones de onda. En (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estado ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitado.

del sistema, las cargas libres migran a la interfaz del pozo (como se mencionó en el Capítulo 3), lo que genera un campo electrostático interno capaz de lograr atrapar electrones, lo que da origen a un GE2D. El cálculo se realizó a temperatura ambiente $T = 300 K$, y al los extremos del pozo se introdujo dopaje modulado con una densidad de donadores de carga $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, los obtenidos por nuestro método así como los datos reportados por Roan *et al.* [7] son presentados en la figura 6.7.

El caso de referencia es mostrado en la figura 6.7 donde claramente se puede observar una joroba en el pozo debido a la mayor concentración de carga electrónica en éste, también se puede apreciar un fuerte desplazamiento de el fondo del pozo (al rededor de 120 meV).

Note que el perfil de la banda de conducción es desplazado debido a el campo electrostático generado dentro de la nanoestructura, en específico en las interfaces de los distintos materiales, también se puede ver que el segundo estado excitado $\psi_3(z)$ es desplazado fuera del pozo de potencial, debido que el fondo del pozo de potencial es también desplazado.

En este caso no se presenta acoplamiento espín órbita tipo Rashba ya que el valor esperado del campo electrostático es cero, esto se debe a la simetría del mismo, así como el de las funciones de onda.

6.2.4. Solución auto-consistente con campo eléctrico externo y dopaje modulado

Finalmente, estudiamos un sistema con dopaje modulado y un campo eléctrico externo el cual también fue comparado con el reportado por Roan *et al.* [7], este caso es el más interesantes de analizar ya que con ello podemos estudiar como cambia la constante de Rashba en función del campo eléctrico externo, idea que forma la base del funcionamiento del transistor de espín expuesto en el famoso artículo de

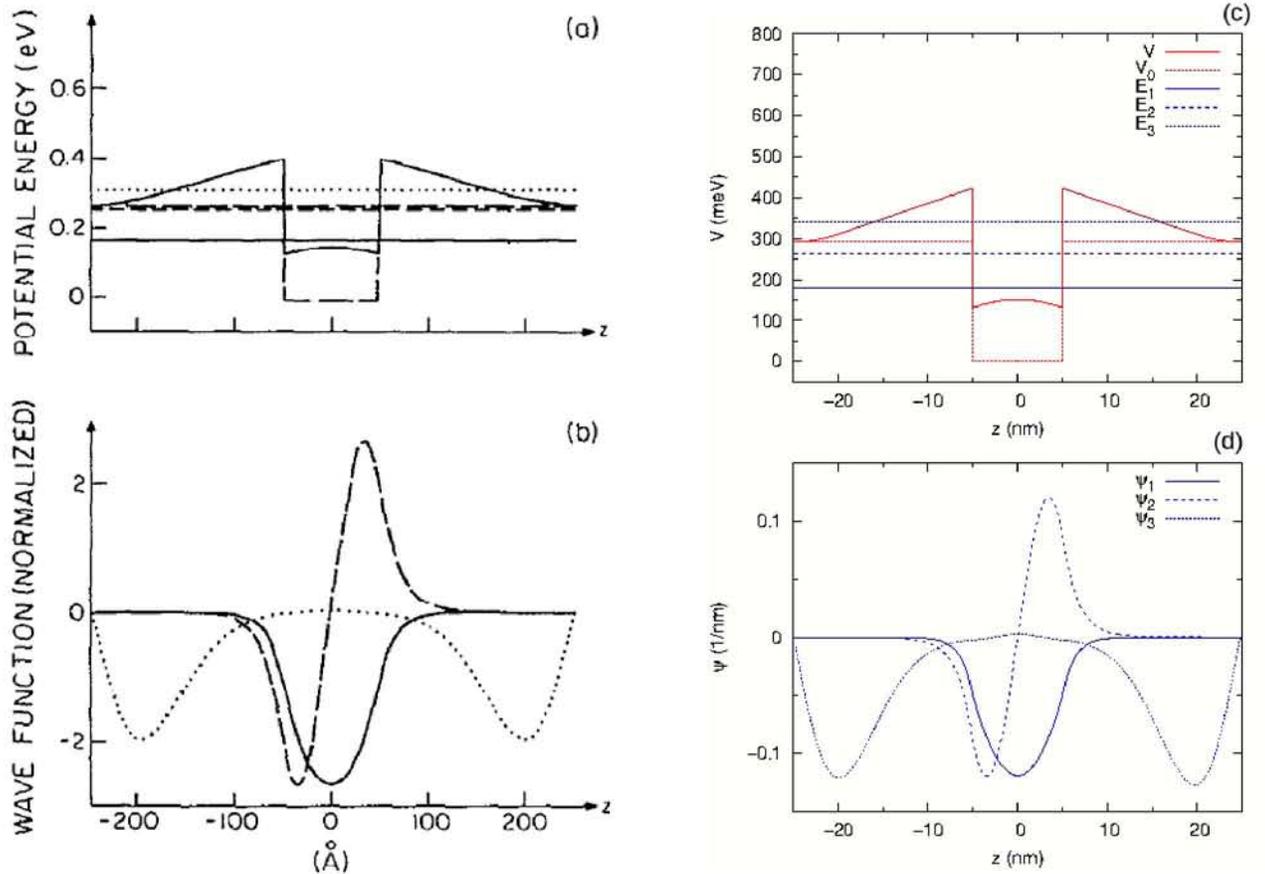


Figura 6.7: Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método; En (a) y (c) se muestran el perfil de la banda de conducción y la energía de los tres primeros estados al dopar ambos extremos con una densidad de donadores $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, el perfil de la banda de potencial del pozo con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados, en (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estado ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitados, en esta gráfica se puede apreciar el fuerte desplazamiento de la banda de conducción sobre todo en el centro del pozo ya que nuestras condiciones de frontera para el potencial electrostático ($\phi(z)$) son los de una onda estacionaria, también se puede apreciar que el segundo estado excitado $\psi_3(z)$ es desplazado fuera del pozo de potencial.

Datta-Das [8].

En este caso se puede observar los resultados reportados ya en la literatura [7] a la par con los obtenidos por nuestro método en la figura 6.8. En este caso, similar al anterior pero ahora con la adición de una campo eléctrico externo de 50 kV/cm , lo que provoca que el perfil de la banda de conducción sea semi-triangular, lo que se traduce a una variación espacial del potencial, la cual es asimétrica, lo cual se puede apreciar en la figura 6.8 (b) y (d) como un corrimiento del centro de la función de onda del estado base hacia la izquierda; también es posible observar (figura 6.8(a) y (c)) como es modificado el potencial debido a el dopaje modulado y los estados ligados, lo que nos daría las condiciones adecuadas para presentar un acoplamiento espín-órbita tipo Rashba, lo cual analizaremos en el siguiente capítulo cambiando los materiales del pozo, por materiales de brecha energética estrecha y con una diferencia de masas efectivas grande, condiciones idóneas para generar una constante de Rashba de mayor magnitud.

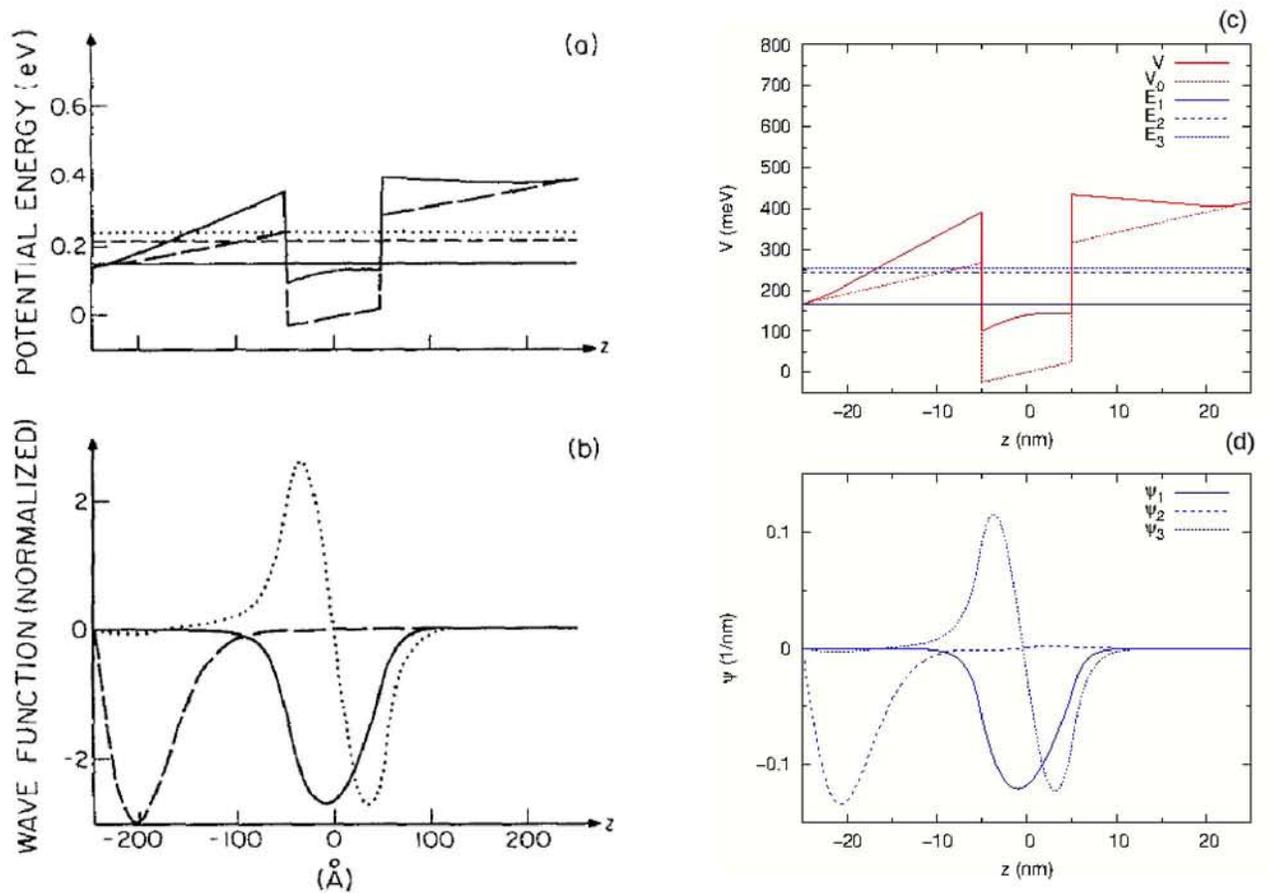


Figura 6.8: Las figuras (a) y (b) son las presentadas por Roan *et al.* [7], y las figuras (c) y (d) los resultados obtenidos mediante nuestro método; El (a) y (c) se presenta al perfil de la banda de conducción con un campo eléctrico aplicado de 50 kV/cm y con dopaje modulado en ambos extremos de la nanoestructura con densidad de donadores de $N_D = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, así como la energía de los tres primeros estados, el pozo con línea sólida (segmentada) corresponde a el perfil de la banda después (antes) del cálculo auto-consistente y las líneas rectas a la energía asociada a los primeros tres estados ligados, en (b) y (d) se muestran los estados ligados, la línea sólida corresponde a el primer estados ligado y las líneas discontinuas a los primeros estados excitados.

7. Cálculo del parámetro de Rashba

En este capítulo se exponen los resultados obtenidos con el método desarrollado en esta tesis, el cual consiste en realizar un cálculo auto consistente de las ecuaciones de Schrödinger y de Poisson para obtener el campo electrostático interno, al igual que la energía de los estados ligados (como fue descrito en el capítulo 5), datos que posteriormente se utilizan para evaluar la ecuación 4.14 (capítulo 4) para obtener el valor de el parámetro de Rashba α_R , en la nanoestructura de interés.

El sistema que fue analizado consiste de un pozo de potencial de Arseniuro de Indio (InAs) embebido en Antimoniuro de Aluminio (AlSb), la elección de estos materiales es debido a que estos son de brecha energética pequeña, la diferencia de masas efectivas entre ellos es grande, y la banda de espín split-off no se encuentra degenerada con las bandas de dispersión de hueco ligero y hueco pesado, como se muestra en la figura 4.2. Como referencia tenemos el trabajo recopilatorio de Fabian *et. al.* [2], donde presenta distintos valores de el parámetro de Rashba α_R reportados experimentalmente en sistemas similares al analizado en esta tesis, estos valores se presentan en la tabla 4.2, siendo el trabajo publicado por Heida *et. al.* [46] el más importante de ellos este caso.

Primero se realizaron los cálculos necesarios en el material para caracterizarlo, y ver que concuerde en comportamiento con el esperado dadas las condiciones del sistema. Segundo, se analizó el comportamiento del parámetro de Rashba en el sistema al variar el ancho del pozo, el dopaje modulado y el campo electrostático externo.

7.1. Caracterización del pozo finito de InAs/AlSb

Se comenzó realizando los cálculos en una nanoestructura, la cual consiste en un pozo cuántico finito, formado por una capa de Arseniuro de Indio (InAs) de 10 nm de espesor embebido entre dos capas de 20 nm de Antimoniuro de Aluminio (AlSb); esto, como ya se mencionó, con el fin de caracterizar al material.

Se analizaron cuatro casos, primero se trabajó con el caso del pozo de potencial, resolviendo sólo la ecuación de Schrödinger 5.1, seguido se aplicó un campo eléctrico externo a dicho pozo para formar un pozo triangular finito; posteriormente, se realizaron cálculos autoconsistentes de ambos casos, después se introdujo una capa dopada con silicio (Si) en un extremo del pozo.

7.1.1. Caso: pozo de potencial cuántico finito

Como ya fue mencionado, se comenzó con el caso más sencillo, con el objeto de caracterizar al sistema en el cual nos basamos para realizar el análisis del comportamiento del parámetro de Rashba α_R ; el de un pozo de potencial finito de InAs/AlSb. Realizando los cálculos en dicha nanoestructura, con lo cual se obtuvo la gráfica mostrada en la figura 7.1, en la cual se muestran el estado base y los dos primeros estados excitados dentro del pozo, y cuyas energías se encuentran en la tabla 7.1.

Tabla 7.1: Resultados obtenidos de el pozo cuántico

Estado	Energía (meV)
E_0	84.22
E_1	352.81
E_2	848.26

En la figura 7.1 se puede observar un cambio de pendiente abrupto en las funciones de onda, lo cual es debido a que en la heterounión existe una diferencia de masas relativas entre ambos materiales muy grande, esto es para cumplir con la condición

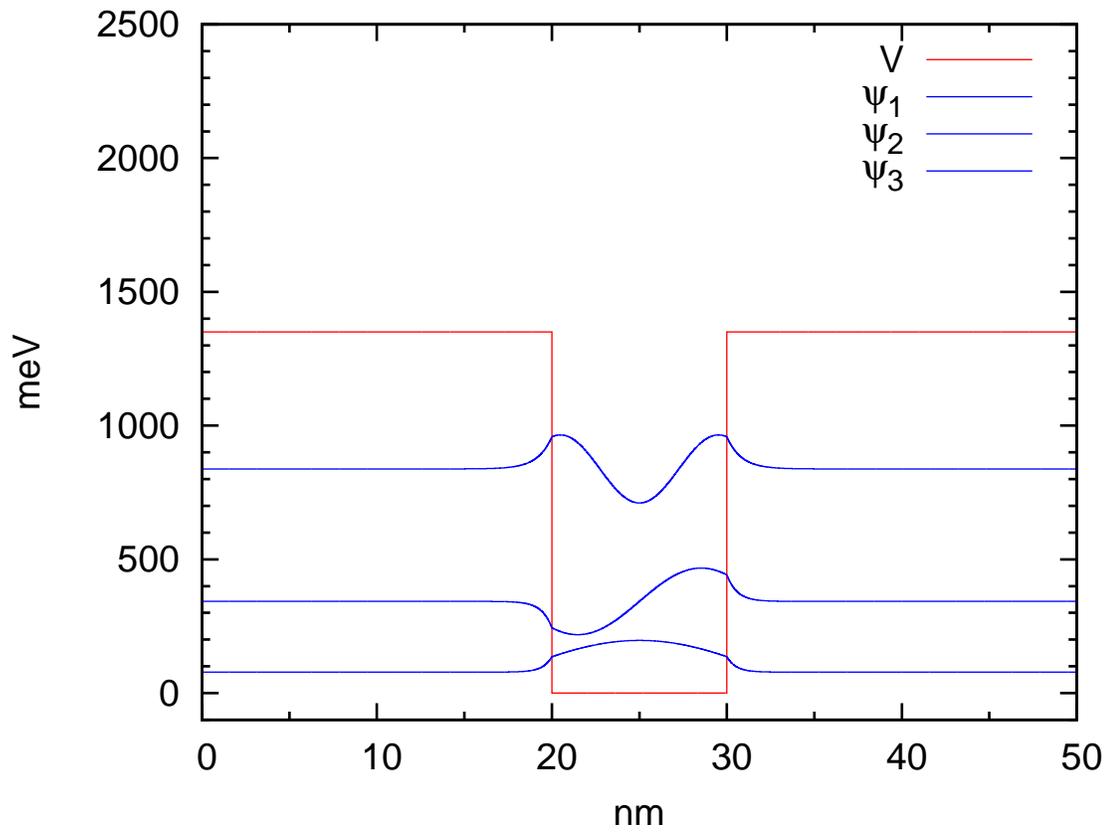


Figura 7.1: En esta figura se muestran los tres estados ligados de un pozo finito conformado por InAs con un espesor de 10 nm , mismo que es acotado por dos capas de AlSb de 20 nm , las energías de dichos estados se muestran en la tabla 7.1, es importante resaltar que en este caso que se resolvió sólo la ecuación de Schrödinger *per se*.

de continuidad mostrada en la ecuación 2.20. como fue descrita a finales de capítulo 2.

7.1.2. Caso: pozo finito con campo eléctrico externo

Ya obtenidos estos resultados, se prosiguió a calcular las funciones propias asociados a el pozo cuántico de potencial finito, aplicando un campo eléctrico externo con una magnitud de 50 kV/cm en la dirección de crecimiento, con esto se logró obtener un pozo triangular finito con pendiente proporcional a dicho campo electrostático.

Los resultados de este cálculo son presentados en la figura 7.2 y tabla 7.2, en la figura 7.2 se puede apreciar el perfil de la banda de conducción (línea roja) y los dos primeros estados ligados (líneas azules), se puede ver que las funciones de onda pierden la simetría con un leve sesgo hacia la parte más baja del pozo. Las energías asociadas a los estados ligados que son mostradas en la tabla 7.2 son mayores a las de el pozo sin campo eléctrico externo, debido a que este campo externo recorre la banda de conducción, principalmente el fondo del pozo.

Tabla 7.2: Resultados obtenidos de el pozo cuántico con un campo eléctrico externo de 50 kV/cm .

Estado	Energía (meV)
E_0	205.45
E_1	474.86
E_2	970.13

7.1.3. Caso: pozo finito con dopaje modulado

En esta sección se agregó en la barrera izquierda de la nanoestructura impurezas donadoras, lo que produjo una migración de cargas a la heterojunción, como ya se vio en el capítulo 3, lo cual afecta al perfil de la banda de conducción, lo que a su vez

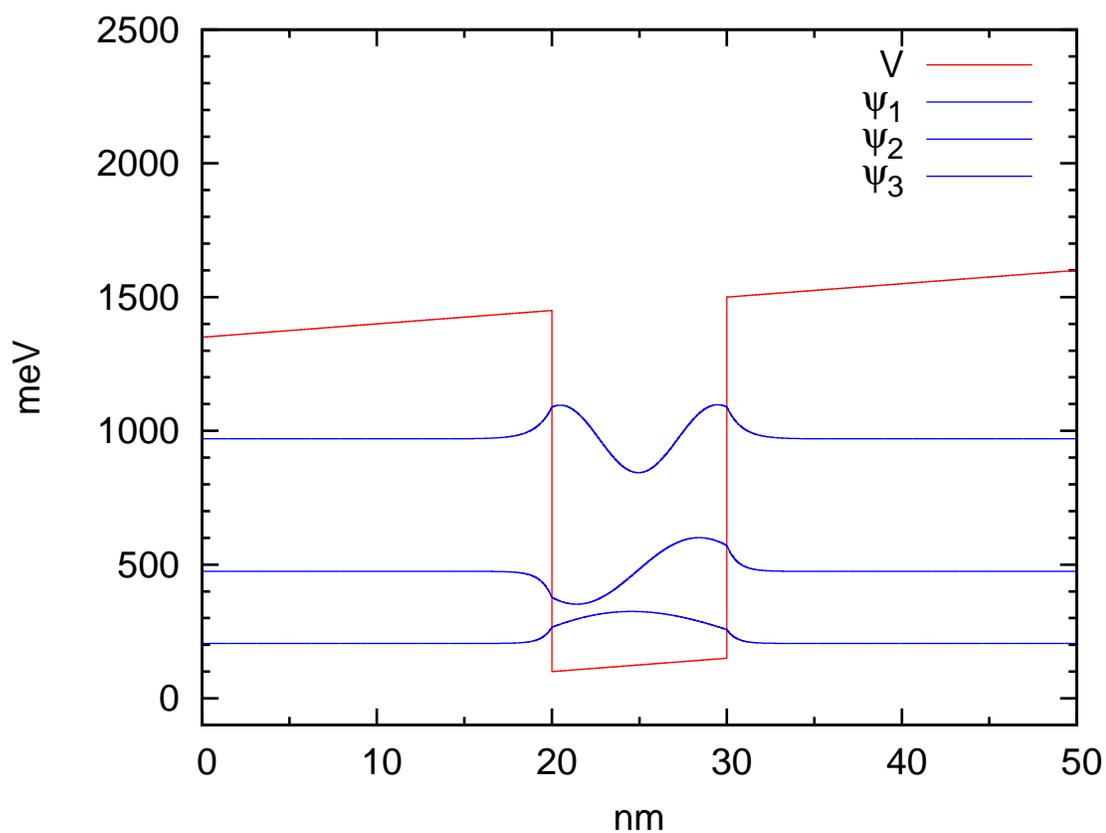


Figura 7.2: En esta figura se puede apreciar la banda de conducción (línea roja) del pozo cuadrado con un campo eléctrico externo aplicado de 50 kV/cm , lo que induce una pendiente en dicha banda; también son mostrados los dos primeros estados ligados con energías mostradas en la tabla 7.2.

afecta a los estados ligados, ya que la carga de los electrones interactúa con las cargas libres, hasta llegar a un equilibrio electrostático, lo que forma un campo eléctrico interno. Las impurezas consisten en átomos de Si (donadores) con una concentración de $1.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, en los primeros 5 nm de la barrera de la izquierda. Los resultados de esta simulación se muestran en la figura 7.3 y la tabla 7.3.

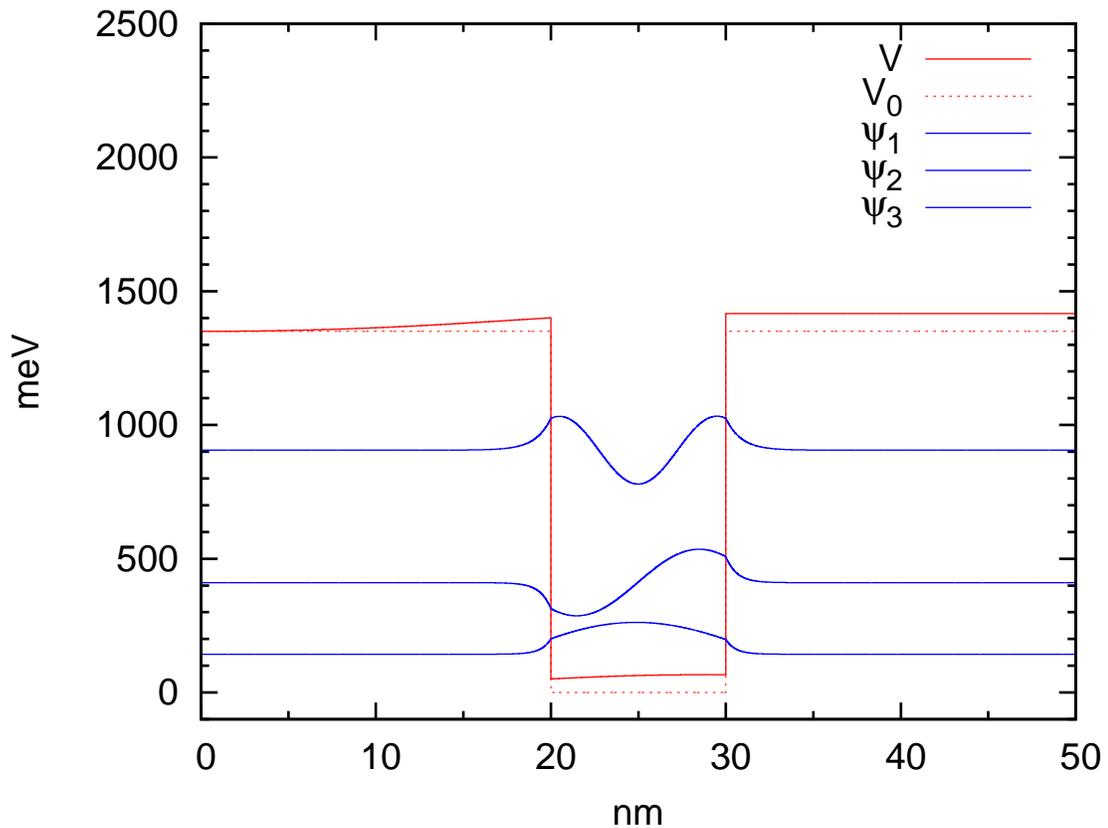


Figura 7.3: En esta gráfica se puede observar como el perfil de la banda de conducción es modificado por una capa con impurezas de Si con una concentración de $1.8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, se puede apreciar como la banda de conducción es modificada por la redistribución de cargas, las cuales quedan atrapadas en la vecindad de la interfase (al rededor de los primeros 20 nm), también se puede ver que el campo generado es de carácter local, ya que después de el pozo la banda de conducción se comporta de manera constante, recorrida por el campo interno; el perfil de la banda de conducción original es mostrado por la línea roja punteada y el resultando del cálculo autoconsistente con la línea roja sólida. También se pueden observar los tres primeros estados ligados.

Tabla 7.3: Resultados obtenidos de el pozo cuántico con dopaje modulado.

Estado	Energía (meV)
E_0	143.11
E_1	410.58
E_2	905.99

7.1.4. Caso: pozo finito con dopaje y campo externo

Finalmente se analizó el caso de el pozo rectangular finito, con dopaje modulado, como es descrito en la pasada sección, pero ahora también aplicando un campo eléctrico externo, con lo que se logra desplazar aún más a la banda de conducción y haciendo que ésta tenga una mayor variación espacial, por lo que es de esperar que exista un aumento en la interacción espín-órbita (IEO) tipo Rashba. En la figura 7.4 se muestra como es modificado el perfil de la banda de conducción con el campo eléctrico (línea roja punteada) por la presencia de el dopaje modulado (línea roja sólida). En la tabla 7.4 son mostradas las energía del los tres estados ligados de la nanoestructura.

Tabla 7.4: Resultados obtenidos de el pozo cuántico con dopaje modulado.

Estado	Energía (meV)
E_0	266.88
E_1	535.62
E_2	1030.73

7.2. Análisis del comportamiento del parámetro de Rashba con nuestro método

Ya probado el método presentado en esta tesis y caracterizado el sistema en el que se trabajará, se procedió a analizar el comportamiento de la α_R ; se analizó el comportamiento de la α_R de Rashba en función de la concentración de los donadores

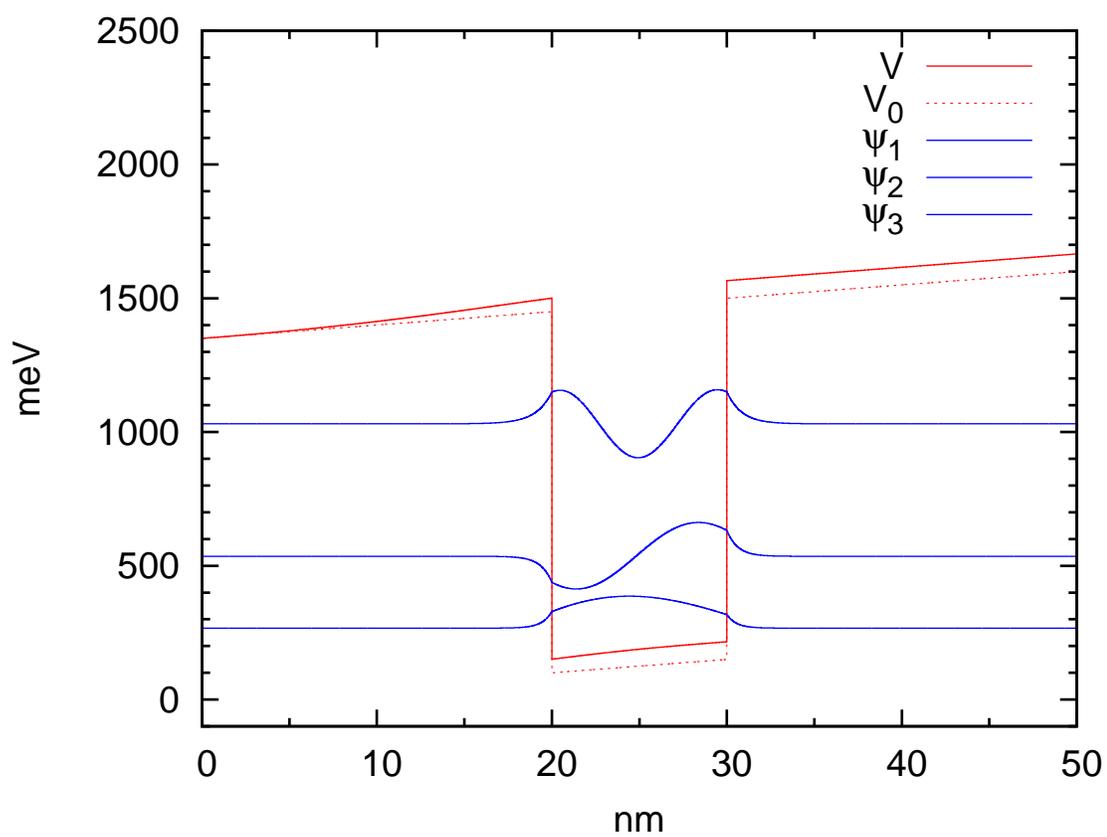


Figura 7.4: En esta figura se puede apreciar el perfil de la banda de conducción y los tres primeros estados ligados.

de cargas con los que se encuentran dopados los primeros 5 nm de la nanoestructura, y también se estudió la dependencia del parámetro α_R de Rashba con respecto a un campo eléctrico externo, lo que debería de romper aún más la degeneración en el momento entre los dos eigenestados de espín.

7.2.1. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a la densidad de donadores de carga

Se analizó el comportamiento de la α_R de Rashba variando la densidad de impurezas de donadores (dopaje) depositados en los primeros 5 nm de la nanoestructura, para así lograr una mayor variación del campo eléctrico interno en la primera interfaz del pozo de potencial, ya que las cargas liberadas por los donadores son equilibradas con las cargas contenidas en el pozo cuántico de potencial (estados ligados).

Haciendo un barrido en el dopaje de $Dop = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ hasta $Dop = 1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, se obtuvo el comportamiento mostrado en la figura 7.5, en la que se puede observar que la α_R de Rashba muestra un interesante comportamiento. Sería de esperarse que el valor del parámetro de Rashba (α_R) aumentara, pero ocurre lo contrario en la región donde la concentración de dopaje varía de $Dop = 1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ a $Dop = 23 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, esto es por que antes de este último valor existen cuatro estados ligados. Al pasar la densidad de impurezas el valor de $Dop = 23 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, sólo existen tres estados ligados en el pozo, a partir de este valor el parámetro de Rashba α_R comienza a incrementar, como sería de esperarse.

Con respecto a los valores de la α_R de Rashba, vemos que comienza en el valor de $\alpha_R = 0.739 \text{ meVnm}$, llevando a un mínimo de $\alpha_R = 0.592 \text{ meVnm}$ en $Dop = 23 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, y en el límite superior alcanzando el valor de $\alpha_R = 1.003 \text{ meVnm}$.

Al aplicar un campo externo electrostático externo $\phi(z) = 5.0 \text{ kV/cm}$ se observa que el comportamiento de la α_R de Rashba es recorrido, el primer valor de $\alpha_R =$

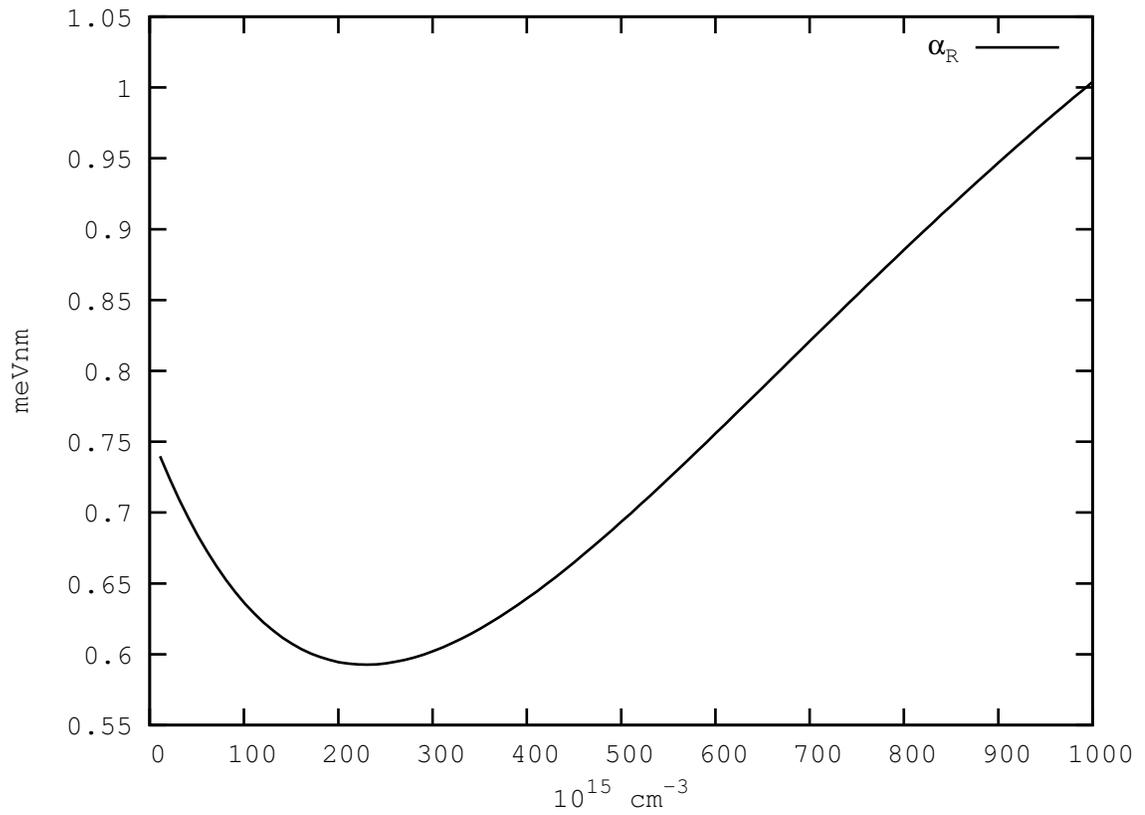


Figura 7.5: En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 0.0 \text{ kV/cm}$.

2.030 $meVnm$ llegando a su mínimo de $\alpha_R = 1.500 meVnm$ a una concentración de dopaje de $Dopr = 6.2 \times 10^{17} cm^{-3}$, como se muestra en al figura 7.6.

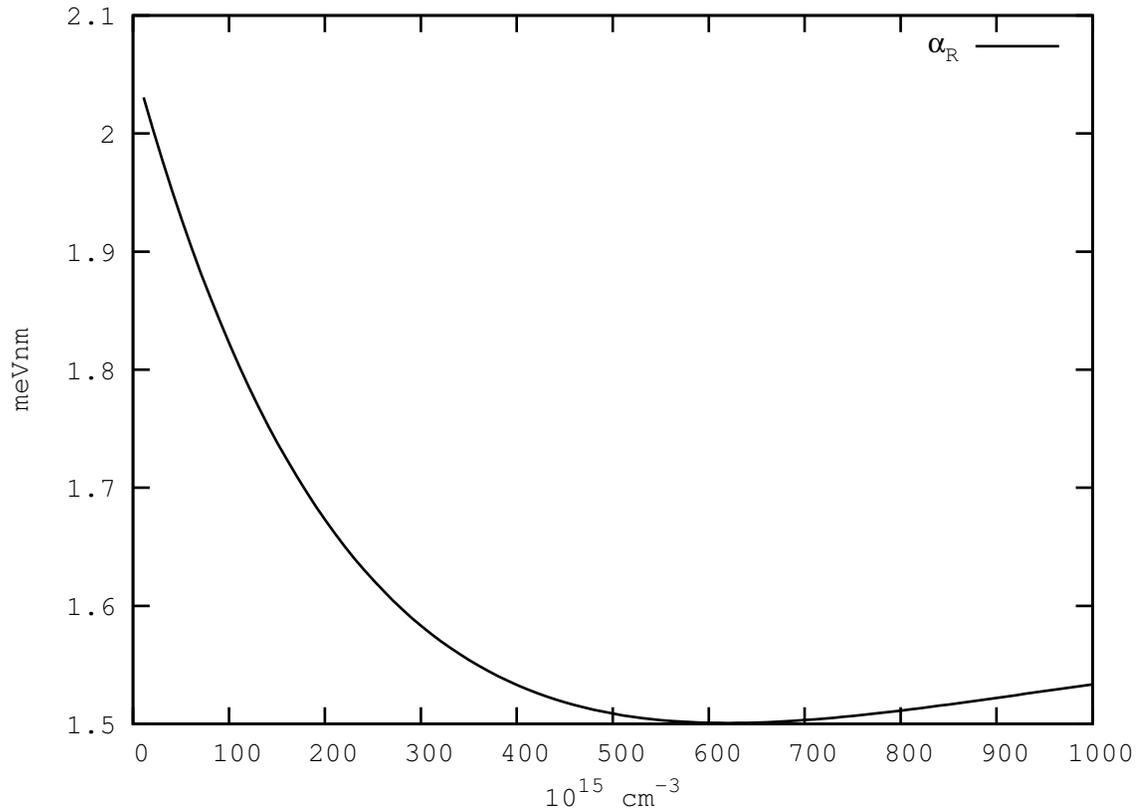


Figura 7.6: En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 5.0 kV/cm$.

El comportamiento del parámetro de Rashba α_R se puede explicar por la fuerza que ejerce el campo electrostático externo a las cargas liberadas por los donadores, ya que en este caso el número de estados ligados no es modificado, al lograr un equilibrio de las cargas libres con el campo electrostático externo $\phi(Z) = 5.0 kV/cm$ en la concentración $Dopr = 6.2 \times 10^{17} cm^{-3}$, después de ahí el parámetro α_R comienza a incrementar debido a la deformación del campo electrostático interno.

También se puede observar que al aumentar el campo electrostático externo $\phi(z)$,

el parámetro α_R decae más lento, lo que se puede apreciar en las figuras 7.7, donde es aplicado un campo externo $\phi(z) = 10 \text{ kV/cm}$; y en la figura 7.8, donde el campo aplicado es $\phi(z) = 5 \text{ kV/cm}$.

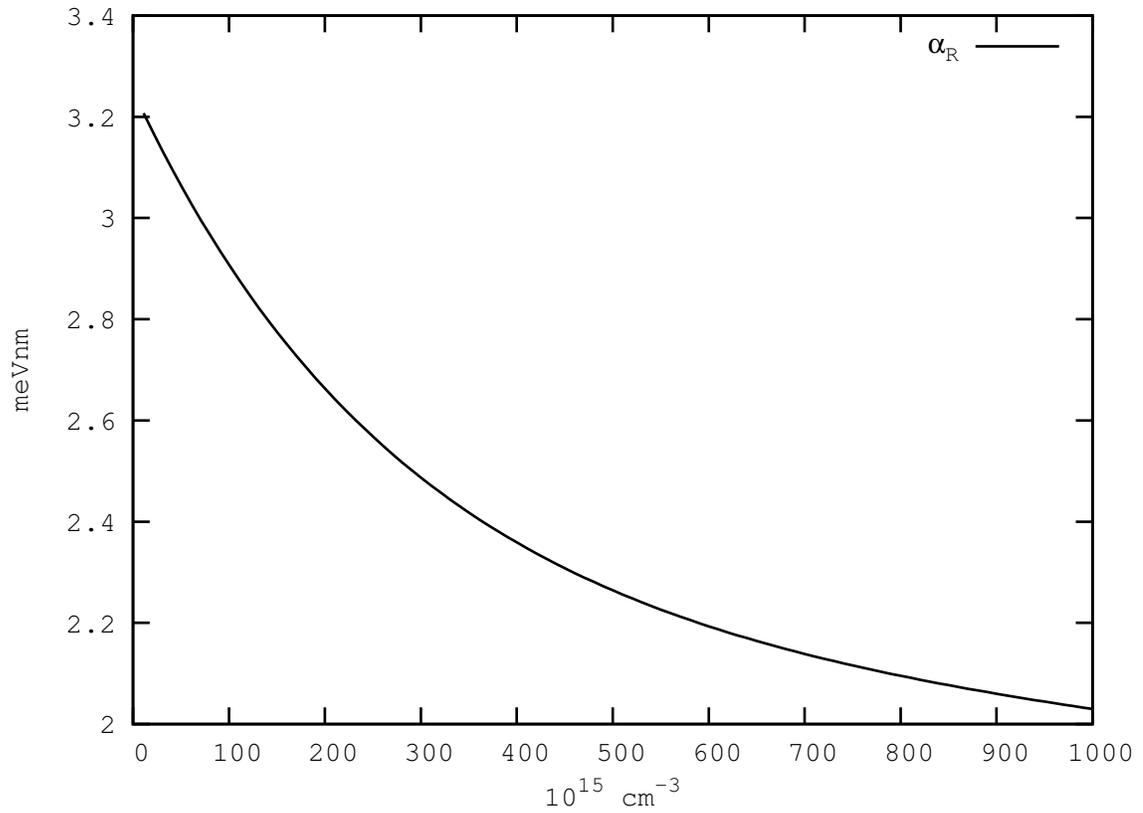


Figura 7.7: En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el Δ_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 10.0 \text{ kV/cm}$.

En la siguiente sección se analizará la dependencia del parámetro α_R de Rashba con respecto al campo electrostático externo $\phi(z)$.

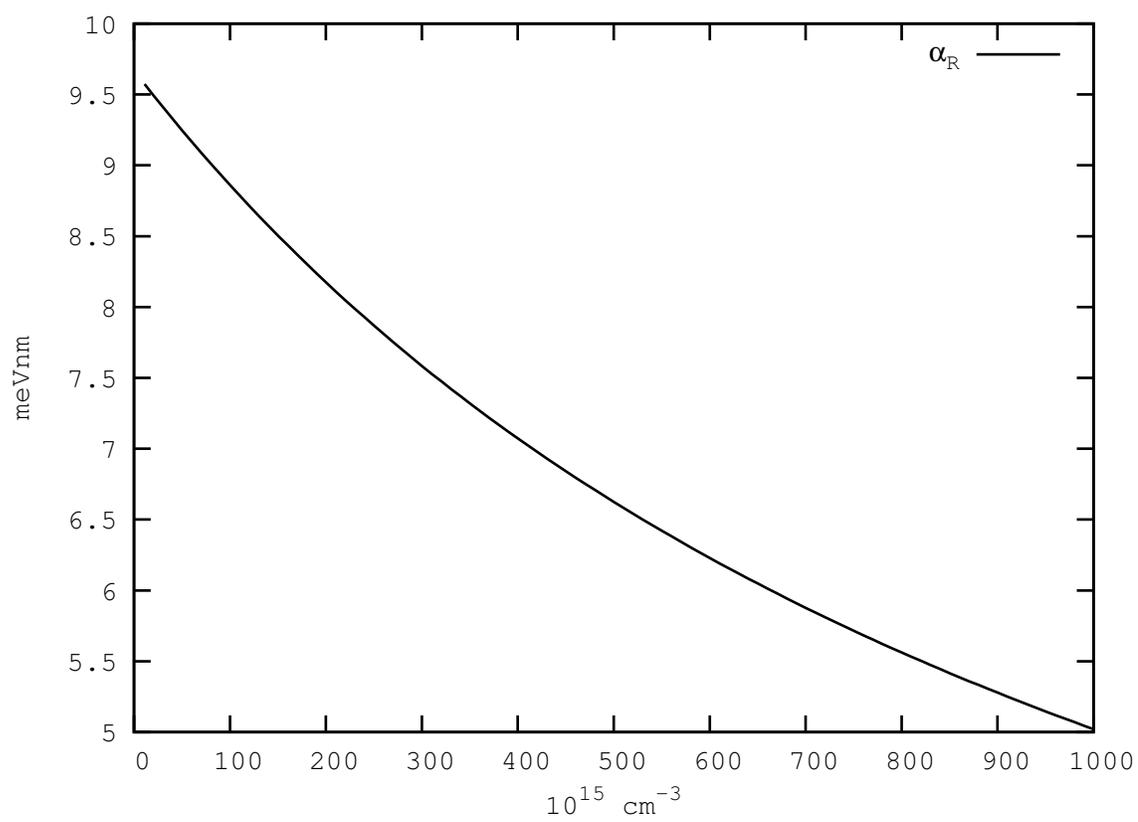


Figura 7.8: En esta figura se muestra el comportamiento obtenido con nuestro método para calcular el parámetro α_R de Rashba como función de la densidad de donadores de carga en la nanoestructura a $\phi(z) = 50.0 \text{ kV/cm}$.

7.2.2. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a un campo eléctrico externo

Se realizó una análisis sistemático del comportamiento del parámetro de α_R de Rashba con respecto a un campo electrostático externo aplicado (ϕ) a la nanoestructura descrita a principio de este capítulo; un pozo cuántico de potencial conformado por InAs/AlSb, con un ancho de 10 nm .

El campo electrostático aplicado a la nanoestructura se varió desde $\phi(z) = 0.0\text{ kV/cm}$ hasta alcanzar los $\phi(z) = 500.0\text{ kV/cm}$; para fines ilustrativos mostramos los resultados obtenidos en distintos subdominios del campo electrostático externo aplicado en la nanoestructura, al final el espectro total de soluciones. Primeramente, en la figura 7.9 se muestra el barrido de $\phi(z) = 0.0\text{ kV/cm}$ a $\phi(z) = 50\text{ kV/cm}$, en esta figura se pueden observar resultados al aplicar campos electrostáticos con magnitudes fácilmente realizables en condiciones de laboratorio.

Se puede observar en la figura 7.9 que el parámetro de Rashba α_R muestra un comportamiento creciente, lo que sería de esperarse ya que al aumentar el campo eléctrico se aumenta la pendiente del la barrera de potencial.

Al realizar un barrido más extenso, ya que la herramienta así lo permite, de $\phi(z) = 0\text{ kV/cm}$ hasta $\phi(z) = 500\text{ kV/cm}$, se puede apreciar otros efectos más interesante, lo que es mostrado en la figura 7.11. El comportamiento mostrado en dicha figura es debido a que al aumentar $\phi(z)$ se logran vaciar los estados ligados de mayor energía, esto es realizado moviendo la pendiente de la banda de conducción hasta que la frontera inferior del pozo cuántico quede por debajo de la energía del estado ligado que se desea vaciar, otro argumento que soporta dicho comportamiento es el de la forma del estado base, el cual varía muy poco comparado con el caso de campos eléctricos menores ($\phi(z) < 150\text{ kV/cm}$). Valga recordar que tales magnitudes del campo eléctrico

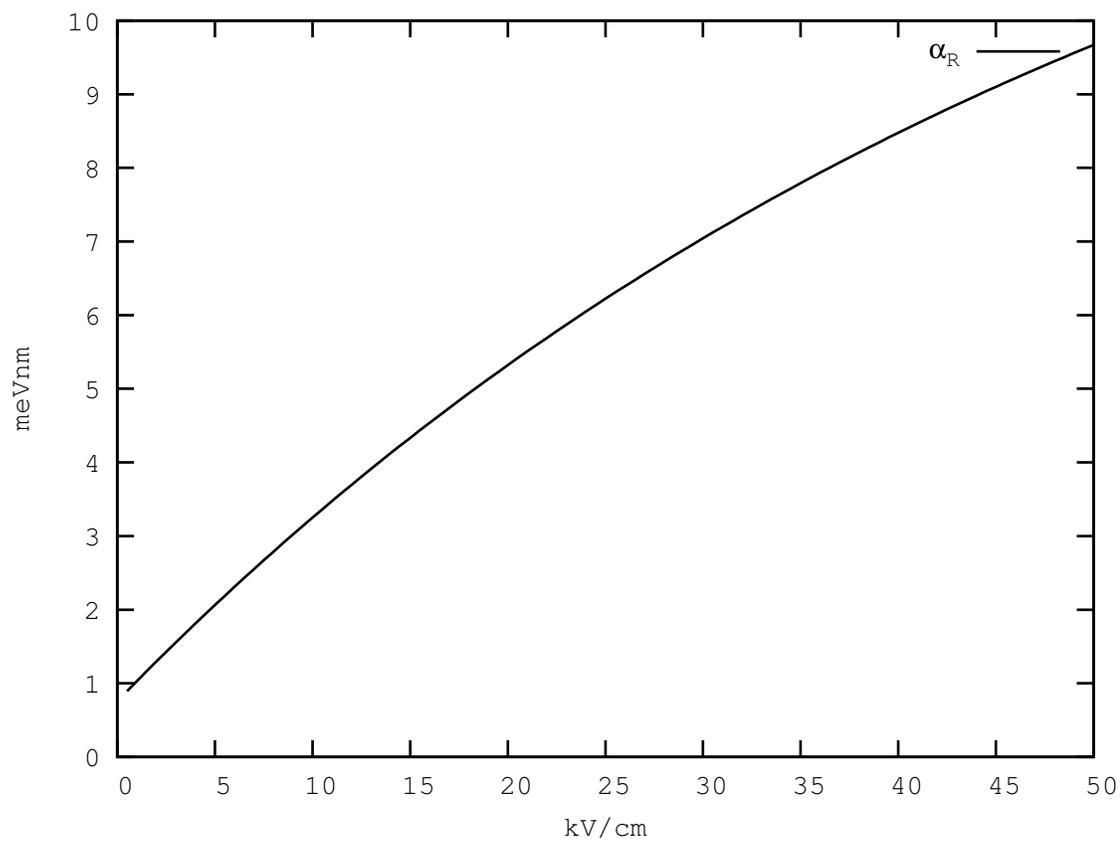


Figura 7.9: Se muestra la respuesta del parámetro de acoplamiento α_R de Rashba al ser variado el campo eléctrico aplicado de manera externa de $\phi(z) = 0.0 \text{ kV/cm}$ a $\phi(z) = 50.0 \text{ kV/cm}$.

sueles ser poco realistas para experimentos en laboratorios.

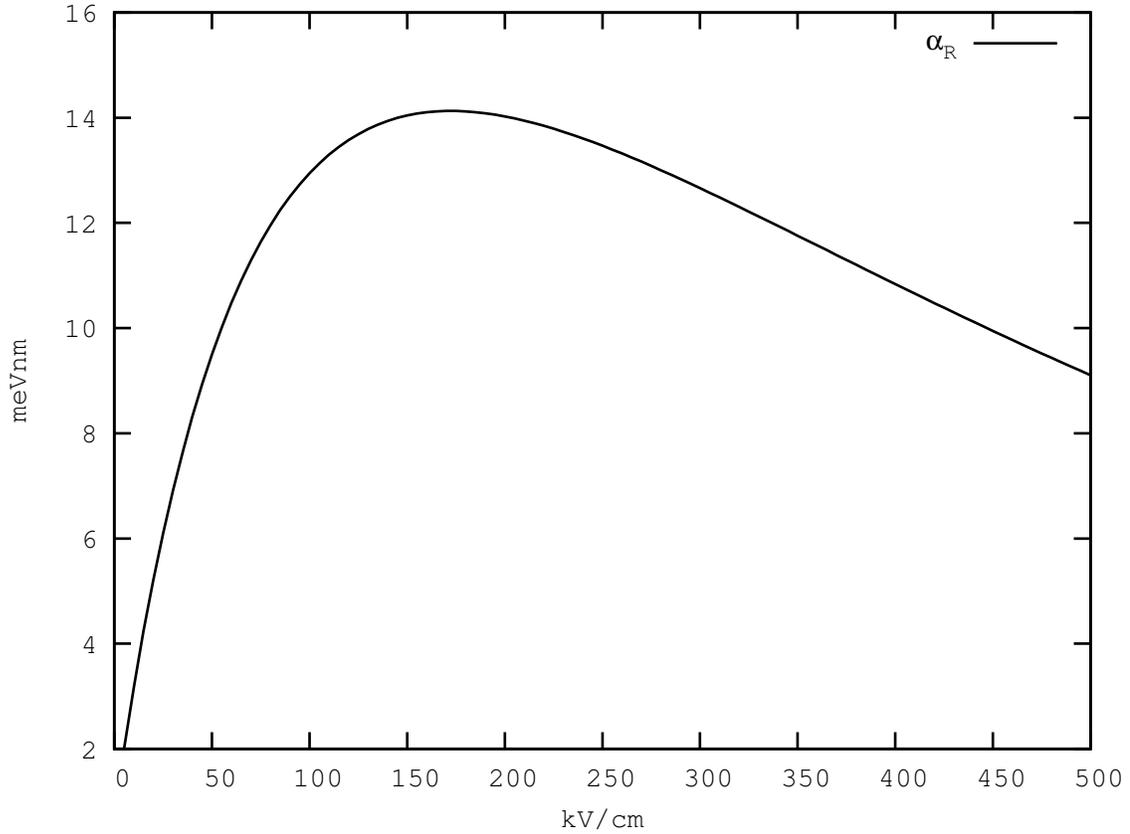


Figura 7.10: En esta figura se muestra el comportamiento del parámetro α_R de Rashba al variar el campo eléctrico externo de $\phi(z) = 0 \text{ kV/cm}$ hasta $\phi(z) = 500 \text{ kV/cm}$.

También se realizaron los cálculos de la dependencia de la α_R de Rashba con respecto al campo eléctrico externo, con una capa dopada con donadores (primeros 5 nm), con una concentración $Dop = 2.0 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. En este caso se pudo observar una disminución en el parámetro α_R , pero el comportamiento no cambió sustentablemente, como es mostrado en la figura 7.11.

En la figura 7.11 la disminución de el parámetro de Rashba (α_R) se le atribuye a que las cargas liberadas por el dopaje modulado logran atenuar a el campo electrostático externo como ya se mencionó en la sección pasada.

Se puede observar que el valor máximo de $\alpha_R = 14.310 \text{ meVnm}$ fue al aplicar un

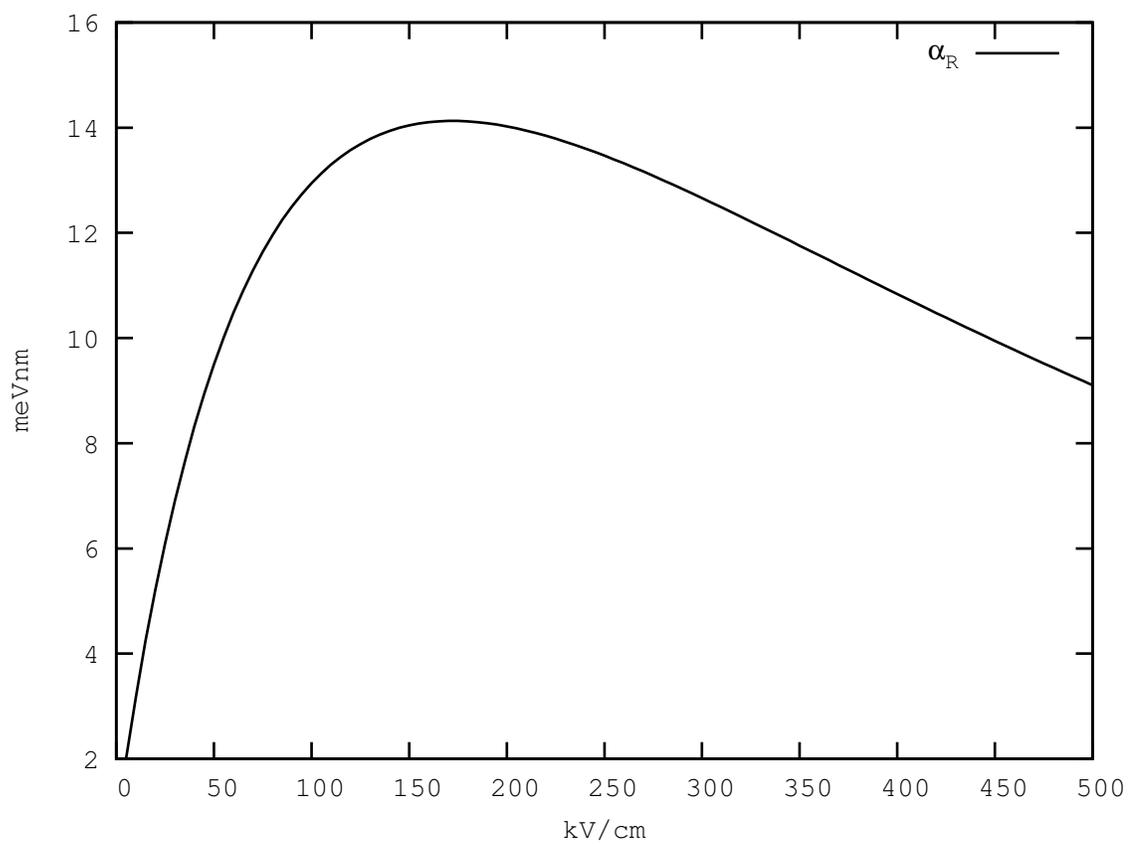


Figura 7.11: En esta figura se puede apreciar el comportamiento de el parámetro α_R de Rashba con respecto a la variación del campo eléctrico externo aplicado a la nanoestructura, estado esta dopada con un exceso de portadores de carga ($Dop = 2.0 \times 10^{16}$)

campo electrostático externo $\phi(z) = 170.0 \text{ kV/cm}$, y sin incluir el dopaje modulado; este es el máximo, pero el dopaje modulado es necesario para que exista el acoplamiento espín-órbita aún sin campo electrostático interno, ya que al incluir las impurezas donadoras se logra crear un campo electrostático interno. El valor máximo obtenido para α_R con una concentración de donadores $Dop = 2.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ se logró al aplicar un campo electrostático externo $\phi(z) = 175 \text{ kV/cm}$, el cual fue $\alpha_R = 14.101 \text{ meVnm}$.

7.2.3. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto a un campo eléctrico externo con dopaje modulado

En esta sección analizaremos el comportamiento del parámetro de Rashba α_R en función de un campo eléctrico externo, para el caso de una nanoestructura con distintas concentraciones de donadores de portadores de carga (dopaje modulado) en los primeros 5 nm . Esto con el fin de estudiar como el dopaje modulado (Dop) afecta el comportamiento del valor del parámetro de acoplamiento espín-órbita α_R con respecto a un campo electrostático externo ($\phi(z)$).

En la Figura 7.12 se muestran los resultados obtenidos al realizar los cálculos mencionados. Se puede observar que la cota superior esta dada por el caso en que no cuenta con dopaje modulado, esto es debido al atenuamiento del campo electrostático por los portadores liberados por el dopaje modulado.

El parámetro α_R de Rashba depende del promedio de la función de onda con una función que depende del recíproco de la derivada potencial de confinamiento ($V(z)$), como se muestra en la ecuación 4.14, por lo que al incrementar el dopaje (Dop) el potencial de confinamiento aumenta, lo que significa que su recíproco disminuye, por lo tanto también el valor promedio del parámetro de acoplamiento de espín-órbita, como se puede apreciar en la Figura 7.12.

En la siguiente subsección analizaremos el comportamiento de el parámetro α_R

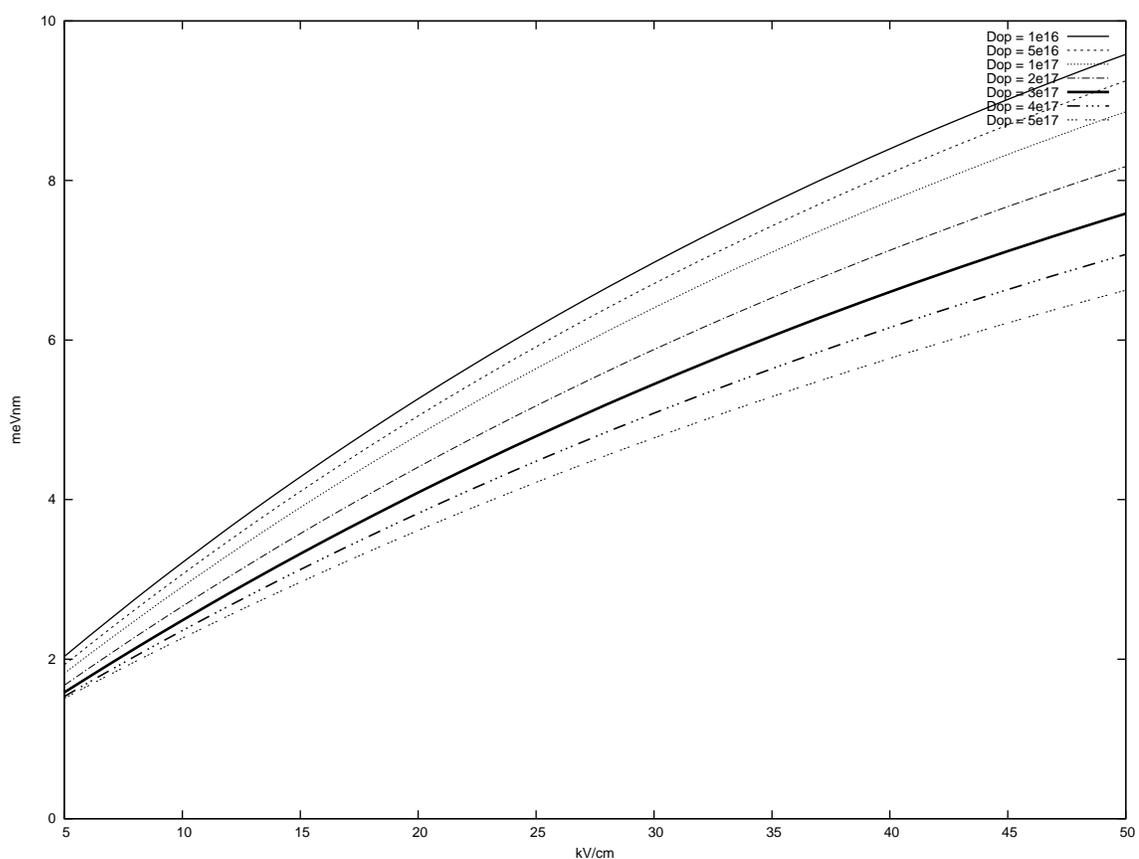


Figura 7.12: En esta figura se puede observar como se comporta el parámetro de acoplamiento espín-órbita (α_R) en función de un campo electrostático externo para distintas concentraciones de dopaje modulado (Dop).

de Rashba con respecto a la concentración de impurezas depositadas en los primeros 5 nm de la nanoestructura para distintos campos electrostáticos externos.

7.2.4. La dependencia del parámetro de Rashba con respecto al dopaje modulado a un campo eléctrico externo

En esta sección ilustraremos la dependencia del parámetro de acoplamiento espín-órbita con respecto al dopaje modulado realizado en uno de los extremos de la nanoestructura, esto para distintos campos electrostáticos externos $\phi(z)$.

Como ya se mencionó en la pasada sección al incrementar la densidad de los donadores de carga en la nanoestructura se observa una disminución en el parámetro α_R de Rashba, lo que se puede observar en la Figura 7.13.

Es importante notar que aún en ausencia de campo externo el parámetro α_r cuenta con un valor finito; también es interesante notar que entre mayor sea el campo electrostático el parámetro de acoplamiento espín-órbita α_R cuenta con un rango mayor de variación, por lo que se puede ajustar la concentración de donadores (Dop) para poder lograr las condiciones deseadas de control sobre la nanoestructura con respecto a el campo electrostático externo aplicado ($\phi(z)$).

En la siguiente sección se exponen las conclusiones de este trabajo de Tesis.

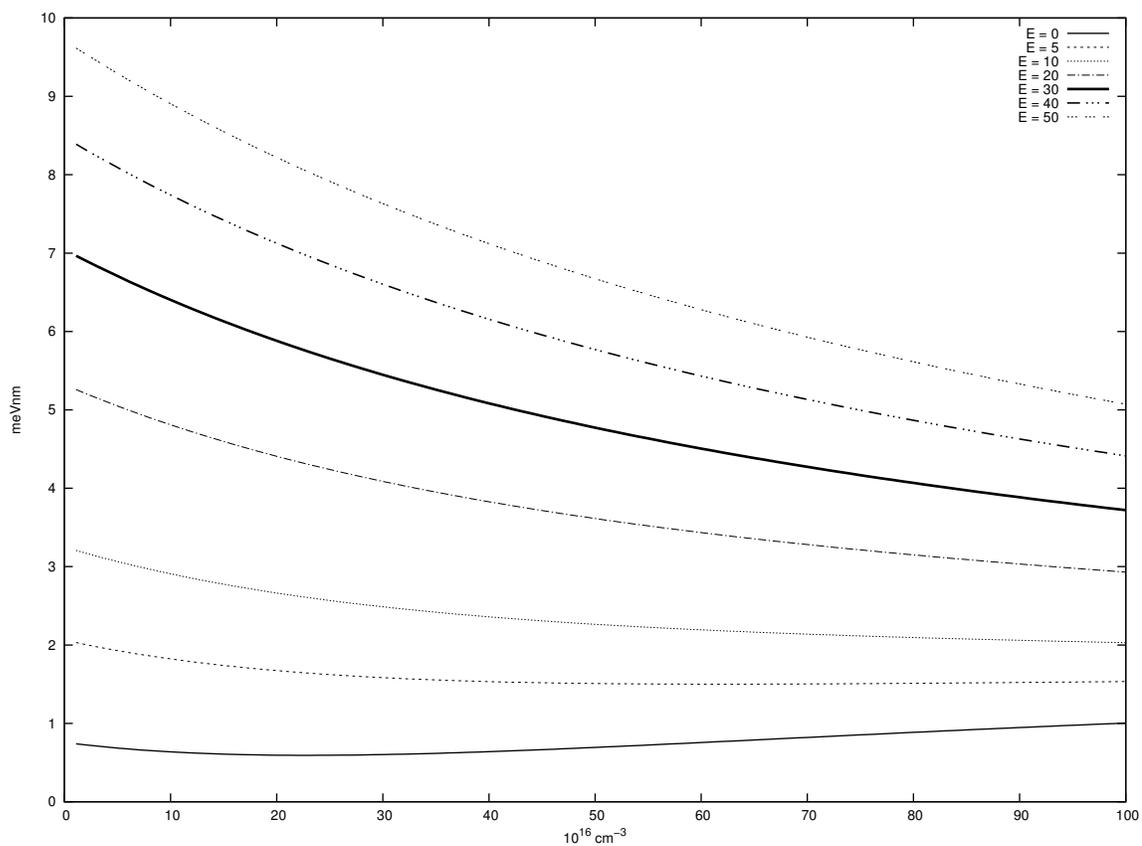


Figura 7.13: En esta figura se puede observar como se comporta el parámetro de acoplamiento espín-órbita (α_R) en función de la densidad de impurezas donadoras (Dop) para distintos campo electrostático externo.

8. Conclusiones

En la presente tesis se desarrolló un método computacional que podría ser de gran utilidad para el diseño de heteroestructuras semiconductoras, en particular las necesarias para contruir dispositivos espintrónicos, ya que podemos predecir el comportamiento del parámetro de Rashba (α_R) y su dependencia con campos eléctricos externos e impurezas introducidas a la heteroestructura mediante la técnica de dopaje modulado.

Se analizó el caso de un pozo finito de AlSb/InAs/AlSb, donde pudimos observar que existen valores de densidad de impurezas y de campos eléctricos con los que el parámetro de Rashba aumenta considerablemente, siendo de suma importancia la parte dependiente del campo eléctricos externo, ya que este nos podría ser útil para el desarrollo de el dispositivo propuesto por Datta-Das [8], el espín-FET (SFET, por sus siglas en inglés), en los que el campo eléctrico externo sería lo equivalente a un voltaje de compuerta, este SFET sería de dimensiones mas pequeñas que los que actualmente se encuentran en el mercado, y a su vez requerirían menor energía para su funcionamiento, ya que los electrones de conducción se encuentran confinado en un gas de electrones bidimensional donde el camino libre medio es largo, por lo que los electrones tendría menor perdida de energía así pues requiriendo menor energía para ser transportados de la fuente al drenaje.

El modelo fue empleado para analizar el comportamiento de la α_R en una heteroestructura semiconductor tipo pozo finito de potencial de InAs embebido entre dos barreras de AlSb, primero analizamos su dependencia con la densidad de impurezas donadoras diluidos en la barrera de la derecha, encontramos que para este sistema el valor máximo de $\alpha_R = 14.101 \text{ meVnm}$ cuando la estructura cuenta con

una densidad de carga electrónica $n_{2D} = 28.369 \times 10^{15} \text{ cm}^{-2}$ y una concentración de impurezas $Dop = 2.3 \times 10^{16} \text{ 1/cm}^3$, en el que dicha heteroestructura podría emplearse para crear un filtro de espín ya que rompe la degeneración en momento. El campo electrostático para lograr este valor ($\phi(z) = 170 \text{ kV/cm}$) es un poco alejado a lo que es posible lograr en el laboratorio, pero con un campo externo de $\phi(z) = 50 \text{ kV/cm}$ se podría llegar a obtener un valor de $\alpha_R = 9.470$ lo cual es un valor aceptable para futuras aplicaciones de estas nanoestructuras.

Bibliografía

- [1] Peter Y. Yu and Manuel Cardona. *Fundamentals of Semiconductors*. Springer, 4th edition, 2010.
- [2] J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano, and I. Zutic. Semiconductor Spintronics. *Acta Physica Slovaca* 57, 565 (2007), November 2007.
- [3] Shun Lien Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices*. Wiley-Interscience publication, 1995.
- [4] Roland Winkler. *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer, 2003.
- [5] John H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors*. Cambridge University Press, 1998.
- [6] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani. Spin-split subbands and magneto-oscillations in III-V asymmetric heterostructures. *Phys. Rev. B*, 50:8523–8533, Sep 1994.
- [7] E. J. Roan and S. L. Chuang. Linear and nonlinear intersubband electroabsorptions in a modulation-doped quantum well. *J. Appl. Phys.*, 69(5):3249–3260, March 1991.

- [8] Supriyo Datta and Biswajit Das. Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, 56(7):665–667, Feb 1990.
- [9] Yu A Bychkov and E I Rashba. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(33):6039, 1984.
- [10] S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, J. M. Daughton, S. von Molnár, M. L. Roukes, A. Y. Chtchelkanova, and D. M. Treger. Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future. *Science*, 294(5546):1488–1495, 2001.
- [11] I. A. Campbellac, A. Fertac, and R. Pomeroyb. Evidence for two current conduction iron. *Philosophical Magazine*, 15(137):977–983, August 2006.
- [12] M.I. Dyakonov and V.I. Perel. Possibility of Orienting Electron Spins with Current. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, 13:467, June 1971.
- [13] F. D. M. Haldane. Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015–2018, Oct 1988.
- [14] John Schliemann, Daniel Loss, and R. M. Westervelt. Zitterbewegung of Electronic Wave Packets in III-V Zinc-Blende Semiconductor Quantum Wells. *Phys. Rev. Lett.*, 94(20):206801, May 2005.
- [15] R. J. Elliott. Spin-Orbit Coupling in Band Theory—Character Tables for Some "Double" Space Groups. *Phys. Rev.*, 96:280–287, Oct 1954.
- [16] G. Dresselhaus, A. F. Kip, and C. Kittel. Spin-Orbit Interaction and the Effective Masses of Holes in Germanium. *Phys. Rev.*, 95:568–569, Jul 1954.

- [17] G. Dresselhaus. Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. *Phys. Rev.*, 100:580–586, Oct 1955.
- [18] F. Malcher, G. Lommer, and U. Rössler. Electron states in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heterostructures: Nonparabolicity and spin-splitting. *Superlattices and Microstructures*, 2(3):267–272, 1986.
- [19] R. Lassnig. $k \rightarrow p$ theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, 31:8076–8086, Jun 1985.
- [20] Fusayoshi J. Ohkawa and Yasutada Uemura. Hartree Approximation for the Electronic Structure of a p-Channel Inversion Layer of Silicon M. O. S. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 37:1325, 1974.
- [21] E. Bangert and G. Landwehr. Self-consistent calculations of electric subbands in p-type silicon inversion layers. *Surface Science*, 58(1):138–140, 1976.
- [22] Tsuneya Ando. Subband at GaAs/AlGaAs Heterojunctions and Quantum Wells. *J. Phys. Soc. Japan*, 54:1528–1536, 1985.
- [23] H. L. Stormer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and W. Wiegmann. Energy Structure and Quantized Hall Effect of Two-Dimensional Holes. *Phys. Rev. Lett.*, 51:126–129, Jul 1983.
- [24] J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, and P. J. Stiles. Observation of the zero-field spin splitting of the ground electron subband in gasb-inas-gasb quantum wells. *Phys. Rev. B*, 38:10142–10145, Nov 1988.
- [25] B. Das, D. C. Miller, S. Datta, R. Reifenberger, W. P. Hong, P. K. Bhattacharya,

- J. Singh, and M. Jaffe. Evidence for spin splitting in $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructures as $B \rightarrow 0$. *Phys. Rev. B*, 39:1411–1414, Jan 1989.
- [26] P. D. Dresselhaus, C. M. A. Papavassiliou, R. G. Wheeler, and R. N. Sacks. Observation of spin precession in GaAs inversion layers using antilocalization. *Phys. Rev. Lett.*, 68:106–109, Jan 1992.
- [27] Bernard Jusserand, David Richards, Guy Allan, Catherine Priester, and Bernard Etienne. Spin orientation at semiconductor heterointerfaces. *Phys. Rev. B*, 51:4707–4710, Feb 1995.
- [28] D. Richards, B. Jusserand, G. Allan, C. Priester, and B. Etienne. Electron spin-flip Raman scattering in asymmetric quantum wells: Spin orientation. *Solid-State Electronics*, 40(1–8):127–131, 1996. Proceedings of the Seventh International Conference on Modulated Semiconductor Structures.
- [29] G. Engels, J. Lange, Th. Schäpers, and H. Lüth. Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$ quantum wells for $B \rightarrow 0$. *Phys. Rev. B*, 55:R1958–R1961, Jan 1997.
- [30] Junsaku Nitta, Tatsushi Akazaki, Hideaki Takayanagi, and Takatomo Enoki. Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ Heterostructure. *Phys. Rev. Lett.*, 78:1335–1338, Feb 1997.
- [31] W Zawadzki and P Pfeffer. Spin splitting of subband energies due to inversion asymmetry in semiconductor heterostructures. *Semiconductor Science and Technology*, 19(1):R1, 2004.
- [32] Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth. Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped

- InxGa_{1-x}As/InP quantum wells for B→0. *Journal of Applied Physics*, 83(8):4324–4333, 1998.
- [33] Pojen Chuang, Sheng-Chin Ho, L. W. Smith, F. Sfigakis, M. Pepper, Chin-Hung Chen, Ju-Chun Fan, J. P. Griffiths, I. Farrer, H. E. Beere, G. A. C. Jones, D. A. Ritchie, and Tse-Ming Chen. All-electric all-semiconductor spin field-effect transistors. *Nature Nanotechnology*, 10(1):35–39, 2015.
- [34] Francisco Mireles and Sergio E. Ulloa. Acceptor binding energies in GaN and AlN. *Phys. Rev. B*, 58:3879–3887, Aug 1998.
- [35] Francisco Mireles and Sergio E. Ulloa. Zeeman splitting of shallow donors in GaN. *Applied Physics Letters*, 74(2):248–250, 1999.
- [36] F. Mireles. *Theoretical Studies of Impurity and Hole Subband States in Nitride Semiconductors*. PhD thesis, 1999.
- [37] M G Burt. The justification for applying the effective-mass approximation to microstructures. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 4(32):6651, 1992.
- [38] Francisco Mireles and Sergio E. Ulloa. Ordered Hamiltonian and matching conditions for heterojunctions with wurtzite symmetry: GaN/Al_xGa_{1-x}N quantum wells. *Phys. Rev. B*, 60:13659–13667, Nov 1999.
- [39] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., 3rd edition, 1962.
- [40] Evan O. Kane. Band structure of indium antimonide. *J. of Phys. and Chem. of Solids*, 1(4):249–261, 1957.
- [41] P. D. C. King, R. C. Hatch, M. Bianchi, R. Ovsyannikov, C. Lupulescu, G. Landolt, B. Slomski, J. H. Dil, D. Guan, J. L. Mi, E. D. L. Rienks, J. Fink,

- A. Lindblad, S. Svensson, S. Bao, G. Balakrishnan, B. B. Iversen, J. Osterwalder, W. Eberhardt, F. Baumberger, and Ph. Hofmann. Large Tunable Rashba Spin Splitting of a Two-Dimensional Electron Gas in Bi_2Se_3 . *Phys. Rev. Lett.*, 107:096802, Aug 2011.
- [42] E I Rashba and V I Sheka. Symmetry of energy bands in crystals of wurtzite type: II. Symmetry of bands including spin-orbit interaction. *Fiz. Tverd. Tela: Collected Papers*, 2(162):76, 1959.
- [43] G.E. Marques and L.J. Sham. Theory of space-charge layers in narrow-gap semiconductors. *Surface Science*, 113(1–3):131–136, 1982.
- [44] Hilding Sundqvist and George Veronis. A simple finite-difference grid with non-constant intervals. *Tellus*, 22:26–31.
- [45] I-H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang, and E. L. Hu. A self-consistent solution of Schrödinger-Poisson equations using a nonuniform mesh. *J. Appl. Phys.*, 68(8):4071–4076, October 1990.
- [46] J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers, T. M. Klapwijk, and G. Borghs. Spin-orbit interaction in a two-dimensional electron gas in a InAs/AlSb quantum well with gate-controlled electron density. *Phys. Rev. B*, 57:11911–11914, May 1998.

A. Apéndice A: Método de diferencias finitas

El método de diferencias finitas consiste en discretizar la(s) dimensión(es) de interés con una malla, para así poder efectuar de una manera aproximada, por medio de algoritmos generalmente computacionales, a las distintas operaciones que regularmente se efectúan en espacios continuos.

Diferenciación numérica

Expandiendo a la función $f(z)$ en su serie de Taylor alrededor de $(z + h)$ tenemos que:

$$f(z + h) = f(z) + hf'(z) + \frac{1}{2!}h^2f''(z) + \frac{1}{3!}h^3f'''(z) + \dots \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{f(z + h) - f(z)}{h} = f'(z) + \frac{1}{2!}hf''(z) + \frac{1}{3!}h^2f'''(z) + \dots \quad (\text{A.2})$$

Por otro lado expandiendo a la función $f(z)$ alrededor de $(z - h)$ obtenemos:

$$f(z - h) = f(z) - hf'(z) + \frac{1}{2!}h^2f''(z) - \frac{1}{3!}h^3f'''(z) + \dots \quad (\text{A.3})$$

$$\frac{f(z) - f(z - h)}{h} = f'(z) - \frac{1}{2!}hf''(z) + \frac{1}{3!}h^2f'''(z) - \dots \quad (\text{A.4})$$

Restando la ecuación A.3 a la ecuación A.1 tenemos que:

$$f(z + h) - f(z - h) = 2hf'(z) + \frac{2}{3!}h^3f'''(z) + \dots \quad (\text{A.5})$$

de la cual al dividir la ecuación por $2h$, resulta la siguiente ecuación:

$$\frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} = f'(z) + \frac{1}{3!}h^2 f'''(z) + \dots \quad (\text{A.6})$$

Si nos quedamos a segundo orden en h en la ecuación A.2 tenemos la fórmula de diferenciación finita progresiva:

$$f'(z) = \frac{f(z+h) - f(z)}{h} \quad (\text{A.7})$$

Similarmente de la ecuación A.4 obtenemos la fórmula de diferenciación regresiva:

$$f'(z) = \frac{f(z) - f(z-h)}{h} \quad (\text{A.8})$$

y de la ecuación A.6 quedándonos a segundo orden en h tenemos la fórmula de diferenciación centrada:

$$f'(z) = \frac{f(z+h) - f(z-h)}{2h} \quad (\text{A.9})$$

Con estas formulas podemos obtener derivadas en puntos medios de una malla no uniforme con la siguiente fórmula:

$$f'_{i+\frac{1}{2}} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} \quad (\text{A.10})$$

o con

$$f'_{i-\frac{1}{2}} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \quad (\text{A.11})$$

donde $f_i = f(z_i)$, $h_i = z_{i+1} - z_i$ y $f_{i\pm\frac{1}{2}} = f(\frac{1}{2}(z_x + z_{i\pm 1}))$, ahora en los puntos de la malla obtenemos:

$$f'_i \approx \frac{f_{i+\frac{1}{2}} - f_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i-1})} \quad (\text{A.12})$$

Ecuaciones diferenciales

La ecuación de Schrödinger y Poisson tienen el mismo operador de diferenciación del tipo:

$$\frac{d}{dz} \left(\alpha(z) \frac{d}{dz} \right) \theta(z) \quad (\text{A.13})$$

utilizando dos veces la aproximación a de diferenciación centrada (ecuación A.12) obtenemos que:

$$\frac{d}{dz} \left(\alpha \frac{d\theta}{dz} \right) \approx \frac{(\alpha \frac{d\theta}{dz})_{i+\frac{1}{2}} - (\alpha \frac{d\theta}{dz})_{i-\frac{1}{2}}}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i-1})} \quad (\text{A.14})$$

por lo tanto tenemos que:

$$\frac{d}{dz} \left(\alpha \frac{d\theta}{dz} \right) \approx \frac{\alpha_{i+\frac{1}{2}} \left(\frac{\theta_{i+1} - \theta_i}{h_i} \right) - \alpha_{i-\frac{1}{2}} \left(\frac{\theta_i - \theta_{i-1}}{h_{i-1}} \right)}{\frac{1}{2}(h_i + h_{i-1})} \quad (\text{A.15})$$

reagrupando términos resulta que:

$$\frac{d}{dz} \left(\alpha \frac{d\theta}{dz} \right) \approx \frac{2}{h_i + h_{i-1}} \left[\left(\frac{\alpha_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}} \right) \theta_{i-1} - \left(\frac{\alpha_{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}} + \frac{\alpha_{i+\frac{1}{2}}}{h_i} \right) \theta_i + \left(\frac{\alpha_{i+\frac{1}{2}}}{h_i} \right) \theta_{i+1} \right] \quad (\text{A.16})$$