

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA
DE MÉXICO



CENTRO DE NANOCIENCIAS y
NANOTECNOLOGÍA

FASE GEOMÉTRICA EN
SISTEMAS CUASI-
BIDIMENSIONALES CON
ACOPLAMIENTO
ESPÍN-ÓRBITA

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO
DE:

Licenciado en Nanotecnología
con profundización en
Nanoestructuras

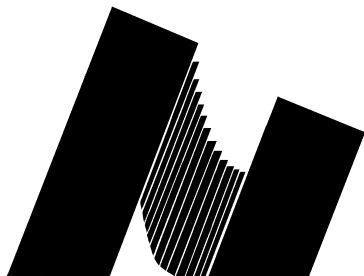
PRESENTA:

José Omar Ledesma Martín

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Ensenada B.C. Agosto de 2018





Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA



LICENCIATURA EN NANOTECNOLOGÍA
Nanoestructuras

FASE GEOMÉTRICA EN SISTEMAS CUASI-BIDIMENSIONALES CON ACOPLAMIENTO ESPÍN-
ÓRBITA

Tesis
QUE PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE:
LICENCIADO EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:
JOSÉ OMAR LEDESMA MARTIN

DIRECTOR DE TESIS
DR. JESÚS ALBERTO MAYTORENA CÓRDOBA

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA AGOSTO 2018

FASE GEOMÉTRICA EN SISTEMAS CUASI-BIDIMENSIONALES CON ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA

José Omar LEDESMA MARTIN

Licenciatura en Nanotecnología
con profundización en nanoestructuras

Aprobada por: Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova (Director)
Dr. Ernesto Cota Araiza (Sinodal)
Dr. Fernando Rojas Iñiguez (Sinodal)
Dr. Manuel Herrera Zaldivar (Sinodal)
Dra. Priscila Elizabeth Iglesias Vázquez (Sinodal)

Fecha de aprobación: Agosto 2016

Declaración de autoría

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias. Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

José Omar Ledesma Martín:

Fecha:

«Don't Panic»

Douglas Adams, *The Hitchhiker's Guide to the Galaxy*.

Resumen

José Omar LEDESMA MARTIN

*FASE GEOMÉTRICA EN SISTEMAS
CUASI-BIDIMENSIONALES CON ACOPLAMIENTO
ESPÍN-ÓRBITA*

Desde el descubrimiento de la fase geométrica o fase de Berry por el físico inglés Michael Berry en 1984, se han realizado una gran cantidad de trabajos sobre sus fundamentos teóricos, manifestaciones en experimentos y posibles aplicaciones en distintas áreas de la física.

La Fase de Berry es el resultado de la evolución adiabática de un estado cuántico sobre una trayectoria cerrada en el espacio de los parámetros del hamiltoniano del sistema dependientes del tiempo.

Este trabajo se centra en el cálculo y discusión de fases de Berry para distintos sistemas aproximables por un hamiltoniano cuántico de dos niveles, entre los que se encuentran materiales con acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus en cristales bidimensionales con distintas orientaciones, semiconductores con un campo perpendicular y SOC tipo Rashba, útiles para describir semiconductores ferromagnéticos y un sistema de Dirac de dos niveles, usado para describir aislantes de Chern entre otros.

En su artículo de 1984 Berry muestra el caso de la fase geométrica para un electrón que interactúa con un campo magnético externo de magnitud constante que cambia de dirección adiabáticamente obteniendo una fase no trivial igual a la mitad del ángulo sólido encerrado por la trayectoria del campo magnético, siendo π si la trayectoria encierra el punto de degeneración. Es posible expresar al acoplamiento espín-órbita como un campo magnético dependiente del momento, ya que debido a la similitud entre éste y el caso del artículo de Berry así como a la similitud en la forma de las estructuras de bandas cerca de la degeneración los resultados obtenidos son parecidos.

Agradecimientos

Después de estos ~ 5 años quiero agradecer a la Universidad Nacional Autónoma de México y en particular al Centro de Nanociencias y Nanotecnología por esta increíble oportunidad.

A mi asesor el doctor Jesus Alberto Maytorena Córdova por dirigir este trabajo, por sus consejos, paciencia, tiempo y conversaciones, sobre física o sobre cualquier otro tema entre espías rusos y pintura mexicana.

A los miembros del comité los profesores: el Dr. Ernesto Cota Araiza, el Dr. Fernando Rojas Iñiguez, el Dr. Manuel Herrera Zaldivar y la Dra. Priscila Elizabeth Iglesias Vázquez. Por tomarse el tiempo de leer mi tesis con tanta premura y por sus comentarios.

A la Dra. Laura Viana Castrillón por su trabajo en esta licenciatura.

A la bióloga María Isabel Pérez Monfort, por siempre buscar la forma de ayudar aunque esté fuera de su responsabilidad.

A mis profesores de quienes me llevo mucho, así como a todo el personal que trabaja en la licenciatura y en general en el CNyN, que hacen que esto sea posible.

A mi familia, a mi mamá a quien le debo la vida y más, por haberme mantenido todo este tiempo y apoyarme a pesar de todo. A mi papá por haberme convencido de venir.

A Montserrat y a Uriel por siempre estar ahí y por todo lo demás durante estos últimos 11 años.

A mis amigos en Ensenada que han sido mi familia aquí a lo largo de todos este tiempo y que hicieron de este, un embarque rocambolesco, desde *Casa de Gisela* hasta *La Nube*: Ana, Carlos S., Diana, Emili, Gis, Iván, Jairo, Karia, Laura, Lis, Mariana, Mony, Osmar, Tessa y Victor. Por todo lo que vivimos aquí y en especial por la comida, desde California hasta Cancún.

A mis compañeras de casa, a Gis y a Mariana por abrirme las puertas de su casa, posteriormente a Diana por el apoyo para conseguir bastantes kilos extra y los viajes al hospital, esporádicamente a Karia y a su tanque y finalmente a AniBon por asegurarse de que despierte a las 6 am.

Espero que todos sepan que en unas cuantas lineas no puedo expresar mi gratitud, porque es mucha y por que no soy realmente bueno escribiendo.

Agradezco estar en tan privilegiada posición.

Índice general

Resumen	XI
Agradecimientos	XIII
Índice general	XV
1. Introducción	1
2. Fase de Berry	5
2.1. Antecedentes	5
2.1.1. Fase de Pancharatnam	5
2.1.2. La aproximación de Born-Oppenheimer y el teorema adiabático	7
2.2. Derivación de la fase de Berry	9
2.3. Conexión y curvatura de Berry	10
2.4. Partícula con espín 1/2 en un campo magnético de magnitud constante.	13
2.5. Fases geométricas	14
3. Sistema cuántico de dos niveles (TLS)	17
3.1. Propiedades espectrales del hamiltoniano de un TLS	17
3.2. Curvatura y conexión de Berry	19
4. Acoplamiento espín-órbita en gases electrónicos bidimensionales	23
4.1. Espín	23
4.1.1. Degeneración en sistemas con espín 1/2	24
4.2. Acoplamiento espín-órbita (SOC)	25
4.2.1. SOC en sólidos. Interacciones de Rashba (R) y Dresselhaus (D[hkl])	26
4.3. Polarización de espín para un TLS	28
4.4. Hamiltonianos generalizados para acoplamiento espín-órbita	30
4.4.1. Hamiltoniano lineal en k para un gas de electrones bidimensional (2DEG) con SOC.	30
5. Cálculo de fases geométricas en sistemas bidimensionales.	35
5.1. Fases de Berry para 2DEG con SOC R+D[hkl]	35
5.1.1. SOC de Rashba	36
5.1.2. R+D[111]	36
5.1.3. R+D[110]	36
5.1.4. R+D[001]	37
5.1.5. Caso con $\Omega_z = 0$	38
5.2. Grafeno y bicapa de grafeno	39

5.2.1.	Hamiltoniano de una lámina de grafeno (semimetal de Weyl). . . .	40
5.2.2.	Hamiltoniano de una bicapa de grafeno (sistema de Dirac masivo)	41
5.3.	Hamiltoniano de Dirac (aislante de Chern).	42
5.4.	Sistema tipo Rashba con un campo perpendicular.	43
5.5.	Sistemas con SOC R+D[hkl] en un campo magnético externo.	45
5.5.1.	R+D[111]+B	46
5.5.2.	R+D[110]+B	47
5.5.3.	R+D[001]+B	48
6.	Conclusiones	51
A.	Funciones de onda y energías propias del hamiltoniano de dos niveles	53
B.	Derivación de la contribución espín-órbita a partir de una aproximación cuasi-relativista a la ecuación de Dirac	57
	Bibliografía	59

Capítulo 1

Introducción

La fase geométrica o fase de Berry es un concepto esencial de la mecánica cuántica y que a pesar de ser fundamental, su importancia como fenómeno general no fue reconocida sino hasta su descripción por el físico inglés Michael Berry en 1984, más de medio siglo después del establecimiento de la teoría cuántica [1].

Era sabido que la función de onda de un estado cuántico que evoluciona adiabáticamente en el espacio de parámetros adquiere dos fases: la primera, conocida como fase dinámica, expresa la dependencia temporal de los estados estacionarios del sistema; la segunda fase, de carácter geométrico, depende de la trayectoria recorrida en el espacio de parámetros. En la mayoría de los casos la fase general de un estado puede anularse con la transformación de norma correcta, pero cuando la trayectoria en el espacio de parámetros es cerrada, la segunda fase es la llamada fase de Berry y se vuelve invariante ante transformaciones de norma [1].

El concepto de evolución adiabática hace referencia al teorema adiabático, propuesto inicialmente por el físico austriaco Paul Ehrenfest, reformulado y generalizado por Max Born. Dicho teorema establece que en un sistema en un eigen-estado instantáneo que evolucione bajo acción de una perturbación adiabática permanecerá en el mismo eigen-estado instantáneo respecto al nuevo hamiltoniano [2].

Berry no fue el primero en descubrir una fase geométrica como resultado de una evolución cíclica. En 1959, el físico hindú S. Pancharatnam descubrió que al llevar a un haz de luz a través de distintos estados de polarización de forma cíclica, aparecía una fase independiente a la fase asociada a la propagación de un haz a través del mismo camino óptico. La fase de Berry es una generalización de la fase de Pancharatnam [3].

Tras el descubrimiento de Berry se han encontrado fases geométricas en diversos campos, que van desde la cosmología hasta la dinámica de electrones de Bloch en física de estado sólido, donde están relacionadas con múltiples conceptos como el efecto Hall de espín (SHE), el efecto Hall cuántico (QHE), el efecto Hall anómalo (AHE), el efecto Hall de valle (VHE), el efecto Aharonov-Bohm, el efecto Aharonov-Casher, la teoría de aislantes topológicos, la teoría moderna de la polarización, la teoría de la magnetización

de orbitales y el efecto Nerst, entre otros [4, 5, 6, 7, 8].

La fase geométrica ha sido medida experimentalmente en diversos sistemas, como neutrones en campos magnéticos helicoidales o en imanes de una sola molécula, donde a causa de la interferencia de fases geométricas aparecen resonancias en el tunelaje [9, 10]. En 2017 Zhenxing Zhang *et. al.* midieron fases geométricas en q-bits superconductores y propusieron protocolos para tomar atajos al teorema adiabático [11].

Murakawa *et. al.* [12] midieron una fase de Berry no trivial en un semiconductor en bulto con acoplamiento espín-órbita de Rashba, donde debido a la gran separación de bandas lograda y a que el material es tridimensional es posible el estudio de la fase de Berry sobre la evolución del espín en una trayectoria en el espacio.

La fase de Berry es consecuencia de llevar adiabáticamente un estado cuántico $|n(\mathbf{R})\rangle$ sobre una trayectoria cerrada C en un espacio de parámetros \mathbf{R} . La fase adquirida por el estado etiquetado por n al recorrer una curva C en \mathbf{R} está dada por:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R}, \quad (1.1)$$

donde $d\mathbf{R}$ es el diferencial de línea a lo largo del contorno C en \mathbf{R} y \mathcal{A}_n es una cantidad vectorial que relaciona dos estados cercanos en el espacio de parámetros, $\langle n(\mathbf{R})|n(\mathbf{R} + d\mathbf{R})\rangle$.

En este trabajo se tratan las fases geométricas de diversos sistemas cuánticos descritos por un hamiltoniano para sistemas de dos niveles (TLS) que permite el estudio de semiconductores con gases de electrones cuasi-bidimensionales (2DEG) con acoplamiento espín-órbita (SOC) de Rashba, Dresselhaus y la combinación de ambos, este hamiltoniano, además de la adición de diversos factores como campos magnéticos externos o impurezas magnéticas, puede también modelar de sistemas como aislantes topológicos de Chern, grafeno en la cercanía de los puntos de alta simetría y sistemas semiconductores cuasi-bidimensionales ferromagnéticos con efecto Hall anómalo y en general cualquier modelo con una separación de dos bandas en la cercanía de estas.

En el siguiente capítulo se estudiará la deducción de esta fase y algunas de sus propiedades.

Objetivo

El objetivo de este trabajo es estudiar la fase geométrica y su derivación, así como su cálculo mediante el hamiltoniano para un TLS del tipo $H = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}$, en sistemas con acoplamiento espín-órbita de Rashba o Dresselhaus, así como otros sistemas modelables con dicho hamiltoniano como son los sistemas con SOC en campos magnéticos, un semiconductor ferromagnético con efecto tipo Rashba, una lámina y una bicapa de grafeno y un aislante de Chern. Así mismo comparar los resultados obtenidos con aquellos

reportados en la literatura, buscando destacar la importancia de la fase de Berry, así como su relación con propiedades como el efecto Hall anómalo. Para esto se calculan:

- Un hamiltoniano de dos niveles, sus propiedades espectrales y la forma que toman la conexión, curvatura y fase de Berry para este hamiltoniano.
- Un caso particular de dicho hamiltoniano para sistemas con SOC lineales en k junto con su conexión, curvatura y fase de Berry.
- Una generalización del hamiltoniano lineal en k con la adición de campos magnéticos externos con sus respectivas conexión y fase de Berry.
- Fases de Berry para diversos sistemas, usando los hamiltonianos y formulas mencionadas en los puntos anteriores.

El presente trabajo consta de 6 capítulos, este Capítulo 1 es una introducción al tema y describe el objetivo del trabajo. El Capítulo 2 trata al teorema adiabático y a la fase de Pancharatnam como antecedentes y explica la fase de Berry, su deducción y su relación con la conexión y la curvatura de Berry. El Capítulo 3 trata sobre el hamiltoniano para TLS, sus propiedades espectrales y la forma que pueden tomar la curvatura, la conexión y la fase de Berry a partir de dichos estados. El Capítulo 4 introduce al acoplamiento espín-órbita como consecuencia de una aproximación cuasi-relativista en la Ecuación de Dirac y presenta a las interacciones de Rashba y Dresselhaus así como una particularización del hamiltoniano del TLS para sistemas con acoplamiento espín-órbita lineal en k . El Capítulo 5 está dedicado a los resultados, fases geométricas de sistemas con acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus lineal en k , una lámina de grafeno, una bicapa de grafeno, un aislante de Chern, un sistema ferromagnético con acoplamiento tipo Rashba y sistemas con acoplamiento espín-órbita en campos magnéticos externos. Por último el Capítulo 6 resume y expone las conclusiones de este trabajo.

Capítulo 2

Fase de Berry

2.1. Antecedentes

Un sistema cuántico que evoluciona adquirirá, además de la conocida fase dinámica, una fase de carácter geométrico; a pesar de que Berry fue el primero en reconocer la presencia de esta fase como un aspecto generalizado en sistemas cuánticos existieron anticipaciones como la fase de Pancharatnam [13, 1].

2.1.1. Fase de Pancharatnam

En 1956 Shivaramakrishnan Pancharatnam descubrió que al propagar radiación electromagnética a través de diferentes estados de polarización de forma cíclica, ésta adquiere una fase distinta a la fase asociada a la trayectoria recorrida en el espacio real [3].

La polarización de una onda electromagnética caracteriza la dirección de su campo eléctrico. La forma más general de polarización es la elipse, donde la polarización lineal es el caso en que uno de los semi-ejes de la elipse es nulo y la polarización circular el caso en que los semi-ejes son iguales. En la Figura 2.1 es posible observar que esta elipse puede caracterizarse a través de la intensidad I , el ángulo de inclinación ψ y el ángulo de elipticidad η , donde la intensidad $I = (a^2 + b^2)/4$ (ver Figura 2.1) [14].

Clásicamente, pueden representarse todos los estados de polarización de la luz por medio de puntos en la esfera de Poincaré, definida por la Ecuación:

$$I^2 = Q^2 + U^2 + V^2, \quad (2.1)$$

donde I es la intensidad, que junto con Q , U y V puede definir el estado de polarización de una onda y son conocidos como parámetros de Stokes. Las definiciones para estos en

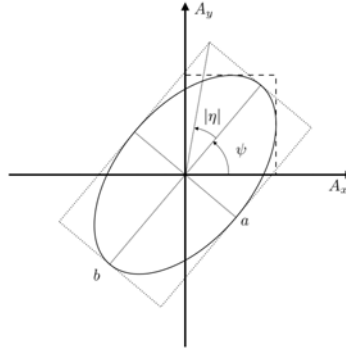


FIGURA 2.1: Elipse de polarización.

función de I , ψ y η son:

$$Q = pI \cos(2\eta) \cos(2\psi), \quad (2.2a)$$

$$U = pI \cos(2\eta) \sin(2\psi), \quad (2.2b)$$

$$V = pI \sin(2\eta), \quad (2.2c)$$

donde p expresa el grado de polarización de la onda. De esta forma puede representarse a una onda completamente polarizada como un punto en la superficie de esfera de Poincaré. El número 2 que precede a ψ representa el hecho de que cualquier elipse es indistinguible de sí misma rotada π radianes, mientras que el 2 que precede al ángulo η se debe a la indistinguibilidad de una elipse consigo misma después de intercambiar los semi-ejes y ser girada $\pi/2$ radianes.

Pancharatnam buscaba las diferencias de fase entre polarizaciones distintas, una de sus contribuciones fue determinar que dos estados estaban en fase cuando estos al interferir tenían un máximo de intensidad. Al estar en fase dos estados de polarización distintos se define una conexión entre estos, esta es llamada conexión de Pancharatnam.

La conexión de Pancharatnam no es transitiva, es decir si un haz de luz cambia cíclicamente su estado de polarización pasando por los estados A, B, C y regresando a A, si A está en fase con B y B está a su vez en fase con C, el estado inicial A, no necesariamente está en fase con el estado final A' y la fase entre ambos será igual a la mitad del ángulo sólido contenido por la trayectoria recorrida por el haz en la esfera de Poincaré [3, 15].

La fase descubierta por Pancharatnam tiene un carácter geométrico y Berry encontró la relación de esta fase con la fase de Berry y estableció que el experimento de llevar a un haz de luz a través de distintos estados de polarización es el análogo óptico del efecto Aharonov-Bohm [16].

2.1.2. La aproximación de Born-Oppenheimer y el teorema adiabático

Las soluciones analíticas exactas a problemas cuánticos, son poco comunes y suele ser necesario recurrir a aproximaciones.

La aproximación de Born-Oppenheimer supone que un fenómeno ocurre en un régimen temporal mucho menor que otro; esta idea puede ilustrarse en un sistema cristalino, donde al notarse que los electrones se mueven a velocidades mucho mayores que los núcleos se aproxima la velocidad de estos a cero, asumiendo que su velocidad es tan lenta que los electrones se ajustan instantáneamente a los cambios de posición de los núcleos, esto simplifica el cálculo anulando los términos de energía cinética de los núcleos y volviendo constantes las distancias entre estos. El teorema adiabático es una extensión de esta idea a otras situaciones donde es posible hacer distinciones entre la velocidad de distintos procesos en un sistema.

Una forma fácil de ilustrar esta aproximación fuera del ámbito de la mecánica cuántica es a través de un péndulo simple de longitud L oscilando en un plano dentro de una caja. El estado del péndulo puede alterarse de diversas formas, como moviendo la caja, o variando la longitud del péndulo. Al oscilar, el péndulo tiene un periodo $T = 2\pi\sqrt{L/g}$, si se altera la longitud lentamente, el periodo variará como $T(t) = 2\pi\sqrt{L(t)/g}$, pero el péndulo oscilará dentro del mismo plano y su movimiento será predecible. En cambio si la longitud cambia bruscamente, el resultado podría llegar a ser difícil de predecir.

En este experimento pueden observarse dos tiempos: uno relacionado al periodo de oscilación T y otro a la perturbación t . El cambio es adiabático cuando $t \gg T$ ó $T/t \rightarrow 0$.

El teorema adiabático fue formulado como lo conocemos por Max Born y comprobado en 1928 por Max Born y Vladimir Fock en "*Beweis des Adiabatensatzes*" (Prueba del Teorema Adiabático) en el volumen 51 del *Zeitschrift für Physik A*, meses después de la publicación de '*On the quantum theory of molecules*' (Sobre la teoría cuántica de las moléculas). El teorema propuesto por Born y Fock enunciaba que:

"Un estado físico permanece en su eigenestado instantáneo si la perturbación que actúa sobre él es suficientemente lenta y hay una brecha entre su valor propio y el resto del espectro del Hamiltoniano."

Esto nos dice que si una partícula se encontraba en el estado n de su hamiltoniano inicial y este es perturbada "lentamente" hasta llegar a un hamiltoniano final, entonces, el estado final será el mismo estado n , pero del hamiltoniano final [17, 18].

El problema de un electrón en un pozo cuadrado de potencial infinito puede ilustrar la aplicación del teorema adiabático. En su estado base, la función de onda Ψ tiene la extensión $\lambda/2$ al tiempo 0, como puede verse en la Figura 2.2. Para este estado, la

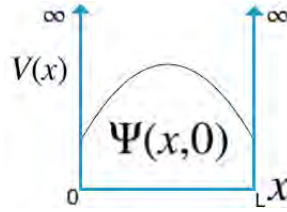


FIGURA 2.2: Función de onda del estado base de un electrón en un pozo cuadrado infinito en $t = 0$.

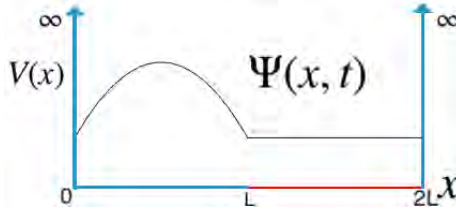


FIGURA 2.3: Función de onda del estado base de un electrón en un pozo cuadrado infinito, después de desplazar la pared derecha hasta duplicar el ancho bruscamemente

función de onda Ψ es:

$$\Psi_1(x, 0) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right). \quad (2.3)$$

Si a este sistema se le aplica una perturbación que duplique al ancho del pozo instantáneamente, moviendo la pared de la derecha, la forma de la función de onda sería en el lado izquierdo la función senoidal, mientras que al lado derecho sería una línea recta, como puede verse en la Figura 2.3.

La función de esta línea puede obtenerse por una serie de Fourier como:

$$f(x) = \frac{L}{\pi} + \frac{L}{2} \sin x - \frac{2L}{\pi} \sum_{n \in 2\mathbb{N}} \left(\frac{\cos(nx)}{n^2 - 1} \right). \quad (2.4)$$

No obstante, si el cambio sucede adiabáticamente, dando tiempo a la función de onda para adaptarse lentamente a la forma del potencial, la función conservará su forma, pero respecto a los nuevos parámetros, como se ilustra en la Figura 2.4, teniendo la forma:

$$\Psi_1(x, t) = \sqrt{\frac{1}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{2L}\right). \quad (2.5)$$

Como puede verse que las Ecuaciones (2.3) y (2.5) tienen la misma forma funcional y siguen en el estado de energía basal debido a que la perturbación fue adiabática, mientras que la Ecuación (2.4) tiene una estructura completamente distinta.

El teorema adiabático es una condición necesaria para la fase de Berry, que como

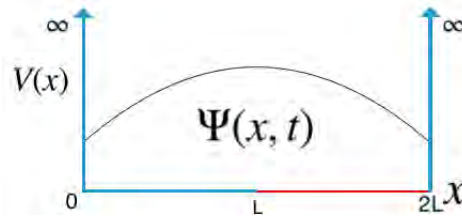


FIGURA 2.4: Función de onda del estado base de un electrón en un pozo cuadrado infinito, después de desplazar la pared derecha hasta duplicar el ancho, adiabáticamente

se verá a continuación, está reflejado en el uso de los estados instantáneos del hamiltoniano.

2.2. Derivación de la fase de Berry

Al transportar un estado de forma adiabática por una trayectoria cerrada, este adquirirá un factor dependiente de la trayectoria tomada y de la geometría del espacio.

Partiendo un hamiltoniano $H(\mathbf{R})$ dependiente del vector de parámetros funciones del tiempo, $\mathbf{R} = (R_1(t), R_2(t), \dots, R_n(t))^*$ con al menos un estado $|n, \mathbf{R}\rangle$ con energía $E_n(t)$ discreta y no degenerada, debido a que una degeneración podría dar lugar a un cambio de estado, saliendo así de las condiciones del teorema adiabático. se sabe que al cambiar \mathbf{R} en el tiempo, $|n, \mathbf{R} + \Delta\mathbf{R}\rangle$ no es una solución exacta a la Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, pero si \mathbf{R} cambia *suficientemente lento* el sistema no cambiará de un estado a otro, sino que el estado se ajustará al hamiltoniano instantáneo de acuerdo con el teorema adiabático [19].

El teorema adiabático implica que si el estado $|n, \mathbf{R}(0)\rangle$ evoluciona hasta un tiempo t , terminará en el estado $e^{i\Phi_n(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle$ con una probabilidad que tiende a uno, conforme más lento sea el cambio.

Para encontrar la fase adquirida puede substituirse $e^{i\Phi_n(t)} |n, \mathbf{R}(t)\rangle$ en la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \left[e^{i\Phi_n(t)} |n, \mathbf{R}\rangle \right] = H(\mathbf{R}(t)) e^{i\Phi_n(t)} |n, \mathbf{R}\rangle. \quad (2.6)$$

Al proyectar ambos miembros sobre el estado $e^{i\Phi_n(t)} |n, \mathbf{R}\rangle$ se obtiene:

$$\dot{\Phi}_n(t) = i \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} - \frac{1}{\hbar} E_n(t). \quad (2.7)$$

*En este trabajo se asume un espació tridimensional, por lo tanto $\mathbf{R} = (R_1(t), R_2(t), R_3(t))$

Esta expresión puede reescribirse como:

$$\dot{\Phi}_n(t) = \mathcal{A}_n - \frac{1}{\hbar} E_n(t), \quad (2.8)$$

donde se define:

$$\mathcal{A}_n \equiv i \langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} | n, \mathbf{R} \rangle. \quad (2.9)$$

La diferencia de fases después de resolver la Ecuación diferencial la diferencia de las fases, será:

$$\Phi_n(t) - \Phi_n(0) = \int_{\mathbf{R}(0)}^{\mathbf{R}(t)} \mathcal{A}_n \cdot d\mathbf{R} - \int_0^t \frac{1}{\hbar} E_n(t') dt', \quad (2.10)$$

y de ella se obtienen dos términos: la integral sobre la energía es la fase dinámica, mientras que la integral sobre \mathcal{A}_n es una fase geométrica, debido a que depende únicamente de la trayectoria en el espacio de parámetros y no de la forma en que esta es recorrida.

Para el caso especial en que transcurrido un tiempo, el sistema regresa al estado original tras haber recorrido la curva cerrada C , la *fase de Berry* o fase geométrica $\gamma_n(C)$ se define como la integral de línea de \mathcal{A}_n sobre dicha curva cerrada:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n \cdot d\mathbf{R}. \quad (2.11)$$

Como puede verse en la siguiente sección una vez que se cierra la trayectoria, la fase geométrica es invariante ante transformaciones de norma.

En algunas situaciones es conveniente convertir la integral de línea en una integral de superficie. Aplicando el teorema de Stokes a la Ecuación (2.11) obtenemos:

$$\gamma_n(C) = \iint_C \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_n \cdot d\mathbf{S}, \quad (2.12)$$

definiendo:

$$\mathcal{B}_n \equiv \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_n \quad (2.13)$$

se obtiene:

$$\gamma_n(C) = \iint_C \mathcal{B}_n \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.14)$$

2.3. Conexión y curvatura de Berry

Debido a la similitud de \mathcal{A}_n con el potencial vectorial de un campo magnético y a la de \mathcal{B}_n con un campo magnético, \mathcal{A}_n es conocido como potencial de Berry y \mathcal{B}_n como *campo de Berry*. La relación entre estos está dada por la Ecuación (2.13).

Las dos formas de obtener la fase de Berry son la integral de línea sobre una curva cerrada del potencial de Berry \mathcal{A}_n (Ecuación 2.12) y el flujo de *campo de Berry* \mathcal{B}_n a través

de la superficie encerrada por C (Ecuación 2.14).

Al igual que con un campo magnético, la divergencia de $\nabla_{\mathbf{R}} \cdot \mathcal{B}_n = 0$, por estar definido como el rotacional de un campo no conservativo.

\mathcal{B}_n es además invariante ante transformaciones de norma, esto puede probarse usando:

$$|n, \mathbf{R}\rangle \rightarrow e^{i\Lambda} |n, \mathbf{R}\rangle, \quad (2.15)$$

Bajo esta transformación el potencial cambia:

$$\mathcal{A}_n \rightarrow \mathcal{A}'_n = \mathcal{A}_n - \nabla_{\mathbf{R}}\Lambda, \quad (2.16)$$

y al tomar el rotacional:

$$\mathcal{B}'_n = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}'_n - \nabla_{\mathbf{R}} \times \nabla_{\mathbf{R}}\Lambda = \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_n = \mathcal{B}_n \quad (2.17)$$

el rotacional del gradiente se anula, puede verse así que la curvatura de Berry \mathcal{B}_n es invariante ante la transformación, mientras que la fase de Berry $\gamma_n(C)$ será:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n \cdot d\mathbf{R} - \oint_C i \nabla_{\mathbf{R}}\Lambda \cdot d\mathbf{R}, \quad (2.18)$$

como consecuencia del teorema fundamental del cálculo para integrales de línea [20]:

$$\gamma_n(C) = \oint_C \mathcal{A}_n \cdot d\mathbf{R} - \Lambda(R_i) + \Lambda(R_f). \quad (2.19)$$

Al ser esta una integral sobre una trayectoria cerrada, los valores de $\Lambda(R_i)$ y $\Lambda(R_f)$ serán iguales en $\text{mod } 2\pi$ y la fase de Berry γ_n permanece invariante ante transformaciones de norma al igual que el campo de Berry, por lo tanto son independientes de la forma en la que esté parametrizado el sistema, lo cual permite que sean posibles observables físicas.

El potencial de Berry es también conocido como *conexión de Berry*, debido a la relación que establece entre dos estados próximos $|n, \mathbf{R}\rangle$ y $|n, \mathbf{R} + \Delta\mathbf{R}\rangle$ en el espacio de parámetros [21].

La normalización de $|n, \mathbf{R}\rangle$ implica que $\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle$ es imaginario, garantizando que γ_n es real [13]. Esto puede comprobarse tomando el gradiente de la condición de normalización $\langle n | n \rangle$:

$$\nabla \langle n | n \rangle = \langle \nabla n | n \rangle + \langle n | \nabla n \rangle = 0, \quad (2.20)$$

si se considera a $\{ |\eta\rangle \}$ como una base independiente de los parámetros \mathbf{R} :

$$|n, \mathbf{R}\rangle = \sum_m C_m(\mathbf{R}) |\eta\rangle, \quad (2.21)$$

y se toma el gradiente, se obtiene:

$$\nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle = \sum_m \nabla_{\mathbf{R}} C_m(\mathbf{R}) |\eta\rangle. \quad (2.22)$$

Al tratar de igual forma al término $\langle \nabla n |$ y sustituyendo en la Ecuación (2.20) puede verse que ambos términos son conjugados complejos el uno del otro y el resultado de su suma será:

$$Re[C_m^* \nabla C_m] = 0, \quad (2.23)$$

por lo que puede concluirse que ambos términos son puramente imaginarios, de esta forma el potencial de Berry \mathcal{A}_n , el campo de Berry \mathcal{B}_n y la fase de Berry γ_n son cantidades reales.

Evaluar los gradientes de estados puede ser complicado debido a la necesidad de una base localmente univaluada, para evitar estas dificultades es posible darle una forma independiente del gradiente del estado al campo de Berry \mathcal{B}_n . En la Ecuación (2.12) puede insertarse una unidad como la suma de estados instantáneos $|m, \mathbf{R}\rangle$, obteniendo:

$$\mathcal{B}_n = -Im \sum_{m \neq n} \nabla_{\mathbf{R}} (\langle n, \mathbf{R} | |m, \mathbf{R}\rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle). \quad (2.24)$$

Al ser $\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle$ imaginario, pueden omitirse los elementos diagonales $m = n$.

A partir de la ecuación de eigenvalores, calculando su gradiente y proyectándola sobre $|m, \mathbf{R}\rangle$ los elementos de matriz son:

$$\langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} |n, \mathbf{R}\rangle + \langle m, \mathbf{R} | H (\nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle) = \nabla_{\mathbf{R}} E_n \delta_{m,n} + E_n \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} |n, \mathbf{R}\rangle \quad (2.25)$$

Así, el campo de Berry \mathcal{B}_n puede expresarse como:

$$\mathcal{B}_n \equiv -Im \left[\sum_{m \neq n} \frac{\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} |m, \mathbf{R}\rangle \times \langle m, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} |n, \mathbf{R}\rangle}{(E_m - E_n)^2} \right] \quad (2.26)$$

En esta forma es posible apreciar que \mathcal{B}_n tiene singularidades en puntos degenerados en el espacio de parámetros \mathbf{R} , siempre que los elementos de matriz $\langle n, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} |m, \mathbf{R}\rangle \neq 0$. Estas singularidades, pueden verse como fuentes de "campo de Berry", o "monopolos magnéticos de Berry" siendo la fase de Berry el flujo asociado a estas fuentes. Cabe destacar que la integral en una trayectoria cerrada de la curvatura de Berry será siempre un múltiplo entero de 2π y este número es una característica topológica del sistema que no será discutida en este trabajo [22].

Como consecuencia de la independencia de γ_n y \mathcal{B}_n con la elección de norma, puede observarse que la fase de Berry γ_n es independiente de la elección de norma, por lo

tanto puede ser observada, además no es explícitamente dependiente del tiempo, por lo que es puramente geométrica.

Para sistemas aislados, las cantidades observables son valores esperados de algún operador, mientras que la fase de Berry no puede ser obtenida como el valor esperado de un operador Hermitiano por lo que es necesaria una perturbación adiabática para poder existir una fase geométrica[21, 23, 19].

2.4. Partícula con espín 1/2 en un campo magnético de magnitud constante.

Berry discute el caso de la fase geométrica adquirida por una partícula con espín $\frac{1}{2}$ en un campo magnético de magnitud constante que gira adiabáticamente [13]. El hamiltoniano de este sistema, rotado de forma que no la energía cinética de los electrones sea 0, es:

$$H = \frac{\mu}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}(t), \quad (2.27)$$

donde μ es la magnitud del momento magnético, $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli y $\mathbf{B}(t)$ es un campo magnético que varía adiabáticamente en el tiempo. Como puede verse en el Apéndice A los estados serán:

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad |-1\rangle = \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ -e^{i\varphi} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{pmatrix}. \quad (2.28)$$

Al sustituir estos estados en la Ecuación 2.26 se obtiene:

$$\mathcal{B}_{+1} = -\text{Im} \left[\frac{1}{4B^2} \begin{pmatrix} -\cos(\Theta) \cos(\varphi) - i \sin(\varphi) \\ i \cos(\varphi) - \cos(\Theta) \sin(\varphi) \\ \sin(\Theta) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} -\cos(\Theta) \cos(\varphi) + i \sin(\varphi) \\ -i \cos(\varphi) - \cos(\Theta) \sin(\varphi) \\ \sin(\Theta) \end{pmatrix} \right] \quad (2.29a)$$

$$= -\text{Im} \left[\frac{1}{2B^2} \begin{pmatrix} i \cos(\varphi) \sin(\Theta) \\ i \sin(\varphi) \sin(\Theta) \\ i \cos(\Theta) \end{pmatrix} \right] \quad (2.29b)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{\mathbf{B}}{B^2}, \quad (2.29c)$$

donde por analogía con la ley de Gauss puede verse a la curvatura como un monopolo magnético con magnitud 1/2 y a la fase de Berry como el flujo a través de la superficie encerrada por la trayectoria barrida por el campo magnético \mathbf{B} , esta será 1/2 del ángulo sólido encerrado por la trayectoria:

$$\gamma_{+1} = \frac{1}{2} \int_0^\Theta \sin(\Theta) d\Theta \int_0^{2\pi} d\varphi = \pi(1 - \cos(\Theta)). \quad (2.30)$$

Esto puede verse también al calcular la conexión \mathcal{A}_{+1} :

$$\mathcal{A}_{+1} = -\frac{1}{2k} \tan\left(\frac{\Theta}{2}\right) \hat{\Theta}, \quad (2.31)$$

así, la fase de Berry será de igual forma:

$$\gamma_{+1} = \frac{1}{2}(1 - \cos(\Theta)) \int_0^{2\pi} d\varphi = \pi(1 - \cos(\Theta)) \quad (2.32)$$

2.5. Fases geométricas

Las fases geométricas están presentes en muchas áreas de la física. El péndulo de Foucault presenta el ejemplo de una fase geométrica en un sistema clásico, donde después de completar un ciclo alrededor del eje de rotación terrestre, el péndulo adquiere una fase igual a la mitad del ángulo sólido que encierra su trayectoria, siendo menor a mayores latitudes. A una latitud de 30° el péndulo precesará 180° [24].

Este resultado es parecido al obtenido por Berry en su artículo de 1984, presentado en la sección anterior, donde estudia el sistema de un electrón en un campo magnético de magnitud constante que gira adiabáticamente, la fase adquirida por el electrón es igual a la mitad del ángulo sólido encerrado en la trayectoria del campo magnético [1].

Dentro de la cuántica, se han encontrado fases que después del artículo de Berry, se ha descubierto que son de origen geométrico. Aharonov y Bohm (AB) publicaron en 1959 un artículo sobre el significado de los potenciales electromagnéticos en la cuántica, AB probaron cómo la presencia de un potencial electromagnético, tal que en la región estudiada tanto el campo eléctrico como el magnético se anularan, podía modificar los patrones de interferencia de dichos electrones. Esta modificación es debido a la llamada fase de Aharonov-Bohm. Berry probó que esta fase un caso especial de la fase geométrica [13]. De la misma forma, Berry demostró que la fase de Pancharatnam, igual a la mitad del ángulo sólido encerrado por las geodésicas que unen a los estados de polarización recorridos en la esfera de Poincaré es un caso particular de su fase geométrica [16]. Dicha fase ha sido medida experimentalmente en más de una ocasión [25].

Igualmente se han estudiado fases geométricas en sistemas moleculares, Herzberg y Longuet-Higgins notaron que una función de onda electrónica que podía tomarse como real en todas las configuraciones nucleares, cambiaba de signo cuando las coordenadas nucleares se movían alrededor de un cruce de niveles de energía en el espacio de coordenadas nucleares. Más tarde este mismo problema se aplicó al sistema H_3 donde se estudió la reacción $H + H_2 \rightarrow H_2 + H$, este cambio de signo es resultado de la fase geométrica adquirida [26].

Se han descrito diversas generalizaciones a fases geométricas, casos con eigenestados degenerados donde la fase resultante puede ser no abeliana (una matriz), trayectorias no unitarias, abiertas y sin la presencia del teorema adiabático (fase de Aharonov-Anadan) [27, 28].

Después del trabajo original de Berry se descubrió que la fase geométrica podía ser interpretada como una holonomía[†] en términos de geometría diferencial y topología, donde surgen conceptos como el de transporte paralelo y las variedades diferenciables, que no serán considerados en este trabajo.

[†]Berry menciona en un artículo de 1988 que llamarla holonomía le parece bárbaro "... the concept of anholonomy is familiar to geometers, but they often call it 'holonomy' a reversal of usage I consider a barbarism." [18]

Capítulo 3

Sistema cuántico de dos niveles (TLS)

Cualquier sistema donde exista una separación de dos bandas puede ser estudiado en la vecindad de esta brecha energética por un modelo de dos niveles a través de una matriz hermitiana de orden 2; que a su vez puede construirse como una combinación lineal de las matrices de Pauli y la matriz identidad. Este modelo tiene gran versatilidad y es usado en múltiples sistemas, como los estudiados en el Capítulo 5.

3.1. Propiedades espectrales del hamiltoniano de un TLS

El hamiltoniano de la Ecuación (3.1) [‡] puede modelar cualquier sistema de dos niveles en función de los parámetros asignados a E_0 y a las componentes del campo $\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega} = \frac{\hbar}{2}(\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$ y será el usado en este trabajo.

$$H = E_0\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega} \quad (3.1a)$$

$$= \begin{pmatrix} E_0 + \frac{\hbar}{2}\Omega_z & \frac{\hbar}{2}(\Omega_x - i\Omega_y) \\ \frac{\hbar}{2}(\Omega_x + i\Omega_y) & E_0 - \frac{\hbar}{2}\Omega_z \end{pmatrix}. \quad (3.1b)$$

Al resolver la ecuación de eigenvalores, se obtienen energías propias

$$E_\lambda = E_0 + \lambda \frac{\hbar}{2}\Omega, \quad (3.2)$$

[‡]Siendo \mathbb{I} la matriz identidad de orden 2 y $\boldsymbol{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z) = \left(\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right)$$

donde $\lambda = \pm 1$ y $\Omega = \sqrt{\Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2}$ es la magnitud del campo $\mathbf{\Omega}$. Los eigenespinores del hamiltoniano son:

$$|\lambda\rangle = \sqrt{\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{\Omega_x + i\Omega_y}{\Omega + \lambda\Omega_z} \end{pmatrix}. \quad (3.3)$$

En coordenadas esféricas $(\Omega, \Theta, \varphi)$, con $\cos(\Theta) = \Omega_z/\Omega$ y $\tan(\varphi) = \Omega_{||}/\Omega$, donde $\Omega_{||}$ es la proyección de $\mathbf{\Omega}$ sobre el plano, este espinor puede reescribirse como:

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda N_{-\lambda} e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

donde $N_\lambda^2 = (1 + \lambda \cos(\Theta))/2$.

La derivación de las energías y los estados puede verse en el Apéndice **A**.

Para los siguientes capítulos serán útiles los elementos de matriz $\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \mu \rangle$ para el TLS los cuales de forma general son:

$$\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \mu \rangle = \lambda \hat{\boldsymbol{\Omega}} \delta_{\mu,\lambda} + \left(-i\lambda (\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{||} \times \hat{\mathbf{z}}) + (\hat{\boldsymbol{\Omega}}_{||} \times \hat{\mathbf{z}}) \times \hat{\boldsymbol{\Omega}} \right) \delta_{\mu,-\lambda}. \quad (3.5)$$

Reescrito por componentes:

$$\langle \lambda | \sigma_i | \mu \rangle = \left(\lambda \frac{\Omega_i}{\Omega} \right) \delta_{\mu,\lambda} + \left(\frac{-i\lambda}{\Omega_{||}} \epsilon_{ipq} \Omega_{||p} \delta_{qz} + \frac{1}{\Omega_{||}\Omega} \epsilon_{imn} \epsilon_{mrs} \Omega_{||r} \delta_{sz} \Omega_n \right) \delta_{\mu,-\lambda}, \quad (3.6)$$

donde se aprecia que los elementos diagonales son:

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\lambda = \langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle = \lambda \frac{\boldsymbol{\Omega}}{\Omega}, \quad (3.7)$$

puede verse que $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_\lambda$ será un vector unitario en la dirección de $\mathbf{\Omega}$ con sentido opuesto para cada banda.

3.2. Curvatura y conexión de Berry

Al tomar el gradiente del estado $|\lambda\rangle$ de la Ecuación (3.4) se obtiene:

$$\begin{aligned} |\nabla_{\mathbf{R}}\lambda\rangle &= \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{R}}N_{\lambda} \\ \lambda\nabla_{\mathbf{R}}(N_{-\lambda}e^{i\varphi}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{R}}N_{\lambda} \\ \lambda e^{i\varphi}(\nabla_{\mathbf{R}}N_{-\lambda} + iN_{-\lambda}\nabla_{\mathbf{R}}\varphi) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.8)$$

La conexión de Berry \mathcal{A}_{λ} será:

$$\mathcal{A}_{\lambda} = i(N_{\lambda} \quad \lambda e^{-i\varphi}N_{-\lambda}) \cdot \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{R}}N_{\lambda} \\ \lambda e^{i\varphi}(\nabla_{\mathbf{R}}N_{-\lambda} + iN_{-\lambda}\nabla_{\mathbf{R}}\varphi) \end{pmatrix} \quad (3.9a)$$

$$= i(N_{\lambda}\nabla_{\mathbf{R}}N_{\lambda} + N_{-\lambda}\nabla_{\mathbf{R}}N_{-\lambda} + iN_{-\lambda}^2\nabla_{\mathbf{R}}\varphi), \quad (3.9b)$$

donde pueden reacomodarse los términos $N_{\lambda}\nabla_{\mathbf{R}}N_{\lambda} = \frac{1}{2}\nabla_{\mathbf{R}}(N_{\lambda}^2)$, notando que $N_{\lambda}^2 + N_{-\lambda}^2 = 1$, $\nabla_{\mathbf{R}}(N_{\lambda}^2 + N_{-\lambda}^2) = 0$, siendo así la conexión:

$$\mathcal{A}_{\lambda} = -N_{-\lambda}^2\nabla_{\mathbf{R}}\varphi. \quad (3.10)$$

Al definir $\Omega_{\pm} = \Omega_x \pm i\Omega_y$, entonces $e^{i\varphi} = \Omega_{+}/\Omega_{\parallel}$ y:

$$\varphi = i\ln(\Omega_{\parallel}) - i\ln(\Omega_{+}) \implies \nabla_{\mathbf{R}}\varphi = i\left(\frac{\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_{\parallel}}{\Omega_{\parallel}} - \frac{\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_{+}}{\Omega_{+}}\right), \quad (3.11)$$

donde el gradiente de Ω_{\parallel} es

$$\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_{\parallel} = \frac{\Omega_x\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_x + \Omega_y\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_y}{\Omega_{\parallel}}. \quad (3.12)$$

Al sustituir las Ecuaciones (3.11) y (3.12) en la Ecuación (3.10) y simplificar, se obtiene la forma:

$$\mathcal{A}_{\lambda} = \frac{\Omega - \lambda\Omega_z}{2\Omega\Omega_{\parallel}^2} (\Omega_x\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_y - \Omega_y\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_x). \quad (3.13)$$

Así, la fase de Berry tras recorrer la curva C será:

$$\gamma_{\lambda}(C) = \oint_C \left[\frac{\Omega - \lambda\Omega_z}{2\Omega\Omega_{\parallel}^2} (\Omega_x\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_y - \Omega_y\nabla_{\mathbf{R}}\Omega_x) \right] \cdot d\mathbf{R}, \quad (3.14)$$

donde $d\mathbf{R}$ es el diferencial de línea en el espacio de parámetros \mathbf{R} .

Esta ecuación es válida para cualquier sistema que pueda expresarse en la forma de la Ecuación (3.1).

Por su parte, la curvatura de Berry \mathcal{B}_λ puede calcularse de la Ecuación (2.26):

$$\mathcal{B}_n \equiv -\text{Im} \left[\frac{\langle \lambda, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | -\lambda, \mathbf{R} \rangle \times \langle -\lambda, \mathbf{R} | \nabla_{\mathbf{R}} \hat{H} | \lambda, \mathbf{R} \rangle}{(E_{-\lambda} - E_\lambda)^2} \right]. \quad (3.15)$$

Tomando el gradiente del hamiltoniano, asumiendo suma sobre índices repetidos se obtiene

$$(\nabla_{\mathbf{R}} H)_i = \partial_{R_i} H_0 + \frac{\hbar}{2} \sigma_o \partial_{R_i} \Omega_o, \quad (3.16)$$

y así, el producto $\langle \lambda | \nabla_{\mathbf{R}} H | -\lambda \rangle$ será

$$\langle \lambda | \nabla_{\mathbf{R}} H | -\lambda \rangle_i = \partial_{R_i} H_0 \langle \lambda | -\lambda \rangle + \frac{\hbar}{2} (\partial_{R_i} \Omega_o) \langle \lambda | \sigma_o | -\lambda \rangle, \quad (3.17)$$

el primer término se anula por la condición de ortonormalidad, de forma que:

$$\langle \lambda | \nabla_{\mathbf{R}} H | -\lambda \rangle_i = \frac{\hbar}{2} (\partial_{R_i} \Omega_o) \langle \lambda | \sigma_o | -\lambda \rangle, \quad (3.18)$$

al sustituir en la Ecuación (3.15) y con $E_{-\lambda} - E_\lambda = -\lambda \hbar \Omega$ se obtiene:

$$\mathcal{B}_\lambda = \text{Im} \left[\frac{1}{\hbar^2 \Omega^2} \left(\frac{\hbar}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_o \langle \lambda | \sigma_o | -\lambda \rangle \right) \times \left(\frac{\hbar}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_r \langle -\lambda | \sigma_r | \lambda \rangle \right) \right]. \quad (3.19)$$

al re-escribir en función de las componentes:

$$(\mathcal{B}_\lambda)_i = \text{Im} \left[\frac{1}{4\Omega^2} \epsilon_{ijk} \frac{\partial \Omega_o}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_r}{\partial R_k} \langle \lambda | \sigma_o | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_r | \lambda \rangle \right]. \quad (3.20)$$

A partir de la Ecuación (3.6) puede obtenerse el producto:

$$V_{ij} = \langle \lambda | \sigma_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_j | \lambda \rangle \quad (3.21a)$$

$$= \left[\frac{-i\lambda}{\Omega_{\parallel}} \epsilon_{ipz} \Omega_{\parallel p} + \frac{1}{\Omega_{\parallel} \Omega} \epsilon_{iab} \epsilon_{car} \Omega_{\parallel r} \Omega_n \right] \left[\frac{i\lambda}{\Omega_{\parallel}} \epsilon_{jqz} \Omega_{\parallel q} + \frac{1}{\Omega_{\parallel} \Omega} \epsilon_{jfg} \epsilon_{hfs} \Omega_{\parallel s} \Omega_m \right] \quad (3.21b)$$

$$= \frac{1}{\Omega_{\parallel}^2} (\delta_{ij} \delta_{pm} - \delta_{im} \delta_{pj}) \Omega_{\parallel p} \Omega_{\parallel m} + \frac{1}{\Omega^2 \Omega_{\parallel}^2} (\delta_{ij} \delta_{nr} \delta_{ms} - \delta_{im} \delta_{js} \delta_{nr} - \delta_{nz} \delta_{ir} \delta_{ms} + \delta_{mn} \delta_{ir} \delta_{js}) \Omega_{\parallel s} \Omega_{\parallel r} \Omega_m \Omega_n + \quad (3.21c)$$

$$+ \frac{i\lambda}{\Omega_{\parallel}^2 \Omega} [\epsilon_{jqz} (\delta_{iz} \delta_{nr} - \delta_{ir} \delta_{nz}) \Omega_{\parallel q} \Omega_{\parallel r} \Omega_n - \epsilon_{ipz} (\delta_{jz} \delta_{ms} - \delta_{js} \delta_{mz}) \Omega_{\parallel p} \Omega_{\parallel s} \Omega_m]$$

$$= \frac{1}{\Omega_{\parallel}^2} (\Omega_{\parallel p} \delta_{ij}) + \frac{1}{\Omega^2 \Omega_{\parallel}^2} (\delta_{nr} (\delta_{ij} \delta_{ms} - \delta_{im} \delta_{nr}) + \delta_{ir} (\delta_{mn} \delta_{js} - \delta_{ms} \delta_{nz})) \Omega_{\parallel s} \Omega_{\parallel r} \Omega_m \Omega_n + \quad (3.21d)$$

$$+ \frac{i\lambda}{\Omega_{\parallel}^2 \Omega} [\epsilon_{jqz} (\delta_{iz} \delta_{nr} - \delta_{ir} \delta_{nz}) \Omega_{\parallel q} \Omega_{\parallel r} \Omega_n - \epsilon_{ipz} (\delta_{jz} \delta_{ms} - \delta_{js} \delta_{mz}) \Omega_{\parallel p} \Omega_{\parallel s} \Omega_m]$$

$$= \frac{1}{\Omega^2} (\Omega^2 \delta_{ij} - \Omega_i \Omega_j + i\lambda \Omega \epsilon_{ijk} \Omega_k). \quad (3.21e)$$

Este resultado puede expresarse como la suma de un término simétrico $S_{ij} = (\Omega^2 \delta_{ij} - \Omega_i \Omega_j) / \Omega^2$ y un término antisimétrico $T_{ij} = (\epsilon_{ijk} \Omega_k) / \Omega$ de la forma:

$$\langle \lambda | \sigma_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_j | \lambda \rangle = S_{ij} + i\lambda T_{ij}. \quad (3.22)$$

Al sustituir en la Ecuación (3.20)

$$(\mathcal{B}_\lambda)_i = -\text{Im} \left[\frac{1}{4\Omega^2} \epsilon_{ijk} \frac{\partial \Omega_o}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_r}{\partial R_k} \frac{1}{\Omega^2} (S_{ij} + i\lambda T_{ij}) \right]. \quad (3.23)$$

La contracción del símbolo de Levi-Civita con la parte simétrica se anula, quedando:

$$(\mathcal{B}_\lambda)_i = \text{Im} \left[\frac{-i\lambda}{4\Omega^4} \epsilon_{ijk} \frac{\partial \Omega_o}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_r}{\partial R_k} (\Omega \epsilon_{ijk} \Omega_k) \right], \quad (3.24)$$

Reescribiendo:

$$(\mathcal{B}_\lambda)_i = \text{Im} \left[\frac{-i\lambda}{4\Omega^3} \epsilon_{ijk} \mathbf{\Omega} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial R_j} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial R_k} \right) \right], \quad (3.25)$$

así la curvatura de Berry es:

$$(\mathcal{B}_\lambda)_i = \frac{-\lambda}{4\Omega^3} \epsilon_{ijk} \mathbf{\Omega} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial R_j} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial R_k} \right). \quad (3.26)$$

A partir de esta forma es posible llegar a la Ecuación (3.11), separando $\Omega = \Omega_{\parallel} + \hat{z}\Omega_z$ en la Ecuación (3.26):

$$(\mathcal{B}_{\lambda})_i = \frac{-\lambda}{4\Omega^3} \epsilon_{ijk} \left\{ \underbrace{\Omega_{\parallel} \cdot \left(\frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_j} \times \frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_k} \right)}_{=0} + \Omega_{\parallel} \cdot \left[\hat{z} \times \left(\frac{\partial \Omega_z}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_k} - \frac{\partial \Omega_z}{\partial R_k} \frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_j} \right) \right] + \Omega_z \hat{z} \cdot \left(\frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_j} \times \frac{\partial \Omega_{\parallel}}{\partial R_k} \right) \right\} \quad (3.27a)$$

$$= \frac{-\lambda}{4\Omega^3} \epsilon_{ijk} \left[\Omega_{\parallel}^2 \left(\frac{\partial \varphi}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_z}{\partial R_k} - \frac{\partial \varphi}{\partial R_k} \frac{\partial \Omega_z}{\partial R_j} \right) + \Omega_{\parallel} \left(\frac{\partial \Omega_x}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_y}{\partial R_k} - \frac{\partial \Omega_x}{\partial R_k} \frac{\partial \Omega_y}{\partial R_j} \right) \right] \quad (3.27b)$$

$$= \frac{-\lambda}{4\Omega^3} \left[2\Omega_{\parallel}^2 (\nabla_{\mathbf{R}} \varphi \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z)_i + \epsilon_{ijk} \Omega_z \left(\frac{\partial \Omega_x}{\partial R_j} \frac{\partial \Omega_y}{\partial R_k} - \frac{\partial \Omega_x}{\partial R_k} \frac{\partial \Omega_y}{\partial R_j} \right) \right] \quad (3.27c)$$

$$= \frac{-\lambda}{2\Omega^3} \left[\Omega_{\parallel}^2 \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z + \Omega_z \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_x \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_y \right]_i \quad (3.27d)$$

$$= \frac{-\lambda}{2\Omega^3} \left[\Omega^2 \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z - \Omega_z^2 \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z + \Omega_z \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_x \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_y \right]_i \quad (3.27e)$$

$$= \frac{\lambda}{2} \left[\frac{1}{\Omega} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi - \frac{\Omega_z}{\Omega^3} (\Omega_z \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi + \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_x \times \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_y) \right]_i \quad (3.27f)$$

$$= \frac{\lambda}{2} \left[\frac{1}{\Omega} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi - \frac{\Omega_z}{\Omega^3} \left(\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z^2 \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi + \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_{\parallel}^2 \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \right) \right]_i \quad (3.27g)$$

$$= \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{\Omega} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi - \frac{1}{2} \frac{\Omega_z}{\Omega^3} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega^2 \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \right)_i \quad (3.27h)$$

$$\mathcal{B}_{\lambda} = \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{\Omega} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega_z - \frac{\Omega_z}{\Omega^2} \nabla_{\mathbf{R}} \Omega \right) \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \quad (3.27i)$$

$$= \frac{\lambda}{2} \nabla_{\mathbf{R}} \left(\frac{\Omega_z}{\Omega} \right) \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \quad (3.27j)$$

$$= \frac{-1}{2} \nabla_{\mathbf{R}} (2N_{-\lambda}^2 - 1) \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \quad (3.27k)$$

$$= -\nabla_{\mathbf{R}} N_{-\lambda}^2 \times \nabla_{\mathbf{R}} \varphi \quad (3.27l)$$

$$= \nabla_{\mathbf{R}} \times (-N_{-\lambda}^2 \nabla_{\mathbf{R}} \varphi) \quad (3.27m)$$

$$= \nabla_{\mathbf{R}} \times \mathcal{A}_{\lambda} \quad (3.27n)$$

Las Ecuaciones (3.14) y (3.26) son los resultados más importantes de este capítulo, ya que a partir de estos se calcularán las fases de Berry estudiadas en el siguiente capítulo. Las fórmulas derivadas tanto para la conexión como para la curvatura de Berry son generales para cualquier campo Ω y por lo tanto pueden servir para calcular la fase de Berry de cualquier sistema modelable con un hamiltoniano hermitiano 2x2.

Capítulo 4

Acoplamiento espín-órbita en gases electrónicos bidimensionales

4.1. Espín

En 1925 el físico americano Ralph de Laer Kronig postuló que los electrones poseían un grado de libertad de momento angular adicional al momento angular orbital, causado por la rotación del electrón sobre su propio eje; además postuló que esta rotación tiene una magnitud fija de $\hbar/2$. De esta forma era capaz de explicar fenómenos como el efecto Zeeman anormal y los multipletes en ciertos espectros atómicos. Esta teoría no explicaba todos los detalles vistos en los espectros y peor aun, si se considera al electrón como una esfera con el radio de Lorentz $r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$, la velocidad superficial del electrón tendría que ser más de 60 veces la velocidad de la luz para producir un momento angular de $\hbar/2$, lo cual es una clara violación a la teoría de la relatividad. Kronig mostró su trabajo a Pauli, quien lo ridiculizó diciendo que era una idea inteligente, pero no tenía nada que ver con la realidad, por esta razón Kronig nunca publicó este trabajo. Meses después, los físicos George Uhlenbeck y Samuel Goudsmit publicaron un trabajo bajo la misma idea del electrón rotante, sin embargo al notar el problema de la velocidad superficial, intentaron evitar la publicación. La respuesta que recibieron fue que era demasiado tarde ya para evitar su impresión, además de que ambos eran suficientemente jóvenes como para permitirse estupidez [29, 30].

Un par de años antes de los trabajos acerca de la rotación del electrón sobre su propio eje. Otto Stern y Walther Gerlach intentaban medir la cuantización espacial del modelo de Bohr. Para lograrlo hicieron pasar un haz de átomos de plata por un par de rejillas colimadoras, el haz colimado pasaba después a través de un campo magnético inhomogéneo e impactaba en una placa fotográfica, donde después de múltiples intentos pudieron ser observadas dos líneas paralelas [31].

Contrario a la idea de Stern y Gerlach, la separación de los estados era debido al espín ya que el momento angular orbital de la plata en estado base es cero. No fue hasta 1927 que Ronald Fraser habló sobre este detalle [29].

Finalmente a pesar de su reacción inicial Pauli formalizó una teoría no relativista del espín en 1927 y en 1928 Dirac publicó su ecuación cuantico-relativista, en la que el espín surge como una propiedad intrínseca, por lo que también es conocido como momento angular intrínseco [32, 33].

Hoy en día la manipulación del espín, conocida como *espintrónica* es un campo relevante en múltiples áreas de la física, como la física del estado sólido o la computación cuántica. Un descubrimiento importante de la espintrónica fue el efecto de magnetorresistencia gigante (GMR), a finales del siglo XX, que dio origen a múltiples fenómenos magneto-electrónicos con aplicaciones de almacenamiento y lectura de información, como las memorias magnetoresistivas no volátiles de acceso aleatorio (MRAM) [29, 34].

Uno de los propósitos actuales de la espintrónica es el desarrollo de dispositivos que utilicen el espín para codificar información, ya sea usando sistemas híbridos que almacenan la información en la carga, pero que son controladas por espín como los transistores de espín de efecto de campo (SPINFET), o los transistores de espín de unión bipolar (SBJT), o más radicalmente haciendo uso de sistemas que solo utilizan el espín para codificar información. Estas ideas hacen necesario mecanismos de interacción con el espín. Por su esencia magnética es natural pensar que los campos magnéticos externos son la forma más directa de control y detección de espín, sin embargo, esto también es posible por medio de campos eléctricos debido a la llamada interacción espín-órbita, de la cual se hablará más adelante en este capítulo [29, 34].

4.1.1. Degeneración en sistemas con espín 1/2

El teorema de Kramers establece que en sistemas con espín semi-entero con simetría de inversión temporal * existen al menos dos estados con la misma energía, siendo $\epsilon(k)$ la energía de un estado con un vector de onda k en un sistema con espín 1/2:

$$\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\downarrow}(-\mathbf{k}). \quad (4.1)$$

La simetría de inversión espacial por el potencial genera otra degeneración de la forma:

$$\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\uparrow}(-\mathbf{k}). \quad (4.2)$$

A partir de las Ecuaciones (4.1) y (4.2) puede verse que la unión de las simetrías de inversión espacial y temporal da lugar a una degeneración en la energía de los estados $|\uparrow\rangle$ y $|\downarrow\rangle$

$$\epsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \epsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}). \quad (4.3)$$

Esta degeneración puede romperse al anular cualquiera de las simetrías, por ejemplo, al aplicar un campo magnético se rompe la simetría de inversión temporal mostrada en la Ecuación (4.1), levantando la degeneración en la energía; esa condición está presente en fenómenos como el efecto Hall cuántico (QHE). En otros fenómenos como el

*Dada la transformación $\Theta : t \rightarrow -t$, el estado $|\alpha\rangle$ tiene simetría de inversión temporal si: $\Theta |\alpha\rangle = |\alpha\rangle$

acoplamiento espín órbita, en ausencia de campos magnéticos externos y con simetría de inversión temporal existe una separación de los niveles energéticos para los diferentes estados de espín causada por el rompimiento de la simetría de inversión espacial, mostrada en la Ecuación (4.2), en un gas de electrones bidimensional [35, 36].

4.2. Acoplamiento espín-órbita (SOC)

Los espectros de emisión y absorción de átomos hidrogenoides y metales alcalinos muestran pares de líneas poco espaciadas; estas están relacionadas con la interacción entre el momento angular orbital y el momento angular intrínseco de los electrones.

A la descripción de dichas líneas se le conoce como estructura fina de la materia y aparece en forma de correcciones agregadas a la energía resultante de la Ecuación de Schrödinger al resolver la Ecuación de Dirac [37, 29].

A partir de la Ecuación de Dirac con funciones de onda estacionarias sin campo magnético externo:

$$E\Psi = (c\vec{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \mathcal{V} + \beta m_0 c^2) \Psi, \quad (4.4)$$

donde α y β son las matrices de Dirac**, c es la velocidad de la luz, E_s es la energía de Schrödinger, \mathcal{V} es el potencial eléctrico y siendo Ψ es un espinor de 4 componentes:

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Upsilon_1 \\ \Upsilon_2 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

definido como $\Psi = \Upsilon \oplus \Phi$, donde Υ es un espinor de dos componentes que representa a una partícula y Φ su correspondiente antipartícula, la diferencia de energía entre estas es de $2m_0 c^2 \gtrsim 1MeV$ para electrones [29].

Puede hacerse la aproximación cuasi-relativista: $\frac{E_s - \mathcal{V}}{2m_0 c^2} \gg 1$ a primer orden y resolviendo para las componentes Υ_1 y Υ_2 se obtienen tres correcciones a la energía de Schrödinger:

$$E_s \Upsilon = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \mathcal{V} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_0^3 c^2} - \frac{\hbar^2}{m_0^2 c^2} \nabla^2 \mathcal{V} - \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \nabla \mathcal{V} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}) \right) \Upsilon, \quad (4.6)$$

donde los primeros dos términos son la energía de Schrödinger y el potencial, el tercero es una corrección a la energía cinética, el cuarto es el llamado término de Darwin y el último es el término de interacción espín-órbita. Considerando un potencial central, este

**

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I} \end{pmatrix}$$

Siendo $\boldsymbol{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli e \mathbb{I} la matriz identidad 2x2.

último término puede reescribirse como:

$$H_{SO} = \frac{1}{2m_0^2 c^2} \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}), \quad (4.7)$$

donde \mathbf{L} es el momento orbital y \mathbf{S} es el espín. De ahí el nombre de acoplamiento o interacción espín órbita; este procedimiento se encuentra descrito con mayor detalle en el Apéndice B.

La interacción espín-órbita atómica puede verse como resultado de la aparición de un campo magnético efectivo desde el marco de referencia del electrón en reposo. El movimiento del núcleo respecto al electrón constituye una corriente eléctrica. Al aplicar una transformación de Lorentz al campo eléctrico, el campo magnético visto por el electrón será:

$$\mathcal{B} = \frac{\mathcal{E} \times \mathbf{v}}{c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (4.8)$$

donde \mathbf{v} es la velocidad orbital, esta ecuación no es completamente correcta, L. Thomas demostró en 1926 que la transformación de Lorentz es incorrecta por un factor de 1/2 causado por la aceleración de la órbita [38]. Siendo el momento angular intrínseco del electrón $\boldsymbol{\mu}_e$, su energía de interacción con \mathcal{B} será:

$$E_{SO} = -\mathcal{B} \cdot \boldsymbol{\mu}_e, \quad (4.9)$$

al tener esta energía un término procedente de momento orbital y uno del momento intrínseco, puede mostrarse que este resultado es igual al obtenido por la aproximación a la ecuación de Dirac, tras aplicar la corrección de Thomas e incluir la constante giro-magnética g_0 de Landé para electrones libres, que Dirac mostró es $g_0 \sim 2$ [29].

4.2.1. SOC en sólidos. Interacciones de Rashba (R) y Dresselhaus (D[hkl])

En un sólido cristalino, un electrón en la banda de conducción, no experimenta una atracción nuclear fuerte debido a la distancia entre este y el núcleo, pero aun así puede sentir un gradiente de potencial eléctrico debido a efectos de la red cristalina. Si el electrón siente un gradiente debido al potencial interno por la discontinuidad en la banda de conducción en una heteroestructura o a un campo eléctrico aplicado, se inducirá el acoplamiento espín órbita. A esta interacción se le conoce como interacción de Rashba y es el acoplamiento espín-órbita debido a la asimetría de inversión estructural, este acoplamiento permite la interacción con el espín a través de campos eléctricos.

El hamiltoniano de la interacción espín-órbita de Rashba se expresa como:

$$H_R = \frac{\alpha_R}{\hbar} \cdot [\boldsymbol{\sigma} \times (\mathbf{p} + e\mathbf{A})], \quad (4.10)$$

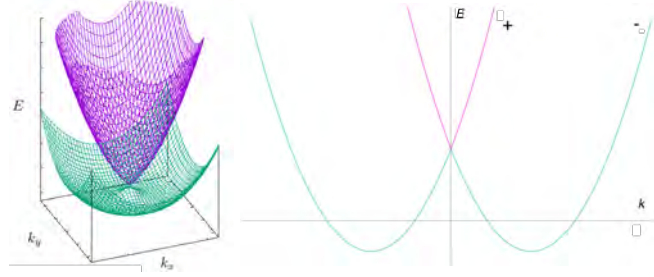


FIGURA 4.1: Esquema de las superficies de energía (izquierda) y su proyección sobre un plano k, E (derecha) para el hamiltoniano de acoplamiento espín-órbita de Rashba.

donde \mathcal{E} es el campo eléctrico aplicado y α es la constante de Rashba, propia de cada sistema, esta puede calcularse de la siguiente forma:

$$\alpha_R = \frac{\pi e \hbar^2}{m^*} \frac{\Delta_s (2E_g + \Delta_s)}{E_g (E_g + \Delta_s) (3E_g + 2\Delta_s)} \mathcal{E}(\mathbf{r}) = a \mathcal{E}(\mathbf{r}), \quad (4.11)$$

en este caso, E_g es el ancho de la brecha prohibida, Δ_s es la energía de separación espín-órbita generada en la banda de conducción, y a es una constante del material [29]. Para estructuras semiconductoras como AlAs/InGaAs se han encontrado valores de $\alpha_R \sim 0,67 \times 10^{-11} \text{ eV m}$ en AlAs/InGaAs y hasta dos ordenes de magnitud mayores en estructuras metálicas como la aleación BiAg(111) con $\alpha_R \sim 3,7 \times 10^{-10} \text{ eV m}$ [39]. Para una heteroestructura, donde la simetría de inversión espacial se ha roto en la dirección \hat{z} , el hamiltoniano de Rashba puede escribirse como:

$$H_R = \alpha_R [\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{k} \times \hat{z})], \quad (4.12)$$

donde \hat{z} es un vector unitario perpendicular al 2DEG. De acuerdo con la Ecuación (3.2), los estados de energía para un semiconductor con acoplamiento de Rashba serán:

$$E_\lambda = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \alpha k, \quad (4.13)$$

que puede reescribirse como:

$$E_\lambda = \frac{\hbar^2}{2m} [(k + \lambda k_\alpha)^2 - k_\alpha^2], \quad (4.14)$$

donde $k_\alpha = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$. Esta ecuación permite ver la forma que tendrán las bandas del sistema, mostradas en la Figura 4.1, en una proyección sobre un plano perpendicular a k_x y a k_y pueden verse como dos parábolas desplazadas λk_α sobre el eje k y $-\frac{\hbar^2 k_\alpha^2}{2m}$ en el eje de la energía, las superficies energéticas se generan al revolucionar estas parábolas respecto el eje de la energía. Las energías en este caso son isotrópicas, es decir la magnitud de \mathbf{k} no depende del ángulo θ .

Mientras que la interacción de Rashba puede verse como resultado de la discontinuidad de un material causada por interfaces con otros materiales, la interacción de

Dresselhaus está relacionada con el cristal en bulto. Después del estudio de las consecuencias del acoplamiento espín-órbita se descubrió que la asimetría de inversión espacial, en cristales no centro-simétricos producía un desdoblamiento en la energía de electrones y huecos con vector de onda $\mathbf{k} \neq 0$, aun con un campo magnético externo $\mathbf{B} = 0$. A través de múltiples herramientas, se ha determinado que la contribución de menor orden en \mathbf{k} del acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus para electrones en la banda de conducción es:

$$H_D = \gamma[\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (4.15)$$

donde γ es el parámetro efectivo de acoplamiento. Puede verse que el desdoblamiento de estados es dependiente de k^3 mientras que con el acoplamiento de Rashba es dependiente de k .

En este sistema, a pesar de mantenerse la simetría de inversión temporal de la Ecuación 4.1, se rompe la simetría de inversión espacial de la Ecuación 4.2, levantando la degeneración para sistemas con espín 1/2.

Cuando el sistema se reduce hasta formar un pozo cuántico, la componente del vector de onda perpendicular a la dirección de confinamiento se cuantiza como $k_z \sim \frac{\pi}{L_z}$ donde L_z es el ancho del pozo.

El acoplamiento de Dresselhaus para sistemas cuasi-bidimensionales es sensible a la dirección de crecimiento del pozo, por lo que el hamiltoniano será diferente para cada dirección cristalina. En estos pozos se promedia k_z sobre el plano como $k_z \rightarrow \langle \hat{k}_z \rangle = 0$ y $k_z^2 \rightarrow \langle \hat{k}_z^2 \rangle$, permitiendo escribir a la ecuación (4.15) para un pozo angosto en la dirección [001] como:

$$H_D^{[001]} = \gamma \left[k_y \sigma_y \langle \hat{k}_z^2 \rangle - k_x \sigma_x \langle \hat{k}_z^2 \rangle + k_x \sigma_x k_y^2 - k_y \sigma_y k_x^2 \right], \quad (4.16)$$

en donde al aproximar para valores de k pequeños, los términos cúbicos son despreciados y se obtiene:

$$H_D^{[001]} = \gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) \quad (4.17)$$

4.3. Polarización de espín para un TLS

El valor esperado de polarización del espín está dado por:

$$\langle \mathbf{S} \rangle_\lambda = \langle \lambda | \mathbf{S} | \lambda \rangle \quad (4.18)$$

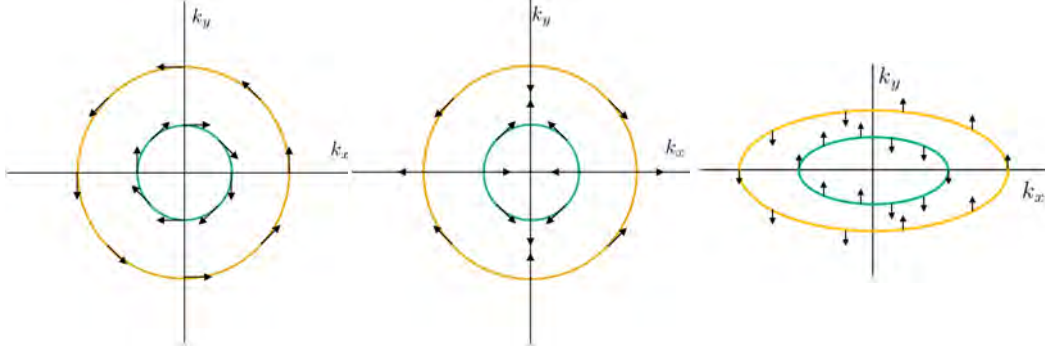


FIGURA 4.2: Esquema de contornos de energía con el valor esperado de polarización de espín para Rashba (izquierda) y Dresselhaus [001] (centro) y Dresselhaus[110] (derecha).

donde $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ es el operador de espín. A partir de la Ecuación (3.7), el vector esperado de polarización de espín $\langle \mathbf{S} \rangle$ para el hamiltoniano de Rashba será:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{R,\lambda} &= \frac{\lambda\hbar}{2} \left[\sin(\theta)\hat{\mathbf{i}} - \cos(\theta)\hat{\mathbf{j}} \right] \\ &= -\frac{\lambda\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &= \frac{\lambda\hbar}{2} \hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

mientras que para el hamiltoniano de Dresselhaus [001] será:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D[001],\lambda} &= \frac{\lambda\hbar}{2} \left[-\cos(\theta)\hat{\mathbf{i}} + \sin(\theta)\hat{\mathbf{j}} \right] \\ &= \frac{\lambda\hbar}{2} \left\{ [\sin^2(\theta) - \cos^2(\theta)] \hat{\mathbf{k}} + 2\sin(\theta)\cos(\theta)\hat{\boldsymbol{\theta}} \right\}, \end{aligned} \quad (4.20)$$

De igual forma, para el hamiltoniano de Dresselhaus [110] será:

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{D[110],\lambda} = \frac{\lambda\hbar}{2} |k_x| \hat{\mathbf{z}}. \quad (4.21)$$

En la Figura 4.2 pueden observarse las representaciones del valor esperado de polarización de espín para el hamiltoniano de Rashba, para el hamiltoniano de Dresselhaus en la dirección [001] y para Dresselhaus en la dirección [110] a una energía fija. Puede observarse que para D[110], $\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle \perp k_x, k_y$. La presencia de simetría de inversión temporal asegura que la polarización en \mathbf{k} , sea contraria a la polarización en $-\mathbf{k}$ por lo que la suma de todas las contribuciones será:

$$\sum_{\lambda} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\lambda} = \mathbf{0}. \quad (4.22)$$

4.4. Hamiltonianos generalizados para acoplamiento espín-órbita

Debido a la relevancia de la interacción espín-órbita (SOC por sus siglas en inglés) se han propuesto múltiples hamiltonianos genéricos que describen algún grupo de sistemas con SOC como sistemas de dos niveles.

Paun y T.K Ghosh [40] propusieron el hamiltoniano:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{i\alpha^l}{2\hbar^l} (p_-^l \sigma_+ - p_+^l \sigma_-), \quad (4.23)$$

en el que k es el módulo del vector de onda en el plano $k_x, k_y, p_{\pm} = p_x \pm ip_y, \sigma_{\pm} = \sigma_x \pm i\sigma_y$ y l toma valores discretos $l = [0, 3]$. En el caso $l = 0$ el hamiltoniano representa al efecto Zeeman, con $l = 1$ modela un gas de electrones bidimensional con acoplamiento de Rashba o Dresselhaus lineal en k , con $l = 2$ representa SOC en un gas bidimensional de huecos pesados y con $l = 3$ modela SOC de Rashba para huecos pesados.

Por su parte C. M. Wang *et. al.* [41] proponen un hamiltoniano del tipo:

$$H = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}(\mathbf{k}), \quad (4.24)$$

definiendo al campo $\mathbf{b}(\mathbf{k})$ como:

$$b_x(\mathbf{k}) + ib_y(\mathbf{k}) = \tilde{\alpha} k^{M_1} \sin^\lambda(M_2\theta)^\lambda e^{iM_3\theta}, \quad b_z = 0, \quad (4.25)$$

donde $\tilde{\alpha} = \alpha_r + i\alpha_i, \lambda = 0, 1, M_1, M_2, M_3 \in \mathbb{Z}$, dependiendo de los parámetros, este hamiltoniano puede modelar sistemas con SOC de Rashba, Dresselhaus lineal y Dresselhaus cúbico.

De igual forma T.W. Chen y G.Y. [42] proponen el hamiltoniano:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + A(\mathbf{k})\sigma_x - B(\mathbf{k})\sigma_y, \quad (4.26)$$

en él, $A(\mathbf{k})$ y $B(\mathbf{k})$ son funciones que describen la dispersión energética causada por el SOC. En general $A(\mathbf{k}) = \eta_i^A k_i + \eta_{ij}^A k_{ij} + \dots$ y $B(\mathbf{k}) = \eta_i^B k_i + \eta_{ij}^B k_{ij} + \dots$, donde los coeficientes η son determinados por la simetría del sistema. Este hamiltoniano es útil para representar acoplamiento conjunto de Rashba y Dresselhaus lineal en k .

4.4.1. Hamiltoniano lineal en \mathbf{k} para un gas de electrones bidimensional (2DEG) con SOC.

Para un gas de electrones cuasi-bidimensional (2DEG) crecido en la dirección z con acoplamiento espín-órbita (SOC) de Rashba o Dresselhaus, usando el hamiltoniano de la Ecuación (3.1), el parámetro $E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$ es el término de energía cinética de los electrones libres en el plano xy del gas, donde k es la magnitud del vector de onda bidimensional

del electron $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ y m^* es la masa efectiva del electrón en el gas.

Las componentes necesarias para que el campo Ω sea un campo espín órbita deben ser proporcionales a $\frac{\hbar}{2}$ y deben ser funciones de las componentes del vector de onda bidimensional $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Entonces el hamiltoniano espín-órbita será:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \mathbb{I} + \frac{\hbar}{2} \Omega(k_x, k_y) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (4.27)$$

Si la dependencia de Ω en k es lineal, sumando sobre índices repetidos las componentes puede expresarse como:

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i = \mu_{ij} k_j, \quad (4.28)$$

donde $i, j = x, y, z$, siendo μ_{ij} una matriz específica para cada sistema. Cabe destacar que todos los elementos μ_{iz} serán cero debido a la confinación del gas en la dirección de k_z .

Expresando a las componentes del campo Ω respecto a las coordenadas polares k y θ :

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i = \frac{\hbar}{2} k [\mu_{ix} \cos(\theta) + \mu_{iy} \sin(\theta)], \quad (4.29)$$

y su norma:

$$\frac{\hbar}{2} \Omega = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\Omega_i \Omega_i} = k G(\theta) \quad (4.30)$$

donde:

$$G^2(\theta) = \frac{1}{2} (\mu_{ix} \mu_{ix} + \mu_{iy} \mu_{iy} + (\mu_{ix} \mu_{ix} + \mu_{iy} \mu_{iy}) \cos(2\theta) + 2\mu_{ix} \mu_{iy} \sin(2\theta)) \quad (4.31)$$

Para el caso de SOC Rashba:

$$\frac{\hbar}{2} \Omega = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix} = \alpha k \begin{pmatrix} \sin(\theta) \\ -\cos(\theta) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Las matrices para acoplamiento de Dresselhaus y Rashba con Dresselhaus en las orientaciones [111], [001] y [110] pueden verse en el Cuadro 4.1.

Orientación	Dresselhaus	Rashba+ Dresselhaus
[111]	$\begin{pmatrix} 0 & \beta_{[111]} & 0 \\ -\beta_{[111]} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \alpha + \beta_{[111]} & 0 \\ -(\alpha + \beta_{[111]}) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
[001]	$\begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & \alpha & 0 \\ -\alpha & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$
[110]	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}$

CUADRO 4.1: Matrices $\mu_{i,j}$ para sistemas con acoplamiento de Dresselhaus y Rashba con Dresselhaus en las direcciones [111], [001] y [110].

Las coordenadas de x , y y z dependerán de la orientación del pozo, de esta forma, las triadas $\{x, y, z\}$ para la cara [001] estarán en las direcciones $\{[100], [010], [001]\}$, para la cara [110], $\{[\bar{1}10], [001], [110]\}$ y para la cara [111], $\{[11\bar{1}], [\bar{1}10], [111]\}$ [43].

De esta forma, para las caras cristalinas [001], [111] y [110] los hamiltonianos de acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus y sus respectivos campos espín-órbita son:

$$H_D^{[001]} = \beta_{[001]}(k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) \quad \rightarrow \quad \frac{\hbar}{2} \Omega_D^{[001]} = \beta_{[001]} \begin{pmatrix} -k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.33a)$$

$$H_D^{[111]} = \beta_{[111]}(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \quad \rightarrow \quad \frac{\hbar}{2} \Omega_D^{[111]} = \beta_{[111]} \begin{pmatrix} k_y \\ -k_x \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.33b)$$

$$H_D^{[110]} = \beta_{[110]} k_x \sigma_z \quad \rightarrow \quad \frac{\hbar}{2} \Omega_D^{[110]} = \beta_{[110]} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ k_x \end{pmatrix}, \quad (4.33c)$$

donde $\beta_{[001]} = \gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle$, $\beta_{[111]} = \frac{2\gamma}{\sqrt{3}} \langle \hat{k}_z^2 \rangle$, $\beta_{[110]} = \frac{\gamma}{2} \langle \hat{k}_z^2 \rangle$.

Para un campo Ω del tipo:

$$\begin{aligned} \Omega &= \Omega_x \hat{e}_1 + \Omega_y \hat{e}_2 + \Omega_z \hat{e}_3 \\ &= f_1(k) f_2(\theta) \hat{e}_1 + g_1(k) g_2(\theta) \hat{e}_2 + h_1(k) h_2(\theta) \hat{e}_3 \end{aligned} \quad (4.34)$$

en una base arbitraria $\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3$ con factores de escala l_1, l_2, l_3 a partir de la Ecuación (3.13) el término vectorial de la conexión de Berry \mathcal{A}_λ será:

$$\Omega_x \nabla \Omega_y - \Omega_y \nabla \Omega_x = l_1 g_2(\theta) f_2(\theta) [g_1'(k) - f_1'(k)] \hat{e}_1 + l_2 g_1(k) f_1(k) [g_2'(\theta) - f_2'(\theta)] \hat{e}_2, \quad (4.35)$$

donde f_i y g_i son funciones genéricas de k y θ respectivamente. De aquí puede verse que

si dos componentes de Ω comparten la dependencia respecto a una variable, la componente de la conexión de Berry correspondiente a esa variable se anulará.

De acuerdo con las Ecuaciones (3.13), (4.29) y (4.30) puede calcularse \mathcal{A}_λ como:

$$\mathcal{A}_\lambda = \frac{1}{2\Omega(\Omega + \lambda\Omega_z)} (\Omega_x \nabla \Omega_y - \Omega_y \nabla \Omega_x) \quad (4.36a)$$

$$= \frac{1}{2k^2 J(\theta)} (\Omega_x \nabla \Omega_y - \Omega_y \nabla \Omega_x) \quad (4.36b)$$

con:

$$J(\theta) = G^2(\theta) + \lambda G(\theta) (\mu_{zx} \cos(\theta) + \mu_{zy} \sin(\theta)), \quad (4.37)$$

donde usando coordenadas esféricas:

$$(\Omega_x \nabla \Omega_y - \Omega_y \nabla \Omega_x) = k \left(\Omega_x \frac{1}{k} \frac{\partial \Omega_y}{\partial \theta} - \Omega_y \frac{1}{k} \frac{\partial \Omega_x}{\partial \theta} \right) \hat{\theta}. \quad (4.38)$$

de forma que \mathcal{A}_λ será:

$$\mathcal{A}_\lambda = \frac{1}{2k J(\theta)} (\mu_{xx} \mu_{yy} - \mu_{xy} \mu_{yx}) \hat{\theta} \quad (4.39)$$

Como puede observarse, se cumplen las condiciones de la Ecuación (4.35) para que la primer componente se anule.

Puede verse que si se racionaliza la Ecuación (4.39) con el factor $(G(\theta) - (\mu_{zi} k_i)) / (G(\theta) - (\mu_{zi} k_i))$ se obtiene

$$\mathcal{A}_\lambda = (\mu_{xx} \mu_{yy} - \mu_{xy} \mu_{yx}) \frac{1}{2G(\theta; \mu_{zi} = 0)} \left(1 - \lambda \frac{\mu_{zi} k_i}{G(\theta)} \right) \quad (4.40)$$

La función $J(\theta)$ para el sistema de Rashba es:

$$J_R(\theta) = \alpha^2 \quad (4.41)$$

En el Cuadro 4.2 pueden verse las funciones $J(\theta)$ para otros sistemas con acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus.

$[jkl]$	$J(\theta)$ para Dresselhaus $[jkl]$	$J(\theta)$ para Rashba+ Dresselhaus $[jkl]$
[111]	$\beta_{[111]}^2$	$(\alpha + \beta_{[111]})^2$
[001]	$\beta_{[001]}^2$	$\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \sin(2\theta)$
[110]	$\beta_{[110]}^2 \cos^2(\theta)(\lambda + 1)$	$\frac{1}{2} \left(2\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 (1 + \cos(2\theta)) + \lambda \cos(\theta) G(\theta) \right)$

CUADRO 4.2: Funciones $J(\theta)$ para sistemas con acoplamiento de Dresselhaus y Rashba con Dresselhaus en las direcciones [111], [001] y [110].

Con el diferencial de línea $d\mathbf{R} = dk\hat{\mathbf{k}} + k d\theta\hat{\boldsymbol{\theta}}$, la fase de Berry para estos sistemas será:

$$\gamma_\lambda(C) = \oint_C \mathcal{A}_\lambda \cdot d\mathbf{R} = \frac{1}{2}(\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx}) \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{J(\theta)}, \quad (4.42)$$

donde la trayectoria escogida es un círculo unitario. Es posible observar que esta forma es general para cualquier sistema que pueda escribirse como el producto $\boldsymbol{\Omega}(k, \theta) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ donde $\boldsymbol{\Omega}(k, \theta)$ es lineal en k (Ecuación 4.28). Esta será la formula usada para calcular las fases de Berry asociadas a los campos de la forma $\boldsymbol{\Omega}(k, \theta) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ con $\Omega_i \propto k$

La fase también puede escribirse a partir de la Ecuación (4.40) como:

$$\gamma_\lambda(C) = (\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx}) \left(\int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{2G(\theta; \mu_{zi} = 0)} - \lambda \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{2G(\theta; \mu_{zi} = 0)} \frac{\mu_{zi}k_i}{G(\theta)} \right) \quad (4.43)$$

En la Sección 5.1.5 del siguiente capítulo se prueba que la primer integral es igual a $-\pi \operatorname{sgn}(\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx})$.

Capítulo 5

Cálculo de fases geométricas en sistemas bidimensionales.

En este capítulo se calculan las fases de Berry para los siguientes sistemas:

- 2DEG con SOC R+D para las caras cristalinas [001], [110] y [111].
- Grafeno: lámina descrita por un hamiltoniano de Weyl con $H \propto k$ y bicapa descrita por un hamiltoniano masivo de Dirac con $H \propto k^2$
- Sistema bidimensional de Dirac, descrito por un campo Ω tal que $\Omega_{\parallel} \parallel \mathbf{k}$ y Ω_z es independiente de \mathbf{k} .
- Sistema tipo Rashba de la forma $\Omega_{\parallel} \sim \alpha f(k)\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}$ y Ω_z independiente de \mathbf{k} .
- SOC R+D con la adición de un campo magnético externo.

Puede notarse que debido a la presencia de campos externos solo el primer caso conservará la simetría de inversión temporal.

5.1. Fases de Berry para 2DEG con SOC R+D[hkl]

En esta sección se muestran los casos de acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus en las direcciones [111], [001] y [110] y las combinaciones de acoplamiento de Rashba con acoplamiento de Dresselhaus. La fase de Berry se calculará a partir de la Ecuación (4.42) y las trayectorias de integración usadas serán los círculos ecuatoriales en el plano k_x, k_y .

Las caras [111], [001] y [110] son las caras con bajos índices de Miller más comúnmente usadas en el estudio de SOC en sólidos. Cada caso tendrá distintas propiedades debido a las condiciones de simetría del sistema [29].

El sistema con SOC R+D[111] tiene la misma simetría que el sistema con SOC R. Los sistemas en las direcciones [111] y [001] presentan un campo espín-órbita paralelo al plano k_x, k_y , mientras que el sistema con SOC D[110] presenta un campo perpendicular al plano, su valor esperado de polarización de espín puede verse en la Figura 4.1.

5.1.1. SOC de Rashba

Este caso es independiente de la cara cristalina y la separación entre bandas es isotrópica para todas las direcciones del vector \mathbf{k} en el plano k_x, k_y . Para el sistema con SOC de Rashba, con el campo $\frac{\hbar}{2}\Omega$ mostrado en la Ecuación (4.32), usando el prefactor $\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx} = \alpha^2$ y la función $J(\theta) = \alpha^2$ mostrada en la Ecuación (4.41) la fase de Berry a través de la Ecuación (4.42) será:

$$\begin{aligned}\gamma_{\lambda,R} &= -\frac{\alpha^2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\alpha^2} \\ &= -\pi.\end{aligned}\tag{5.1}$$

5.1.2. R+D[111]

Para la cara cristalina [111], el acoplamiento de Dresselhaus tiene una separación isotrópica de espines al igual que el caso de Rashba.

Para el sistema con SOC de Rashba y Dresselhaus en la dirección [111], con el prefactor $\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx} = (\alpha + \beta_{[111]})^2$, y la función $J(\theta) = (\alpha + \beta_{[111]})^2$, mostrada en el Cuadro 4.2, usando la Ecuación (4.42) la fase de Berry será:

$$\begin{aligned}\gamma_{\lambda,R+D}^{[111]} &= -\frac{(\alpha + \beta_{[111]})^2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(\alpha + \beta_{[111]})^2} \\ &= -\pi.\end{aligned}\tag{5.2}$$

Este resultado es equivalente a sustituir α por $\alpha + \beta_{[111]}$ en la fase de Berry para el caso de Rashba puro.

5.1.3. R+D[110]

Esta cara es la única de las consideradas donde la componente del campo $\Omega_z \neq 0$. En este sistema cuando $\alpha = 0$, y el acoplamiento de Rashba no está presente, el espín se conserva debido a la simetría del sistema.

Para esta orientación, a partir de la Ecuación (4.42), con el prefactor $\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx} = \alpha^2$ y la función $J(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 (1 + \cos(2\theta)) + \lambda \cos(\theta) \frac{\hbar}{2}\Omega/k$, mostrada

en el Cuadro 4.2, la fase de Berry será:

$$\gamma_{\lambda,R+D}^{[110]} = -\frac{\alpha^2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 (1 + \cos(2\theta)) + \lambda \cos(\theta) \frac{\hbar}{2k} \Omega} \quad (5.3a)$$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left(1 - \lambda\beta \frac{\cos(\theta)}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 \cos^2(\theta)}} \right) d\theta \quad (5.3b)$$

$$= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} (1 - F(\theta)) d\theta \quad (5.3c)$$

$$= -\pi + \underbrace{\int_0^{\frac{\pi}{2}} F(\theta) d\theta}_{I_1} + \underbrace{\int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} F(\theta) d\theta}_{I_2} + \underbrace{\int_{\pi}^{\frac{3\pi}{2}} F(\theta) d\theta}_{I_3} + \underbrace{\int_{\frac{3\pi}{2}}^{2\pi} F(\theta) d\theta}_{I_4} \quad (5.3d)$$

$$= -\pi, \quad (5.3e)$$

donde al hacer la sustitución $\theta \rightarrow \theta' = \pi - \theta \Rightarrow I_2, I_2 = -I_1$, de igual forma al aplicar $\theta \rightarrow \theta' = 3\pi - \theta \Rightarrow I_4, I_4 = -I_3$, anulando la integral por simetría.

Para este caso, puede verse que cuando $\alpha = 0$, $F(\theta) = 1$, anulando la fase de Berry, por lo que el SOC de Dresselhauss puro en la dirección [110] no produce una fase de Berry.

5.1.4. R+D[001]

En esta cara puede verse una competencia entre α y $\beta_{[001]}$ y cuando $\alpha = \beta_{[001]}$ los estados $|\lambda\rangle$ se vuelven independientes de \mathbf{k} y el campo Ω apunta siempre en una misma dirección. Para esta orientación cristalina, el prefactor $\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx} = \alpha^2 - \beta_{[001]}^2$ y la función $J(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \sin(2\theta)$, mostrada en el Cuadro 4.2, así la fase de Berry a partir de la Ecuación (4.42) será:

$$\gamma_{\lambda,R+D}^{[001]} = -\frac{\alpha^2 - \beta_{[001]}^2}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \sin(2\theta)} \quad (5.4)$$

Al sustituir $\theta \rightarrow \theta' = \theta - \pi$ resulta

$$\gamma_{\lambda,R+D}^{[001]} = -\frac{\alpha^2 - \beta_{[001]}^2}{2} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]} \sin(\theta)}, \quad (5.5)$$

llevando la integral al plano complejo con $z = e^{i\theta}$, dentro de $\zeta : |z| = 1$ se obtiene

$$\gamma_{\lambda,R+D}^{[001]} = -\frac{\alpha^2 - \beta_{[001]}^2}{2\alpha\beta} \oint_{\zeta} \frac{dz}{z \left(\frac{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2}{\alpha\beta_{[001]}} - \frac{1}{i}(z - z^{-1}) \right)}. \quad (5.6)$$

Al factorizar y reordenar el denominador resulta

$$\gamma_{\lambda, R+D}^{[001]} = i \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2\alpha\beta} \oint_{\zeta} \frac{dz}{(z + i\frac{\alpha}{\beta})(z - i\frac{\beta}{\alpha})}, \quad (5.7)$$

donde al aplicarse el teorema de Cauchy-Goursat, teniendo en cuenta que el polo positivo queda fuera de ζ se obtiene

$$\gamma_{\lambda, R+D}^{[001]} = -\text{sgn}(\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)\pi, \quad (5.8)$$

donde $\text{sgn}(x)$ es la función signo. Puede verse que cuando $\alpha = 0$, $\gamma_{\lambda} = -\pi$.

Este resultado coincide con lo reportado por S.Q. Shen [44], así como con lo reportado por Murakawa *et. al.* [12].

5.1.5. Caso con $\Omega_z = 0$

La Ecuación (5.4) puede generalizarse a casos con $\Omega_z = 0$, por conveniencia, a partir de las matrices μ en el Cuadro 4.1 se definen los vectores:

$$(\boldsymbol{\mu}_i)_j = \mu_{ji}, \quad (5.9)$$

con $i, j = x, y, z$.

La fase de Berry a partir de la Ecuación (4.42) para sistemas con $\Omega_z = 0$, de forma similar a la sección anterior es:

$$\gamma_{\lambda} = -\frac{[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\cos^2(\theta)\mu_{ix}\mu_{ix} + 2\sin(\theta)\cos(\theta)\mu_{ix}\mu_{iy} + \sin^2(\theta)\mu_{iy}\mu_{iy}} \quad (5.10)$$

Tomando ventaja de la simetría del integrando, se cambian los límites de integración a $[0, \pi]$ y se duplica el integrando, a su vez se usan las identidades $\cos^2(\theta) = [\cos(2\theta)+1]/2$, $\sin^2(\theta) = [1 - \cos(2\theta)]/2$ y $\sin(\theta)\cos(\theta) = \sin(2\theta)/2$, y se hace la sustitución $2\theta \rightarrow \theta$, al reordenar el integrando se obtiene

$$\gamma_{\lambda} = -\frac{[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{(\mu_{ix}\mu_{ix} - \mu_{iy}\mu_{iy})\cos(\theta) + \sin(\theta)\mu_{ix}\mu_{iy} + \mu_{ix}\mu_{ix} + \mu_{iy}\mu_{iy}}, \quad (5.11)$$

llevando la integral al plano complejo dentro de la región $\zeta : |z| = 1$ con $z = e^{i\theta}$ se obtiene

$$\gamma_{\lambda} = -\frac{[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z}{2i} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{\frac{z}{2}[(\mu_{ix}\mu_{ix} - \mu_{iy}\mu_{iy})(z + z^{-1}) - i(z - z^{-1})\mu_{ix}\mu_{iy} + \mu_{ix}\mu_{ix} + \mu_{iy}\mu_{iy}]} \quad (5.12)$$

donde se puede agrupar a los términos en potencias de z de la forma:

$$\gamma_\lambda = -\frac{[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z}{2i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{Az^2 + Bz + C} \quad (5.13)$$

con $A = (\mu_{ix} - i\mu_{iy})^2$, $B = \mu_{ix}\mu_{ix} + \mu_{iy}\mu_{iy}$ y $C = 2i + \mu_{ix}\mu_{ix} - \mu_{iy}\mu_{iy}$.

Factorizando el denominador con $z_{\pm} = (-B \pm \sqrt{B^2 - 2AC})/(2A)$ resulta:

$$\gamma_\lambda = -\frac{[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z}{2i} \oint_{\mathcal{C}} \frac{dz}{(z + z_+)(z + z_-)} \quad (5.14)$$

Al aplicar el teorema de Cauchy-Goursat y simplificar la fase toma la forma

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda &= [\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z \pi \frac{1}{z_+ - z_-} \\ &= [\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z \pi \frac{1}{|[\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z|} \\ &= -\text{sgn}([\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y]_z) \pi, \end{aligned} \quad (5.15)$$

A excepción del caso D[110] en todos los resultados mostrados la fase de Berry $\gamma_\lambda(C) = -\pi$, esto puede verse como consecuencia de que en la vecindad de la degeneración, el sistema se reduce a bandas lineales con un punto de degeneración (punto diabólico), como puede verse en la Figura 5.1.

El caso del punto diabólico fue el usado por Berry para ilustrar el artículo original de la fase geométrica, en un sistema con espín 1/2 en un campo magnético B de magnitud constante que cambia de dirección adiabáticamente. La fase resultante es la mitad del ángulo sólido subtendido por la superficie encerrada por trayectoria sobre la cual se realiza la integral centrada en el punto $\mathbf{k} = 0$, para la trayectoria usada en este capítulo el ángulo sólido es de 2π . En el caso propuesto por Berry, la curvatura $\mathcal{B}_\lambda = -\lambda \mathbf{B}/2B^2$ tiene la forma del campo de un monopolo magnético de magnitud $-1/2$ en la degeneración siendo γ_λ el flujo del campo de dicho monopolo a través de la superficie sobre la cual se integra [1, 13].

5.2. Grafeno y bicapa de grafeno

El carbono forma parte de la base de la vida y se presenta de multiples formas en la naturaleza con distintas propiedades, una de las formas de carbono más estudiadas recientemente es el grafeno: una monocapa de átomos de carbono en una red hexagonal con propiedades interesantes como sus bandas de dispersión lineales cerca de los puntos de alta simetría en el espacio k o un efecto Hall desplazado relacionado con la fase de Berry estudiado por Jiamin Xue [45], que ha sido medido experimentalmente

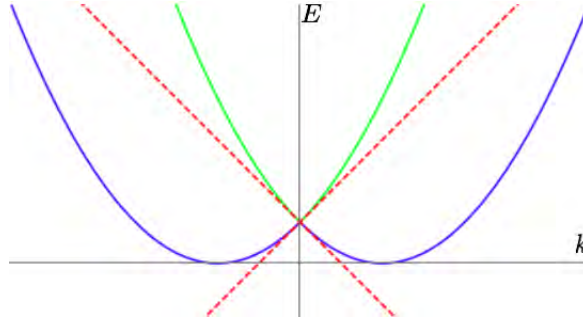


FIGURA 5.1: Estructura de bandas de un hamiltoniano con SOC R+D (verde y azul) y degeneración en un punto dábólico (rojo).

(así como la fase de Berry, indirectamente) por Yuanbo Zhang *et.al.* [46].

En esta sección se calcularán las fases de Berry para una lámina de grafeno y una bicapa de grafeno.

Los hamiltonianos tratados en esta sección son los usados por S.G. Tan *et. al.* en su estudio de la topología del transporte electrónico en sistemas adiabáticos espintrónicos y en grafeno [47].

5.2.1. Hamiltoniano de una lámina de grafeno (semimetal de Weyl).

El hamiltoniano de Weyl describe fermiones tipo Dirac sin masa, estos son útiles para describir electrones en sistemas donde actúan como si no tuviesen masa, como es el caso de las zonas de alta simetría con dispersión lineal en el grafeno en la cercanía de la energía de Fermi.

El hamiltoniano de Weyl usado por S.G. Tan *et. al.* toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned} H_W &= \hbar\nu_f \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \\ &= \hbar\nu_f (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y). \end{aligned} \quad (5.16)$$

A partir de este hamiltoniano, se obtiene un campo $\hbar/2\Omega$ de la forma:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2}\Omega_W &= \hbar\nu_f (k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}}) \\ &= \hbar\nu_f \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.17)$$

de aquí, pueden obtenerse: la magnitud del campo $\frac{\hbar}{2}\Omega = \frac{kA}{mu_B}$ y los vectores $\boldsymbol{\mu}_x = \frac{kA}{mu_B} \hat{\mathbf{x}}$ y $\boldsymbol{\mu}_y = \frac{kA}{mu_B} \hat{\mathbf{y}}$.

Así, su conexión de Berry será:

$$\mathcal{A}_{\lambda,W} = -\frac{1}{2k}\hat{\theta}. \quad (5.18)$$

Al integrar la conexión para encontrar la fase se obtiene:

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda,W} &= \int_0^{2\pi} d\theta \mathcal{A}_{\lambda,W} \cdot k\hat{\theta} \\ &= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} d\theta \\ &= -\pi. \end{aligned} \quad (5.19)$$

5.2.2. Hamiltoniano de una bicapa de grafeno (sistema de Dirac masivo)

Las bicapas de grafeno han sido sujeto de multiples estudios recientemente debido a sus peculiares propiedades, como estados superconductores cuando las láminas de grafeno están a cierto ángulo [48], la posibilidad de modificar el ancho de la banda prohibida y la fase de Berry en función del ángulo y la separación de las láminas [49] o la generación de corrientes de valle por una curvatura de Berry inducida eléctricamente [50].

El hamiltoniano que S.G. Tan *et al.* usan para modelar este sistema, tiene la forma:

$$H_G = \frac{\hbar}{2m} \left(\sigma_x \frac{k_+^2 + k_-^2}{2} - \sigma_y \frac{k_-^2 - k_+^2}{2i} \right). \quad (5.20)$$

De donde puede obtenerse un campo:

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}_G = \hbar\nu[(k_x^2 - k_y^2)\hat{\mathbf{x}} + (2k_x k_y)\hat{\mathbf{y}}]. \quad (5.21)$$

Puede notarse que a diferencia del caso anterior, este campo no puede expresarse de la forma $\frac{\hbar}{2}\Omega_i = \mu_{ij}k_j$, por lo que se usarán las fórmulas generales para el TLS.

La magnitud de este campo es $\frac{k^2}{2\mu_B m}$, con esto, a partir de la Ecuación (3.13) puede calcularse la conexión:

$$\mathcal{A}_{\lambda,G} = -\frac{1}{k}\hat{\theta}, \quad (5.22)$$

siendo así su fase de Berry:

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda,G} &= \int_0^{2\pi} d\theta \\ &= 2\pi \end{aligned} \quad (5.23)$$

Esta es la única fase calculada hasta el momento con una magnitud distinta de π .

5.3. Hamiltoniano de Dirac (aislante de Chern).

Los aislantes de Chern son materiales bidimensionales con una estructura de bandas no trivial, donde por el rompimiento de la simetría de inversión temporal es inducido un efecto tipo Hall en ausencia de campo magnético debido al acoplamiento espín-órbita. Estos se caracterizan por modos de superficie dentro de la brecha prohibida, que surgen de las condiciones locales de frontera. En la Ecuación (5.24) puede verse el hamiltoniano usado para modelar estos sistemas, donde m es descrita como una masa de Dirac finita y ν es la velocidad de la partícula [51].

$$\hat{H}_C = \hbar\nu k_x \sigma_x + \hbar\nu k_y \sigma_y + m\sigma_z. \quad (5.24)$$

Este Hamiltoniano puede reescribirse en la forma $H = \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}^*$, con $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}$:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}_C &= \hbar\nu k_x \hat{\mathbf{x}} + \hbar\nu k_y \hat{\mathbf{y}} + m\hat{\mathbf{z}} \\ &= \hbar\nu \mathbf{k} + m\hat{\mathbf{z}} \end{aligned} \quad (5.25)$$

A partir de este hamiltoniano y usando la Ecuación (4.39) la conexión de Berry será:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{\lambda,C} &= \frac{\sqrt{m^2 + \hbar^2\nu^2 k^2} - \lambda m}{2\hbar^2\nu^2 k^2 \sqrt{m^2 + \hbar^2\nu^2 k^2}} \hbar^2\nu^2 k \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &= \frac{1}{2k} \left(1 - \frac{\lambda m}{\sqrt{m^2 + \hbar^2\nu^2 k^2}} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &= \frac{1}{2k} \left(1 - \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}}, \end{aligned} \quad (5.26)$$

y a partir de la Ecuación (3.26), para coordenadas cilíndricas la curvatura de Berry es:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_{\lambda,C} &= -\frac{\lambda}{2k\Omega^3} \boldsymbol{\Omega} \cdot \left[\frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial \theta} \right] \hat{\mathbf{z}} \\ &= \frac{\lambda \hbar^2 \nu^2}{2\Omega^3} \boldsymbol{\Omega} \cdot \left[(\cos(\theta)\hat{\mathbf{k}} + \sin(\theta)\hat{\boldsymbol{\theta}}) \times (\cos(\theta)\hat{\boldsymbol{\theta}} - \sin(\theta)\hat{\mathbf{k}}) \right] \hat{\mathbf{z}} \\ &= -\hbar^2 \nu^2 \frac{\lambda}{2} \frac{\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{z}}}{\Omega^3} \hat{\mathbf{z}}. \end{aligned} \quad (5.27)$$

Integrando la conexión para obtener la fase se obtiene:

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda,C} &= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left(1 - \lambda \frac{m}{\sqrt{m^2 + \hbar^2\nu^2 k^2}} \right) d\theta \\ &= \pi \left(1 - \lambda \frac{m}{\sqrt{\hbar^2\nu^2 k^2 + m^2}} \right) \\ &= \pi \left(1 - \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega_C} \right) \end{aligned} \quad (5.28)$$

*Nótese que no tiene la forma de la Ecuación (4.28), con $\Omega_i \propto k$

Este mismo resultado puede obtenerse integrando la curvatura:

$$\begin{aligned}
 \gamma_{\lambda,C} &= \lambda \frac{\hbar^2 \nu^2}{2} \int_0^k \int_0^{2\pi} \frac{m}{(m^2 + \hbar^2 \nu^2 k^2)^{3/2}} k d\theta dk \\
 &= \pi \left(1 - \lambda \frac{m}{\frac{\hbar}{2} \Omega_C} \right) \\
 &= \pi \left(1 - \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega_C} \right).
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

La fase está compuesta por dos términos: el primero, π relacionado con los conos de Dirac sin brecha prohibida y el término racional proporcional a la masa de la partícula y con signo distinto para cada banda. La curvatura de Berry es análoga al campo de un monopolo magnético de magnitud $\pm \hbar \nu / 2$ en el origen y está relacionada con el efecto Hall cuántico, que permite modos de conducción de borde [51].

5.4. Sistema tipo Rashba con un campo perpendicular.

Culcer *et. al.* [52] proponen el hamiltoniano:

$$\hat{H}_{A,SO} = H_0 + \alpha f(k) \hat{\mathbf{z}} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}), \tag{5.30}$$

para el estudio de la parte espín-órbita en un semiconductor ferromagnético con efecto Hall anormal (AHE).

En materiales ferromagnéticos el efecto Hall muestra una componente adicional proporcional a la magnetización, como puede observarse en la Ecuación (5.31), donde ρ_{xy} es la componente transversal de la resistividad, R_0 es el coeficiente de Hall, R_s el coeficiente de Hall anómalo, B el campo magnético y M la magnetización del material.

$$\rho_{xy} = R_0 B + R_s M \tag{5.31}$$

La primer componente es el efecto Hall usual mientras que la segunda permite que el material presente un efecto Hall en ausencia de campos magnéticos, este es conocido como efecto Hall anómalo (AHE).

A partir del Hamiltoniano de la Ecuación (5.30) con la adición de un término perpendicular al gas, producto del campo promedio de impurezas magnéticas en el material:

$$\hat{H}_A = H_0 + \alpha f(k) \hat{\mathbf{z}} \cdot (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}) + \xi \hat{\mathbf{z}} \tag{5.32}$$

Culcer *et. al.* [52] afirman que la curvatura de Berry, asumiendo que la banda superior está vacía y la inferior llena, toma la siguiente forma:

$$\mathcal{B}_{-,A} = \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 \xi f(k) \frac{dkf(k)}{dk}}{(\xi^2 + \alpha^2 k^2 f^2(k))^{3/2}} \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.33)$$

Ésta forma coincide con la obtenida a partir de la Ecuación (2.26). Al estar vacía la banda superior y encontrarse la energía de Fermi en la brecha prohibida, la fase de Berry será:

$$\begin{aligned} \gamma_{-,A} &= \iint_{k < k_F} \mathcal{B}_{-} \cdot d\mathbf{S} \\ &= \pi \left(1 - \frac{\xi}{2\sqrt{\alpha^2 k_F^2 f^2(k_F) + \xi^2}} \right), \end{aligned} \quad (5.34)$$

donde $d\mathbf{S} = k dk d\theta \hat{\mathbf{z}}$.

Según Culcer, cuando la temperatura es $T = 0K$ la conductividad para una banda llena es igual a la integral de la componente z de \mathcal{B} sobre la zona de Brillouin y es proporcional a γ . tomando el límite superior como ∞ la conductividad Hall anómala será:

$$\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h} \int_0^\infty dk k (\mathcal{B}_{-,A})_z^\lambda \quad (5.35a)$$

$$= -\frac{e^2}{h} \int_0^\infty dk \frac{1}{2} \frac{\alpha^2 \xi k f(k) \frac{d[kf(k)]}{dk}}{(\xi^2 + \alpha^2 k^2 f^2(k))^{3/2}} \quad (5.35b)$$

$$= -\frac{e^2 \alpha^2 \xi}{2h} \int_0^\infty dw \frac{w}{(\xi^2 + w^2 \alpha^2)^{3/2}} \quad (5.35c)$$

$$= \frac{e^2 \xi}{2h} \left[\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\xi^2 + k^2 f^2(k) \alpha^2}} - \frac{1}{\xi} \right] \quad (5.35d)$$

$$= -\frac{e^2}{2h}, \quad (5.35e)$$

donde se usa el cambio de variable $w = kf(k)$.

Estos resultados pueden reproducirse con la metodología usada en los casos anteriores. Escribiendo al hamiltoniano de la Ecuación (5.30) como:

$$\hat{H}_A = H_0 + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}_A, \quad (5.36)$$

donde el campo $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_A$ será:

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}_A = k_y \alpha f(k) \hat{\mathbf{x}} - k_x \alpha f(k) \hat{\mathbf{y}} + \xi \hat{\mathbf{z}}. \quad (5.37)$$

Puede encontrarse la fase de Berry a través de la conexión con la Ecuación (4.42):

$$\begin{aligned}
\gamma_{\lambda,A} &= \int_0^{2\pi} k \mathcal{A}_\lambda \cdot \hat{\theta} d\theta \\
&= \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \left(1 - \lambda \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \alpha^2 k^2 f^2(k)}} \right) d\theta \\
&= \pi \left(1 - \lambda \frac{\xi}{\sqrt{\xi^2 + \alpha^2 k^2 f^2(k)}} \right) \\
&= \pi \left(1 - \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega_A} \right)
\end{aligned} \tag{5.38}$$

Así se aprecia que la fase reportada por Culcer *et. al.* evaluada en $k = k_F$ es igual a la obtenida. De igual forma a partir de la Ecuación (3.26) puede obtenerse la curvatura mostrada en la Ecuación (5.33) al ser evaluada en $k = k_F$.

Este resultado, tiene la misma forma que el obtenido en las Ecuaciones (5.28) y (5.29) para el caso anterior debido a que sus campos Ω tienen formas parecidas, con Ω_{\parallel} en el plano del gas y Ω_z independiente de k .

5.5. Sistemas con SOC R+D[hkl] en un campo magnético externo.

La adición de campos magnéticos al hamiltoniano de la Ecuación (4.28) puede servir para tomar en cuenta diversos sistemas, como la adición de impurezas magnéticas a un semiconductor o un campo magnético externo.

Puede generalizarse el modelo de la Ecuación (4.28) para sistemas con campo magnético como:

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i = \mu_{ij} k_j + B_i, \tag{5.39}$$

de esta forma la generalización correspondiente para la conexión a partir de la Ecuación (4.39) será:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_\lambda &= \frac{-1}{2\Omega\Omega_\uparrow} \left\{ \hat{\mathbf{z}} \cdot (\mathbf{B} \times [\boldsymbol{\mu}_x \cos(\theta) + \boldsymbol{\mu}_y \sin(\theta)]) \hat{\mathbf{k}} + \right. \\
&\quad \left. - \left[\hat{\mathbf{z}} \cdot \left(\mathbf{B} \times \left(\boldsymbol{\mu}_y \cos(\theta) + \boldsymbol{\mu}_x \sin(\theta) \right) - k \boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y \right) \right] \hat{\boldsymbol{\theta}} \right\}
\end{aligned} \tag{5.40}$$

donde puede verse que $\Omega\Omega_\uparrow = \Omega(\Omega + \lambda\Omega_z)$ no puede separarse en un producto de funciones de k y θ como en la Ecuación (4.39). Siendo:

$$\left(\frac{\hbar}{2} \Omega \right)^2 = \left| \frac{\hbar^2}{4} \Omega_{R+D[hkl]} \right|^2 + |B|^2 + 2\mathbf{B} \cdot \frac{\hbar}{2} \Omega_{R+D[hkl]}. \tag{5.41}$$

Aquí puede verse que en los sistemas donde $\Omega_{R+D[hkl]} \perp \mathbf{B}$, el tercer término se anulará, como en el caso del acoplamiento R+D[111] con un campo perpendicular o el caso con acoplamiento D[110] con un campo paralelo al gas, a diferencia del caso R+D[110] con un campo paralelo, donde el término de acoplamiento del campo SOC con el campo magnético sí estará presente.

La fase de Berry a partir de la Ecuación (5.40) puede particularizarse a la trayectoria usada como:

$$\begin{aligned}
\gamma_\lambda &= \int_0^{2\pi} k \mathcal{A}_\lambda \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}} d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{-k}{2\Omega\Omega_\uparrow} (k\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y \cdot \hat{\mathbf{z}} + \boldsymbol{\mu}_y \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{z}} \cos(\theta) + \boldsymbol{\mu}_x \times \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{z}} \sin(\theta)) d\theta \\
&= -\frac{(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_z}{(\frac{\hbar}{2})^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{k^2}{2\Omega\Omega_\uparrow} - \frac{(\boldsymbol{\mu}_x \times \mathbf{B})_z}{(\frac{\hbar}{2})^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{k \sin(\theta)}{2\Omega\Omega_\uparrow} \\
&\quad + \frac{(\boldsymbol{\mu}_y \times \mathbf{B})_z}{(\frac{\hbar}{2})^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{k \cos(\theta)}{2\Omega\Omega_\uparrow}
\end{aligned} \tag{5.42}$$

De aquí puede verse que cuando $B_i = 0$ se recupera la Ecuación (4.42).

En esta última sección, debido a la longitud de las ecuaciones no se usará el subíndice con al etiqueta de la dirección cristalina para el parámetro efectivo de acoplamiento de Dresselhaus β .

5.5.1. R+D[111]+B

Para el caso R+D[111] con un campo magnético con $B_x = B_y = 0$ al racionalizar Ecuación (5.42) con el factor $\Omega_\downarrow/\Omega_\downarrow$, esta se reduce a:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_\perp}^{[111]} &= -\frac{1}{2k} \left(1 - \lambda \frac{B_z}{\sqrt{(\alpha + \beta)^2 k^2 + B_z^2}} \right) \hat{\boldsymbol{\theta}} \\
&= \mathcal{A}_{\lambda, R+D}^{[111]} + \lambda \frac{B_z}{2k \frac{\hbar}{2} \Omega_{R+D+B_\perp}^{[111]}} \hat{\boldsymbol{\theta}}
\end{aligned} \tag{5.43}$$

por lo tanto la fase será:

$$\begin{aligned}
\gamma_{\lambda, R+D+B_\perp}^{[111]} &= \int_0^{2\pi} d\theta \mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_\perp}^{[111]} \cdot k \hat{\boldsymbol{\theta}} \\
&= -\pi \left(1 - \lambda \frac{B_z}{\sqrt{(\alpha + \beta)^2 k^2 + B_z^2}} \right) \\
&= \gamma_{\lambda, R+D}^{[111]} + \pi \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega_{R+D+B_\perp}^{[111]}}
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Puede verse que en este caso, la fase tiene dos términos, el primero igual a la fase en ausencia de campos magnéticos y otro proporcional a $\frac{\hbar}{2}\Omega_z = B_z$, responsable de la existencia de un gap en $k = 0$. El caso con únicamente acoplamiento de Rashba es igual a este al cambiar $\alpha + \beta$ por α .

Si el campo magnético es lateral ($B_z = 0$), de forma que este campo es paralelo al gas de electrones, la conexión en la Ecuación (5.42) al racionalizar con el factor $\Omega_{\downarrow}/\Omega_{\uparrow}$ toma la forma:

$$\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[111]} = \frac{-(\alpha + \beta)[(\alpha + \beta)k - B_y \cos(\theta) + B_x \sin(\theta)]}{B_{\parallel}^2 + (\alpha + \beta)^2 k^2 - 2(\alpha + \beta)k \cos(\theta) + 2(\alpha + \beta)k \sin(\theta)} \hat{\theta}, \quad (5.45)$$

Integrando computacionalmente (Mathematica) puede obtenerse la fase:

$$\begin{aligned} \gamma_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[111]} &= -\pi \\ &= \gamma_{\lambda, R+D}^{[111]} \end{aligned} \quad (5.46)$$

Esta fase es la misma que para el caso sin campo magnético, debido a que las estructura de bandas de ambos sistemas son homeomórficas.

5.5.2. $R+D[110]+B$

En este caso, el campo $\frac{\hbar}{2}\Omega_{R+D+B}^{[110]}$ es:

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_{R+D+B}^{[110]} = (\alpha k_y + B_x)\hat{x} + (-\alpha k_x + B_y)\hat{y} + (\beta k_x + B_z)\hat{z} \quad (5.47)$$

A partir de esto, el producto de la conexión de la Ecuación (5.40) con $\hat{\theta}$ toma la forma:

$$\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B}^{[110]} \cdot \hat{\theta} = \frac{-1}{2\Omega\Omega_{\uparrow}} \left(\frac{2}{\hbar}\right)^2 (k^2\alpha - k\alpha B_y \cos(\theta) + k\alpha B_x \sin(\theta)) \quad (5.48)$$

Si el campo magnético es paralelo al gas ($B_z = 0$), (5.48) toma la forma:

$$\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[110]} \cdot \hat{\theta} = -\frac{1}{2k} \frac{\alpha^2 k^2 + \alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))}{\alpha^2 k^2 + B_{\parallel}^2 + 2\alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))} \left(1 - \lambda \frac{\Omega_z}{\Omega}\right), \quad (5.49)$$

donde:

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_{R+D+B_{\parallel}}^{[110]} = \sqrt{B_{\parallel}^2 - 2\alpha B_y k \cos(\theta) + (\alpha^2 + \beta^2)k^2 \cos(\theta) + \alpha k \sin(\theta)[2B_x + \alpha k \sin(\theta)]}. \quad (5.50)$$

Por lo que la fase de Berry será:

$$\begin{aligned}
\gamma_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[110]} &= \int_0^{2\pi} \mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[110]} \cdot k\hat{\theta} \\
&= -\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\alpha^2 k^2 + \alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))}{\alpha^2 k^2 + B_{\parallel}^2 + 2\alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))} d\theta + \\
&\quad + \frac{\lambda}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\alpha^2 k^2 + \alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))}{\alpha^2 k^2 + B_{\parallel}^2 + 2\alpha k (B_x \sin(\theta) - B_y \cos(\theta))} \frac{\beta k \cos(\theta)}{\frac{\hbar}{2}\Omega} d\theta.
\end{aligned} \tag{5.51}$$

Por su parte, si el campo magnético es perpendicular al gas de electrones ($B_x = B_y = 0$), (5.48) toma la forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\perp}}^{[110]} \cdot \hat{\theta} &= -\frac{1}{2} \left(1 - \lambda \frac{\beta k \cos(\theta) + B_z}{\sqrt{\alpha^2 k^2 + (\beta k \cos(\theta) + B_z)^2}} \right) \\
&= \mathcal{A}_{\lambda, R+D}^{[110]} \cdot \hat{\theta} + \lambda \frac{\beta k \cos(\theta) + B_z}{2\sqrt{\alpha^2 k^2 + (\beta k \cos(\theta) + B_z)^2}}
\end{aligned} \tag{5.52}$$

Así, la fase de Berry será:

$$\gamma_{\lambda, R+D+B_{\perp}}^{[110]} = \gamma_{\lambda, R+D}^{[110]} + \frac{\lambda}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\beta k \cos(\theta) + B_z}{\sqrt{\alpha^2 k^2 + (\beta k \cos(\theta) + B_z)^2}} d\theta \tag{5.53}$$

Puede verse de nuevo la presencia del termino relacionado a la estructura de bandas sin gap y un término proporcional a $\frac{\hbar}{2}\Omega_z$.

5.5.3. R+D[001]+B

Teniendo un campo perpendicular ($B_x = B_y = 0$) a un 2DEG con acoplamiento R+D en la dirección [001], al racionalizar la conexión, su producto con $k\hat{\theta}$ tomará la forma:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\perp}}^{[110]} \cdot k\hat{\theta} &= \frac{\alpha^2 - \beta^2}{2(-2\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2)} \left(1 - \lambda \frac{B_z}{\sqrt{B_z^2 + k^2(-2\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2)}} \right) \\
&= \mathcal{A}_{\lambda, R+D}^{[110]} \cdot k\hat{\theta} + \\
&\quad - \frac{\lambda B_z}{2k(\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2) \sqrt{B_z^2 + k^2(-2\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2)}}.
\end{aligned} \tag{5.54}$$

Así, su fase de Berry será:

$$\gamma_{\lambda, R+D+B_{\perp}}^{[110]} = \gamma_{\lambda, R+D}^{[110]} - \int_0^{2\pi} \frac{\lambda(\alpha^2 - \beta^2)B_z}{2(-2\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2)\sqrt{B_z^2 + k^2(-2\alpha\beta \sin(2\theta) + \alpha^2 + \beta^2)}}, \quad (5.55)$$

donde $\gamma_{\lambda, R+D}^{[110]} = -\text{sgn}(\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)\pi$.

Para la dirección [001] con un campo magnético paralelo al gas de electrones ($B_z = 0$). El producto de $k\hat{\theta}$ con la conexión toma la forma:

$$\mathcal{A}_{\lambda, R+D+B_{\parallel}}^{[110]} \cdot k\hat{\theta} = -\frac{k(\alpha + \beta)(\alpha - \beta) + (\beta B_x - \alpha B_y) \cos(\theta) + (\alpha B_x - \beta B_y) \sin(\theta)}{2\Omega_{\parallel}^2}, \quad (5.56)$$

donde:

$$\Omega_{\parallel}^2 = B_{\parallel}^2 + (\alpha^2 + \beta^2)k^2 + 2(\alpha B_x + \beta B_y)k \sin(\theta) - 2k \cos(\theta)(\beta B_x + \alpha B_y + 2\alpha\beta k \sin(\theta)) \quad (5.57)$$

Ming-Che Chang en [53] reporta una fase de $\gamma_{\lambda} = \lambda\pi \text{sgn}(\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)$ para este mismo caso al estudiar los efectos de campos magnéticos paralelos a \mathbf{k} en el efecto Hall de espín. Ming-Che Chang afirma que este resultado refleja la naturaleza topológica de la fase de Berry al no alterarse después de manipular suavemente las superficies energéticas. Es claro que en los casos con campos perpendiculares al gas observados, fase toma la forma de la fase sin campo magnético con la adición de un factor proporcional a Ω_z debido a que al introducir un campo magnético perpendicular se induce una separación de las bandas por lo que la deformación no es suave [53].

Para la cara [110] sin acoplamiento de Rashba, la fase de Berry será 0 al igual que el caso sin campo magnético.

Los casos expuestos permiten ver que cambios en el hamiltoniano generan grandes diferencias en las fases geométricas obtenidas. De igual forma, puede verse que al anular los campos magnéticos externos se recuperan los casos originales.

En este capítulo pudieron apreciarse los las fases de Berry para sistemas del tipo R+D[hkl] en las orientaciones [111], [110] y [001], de un sistema de dos niveles de Dirac, un sistema tipo rashba con un campo perpendicular y sistemas R+D[hkl] con un campo magnético externo.

De los sistemas estudiados, el sistema R+D[001] es usado por S.Q. Shen, para el estudio del efecto Hall de espín en sistemas bidimensionales electrónicos [44], también es usado por Murakawa *et. al.* para el estudio de un sistema con acoplamiento tipo Rashba en un semiconductor tridimensional [12].

Puede verse que en los sistemas que rompen simetría de inversión temporal, la fase de Berry depende de la banda a con excepción del último caso, a diferencia de los sistemas $R+D[hkl]$ que conservan la simetría de inversión temporal.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta tesis se revisó el origen de la fase geométrica como resultado de la evolución adiabática y cíclica de un sistema cuántico en el espacio de parámetros y se estudiaron algunas de sus propiedades como la invarianza ante transformaciones de norma, que permite que esta fase sea una posible observable del sistema. También se estudiaron la conexión y la curvatura de Berry, así como su relación con la fase de Berry.

Se consideró el hamiltoniano general para sistemas de dos niveles $\hat{H}_{TLS} = H_0 + \vec{\sigma} \cdot \Omega$, y algunas de sus propiedades espectrales, así como la forma que toman la fase, curvatura y conexión de Berry para este sistema. Dicho sistema fue usado para modelar grafeno, una bicapa de grafeno, un aislante de Chern, un semiconductor ferromagnético con SOC tipo Rashba y sistemas con SOC R+D[hkl] lineal en k en un campo magnético externo.

Fue particularizado el hamiltoniano de TLS a sistemas con campos $\Omega \propto k$, de igual forma, se calcularon expresiones para la conexión, curvatura y fase de Berry para este sistema. Estas expresiones fueron usadas para modelar sistemas semiconductores bidimensionales con SOC R+D[hkl] lineal en k .

Se comentó el desarrollo del concepto de espín y el acoplamiento espín-órbita como consecuencia de correcciones relativistas, así como los acoplamientos de Rashba y Dresselhaus en sistemas bidimensionales.

Por último, se calcularon las fases de Berry para 2DEG con SOC de Rashba y Dresselhaus, con SOC y un campo perpendicular, aislantes de Chern, una lámina de grafeno, una bicapa de grafeno y sistemas semiconductores ferromagnéticos bidimensionales con efecto Hall anómalo; se compararon los resultados obtenidos entre sí, con los reportados en la literatura y con el caso mostrado por Berry en su artículo original y se discutió la relación entre el resultado $\gamma_\lambda = -\pi$ y el parecido de las bandas a los puntos diabólicos descritos por Berry.

Al hacer la comparación entre los sistemas semiconductores bidimensionales con SOC $R+D[hkl]$ lineal en k con y sin campos magnéticos, se notó que los campos perpendiculares inducen la aparición de un término extra a la fase de Berry, proporcional a la componente z de su campo y con signo distinto para cada banda, mientras que los sistemas con campos laterales (paralelos al gas de electrones) parecen preservar la fase igual que en ausencia de campos magnéticos; de acuerdo con la literatura esto se debe a que los campos magnéticos perpendiculares son responsables de inducir una separación en las bandas, cambiando la topología de éstas, mientras que las estructuras de bandas de un sistema con y sin campos magnéticos laterales son isomorfas.

Para trabajos futuros, sería interesante el estudio de más casos así como de la relación entre propiedades físicas y la fase y la curvatura de Berry, como estados de borde por fases topológicas de la materia o fenómenos como el efecto Hall cuántico o el efecto Hall de valle, entre otros.

Apéndice A

Funciones de onda y energías propias del hamiltoniano de dos niveles

Tomando el hamiltoniano de la ecuación 3.1:

$$H = E_0\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix} E_0 + \frac{\hbar}{2}\Omega_z & \frac{\hbar}{2}\Omega_x - i\frac{\hbar}{2}\Omega_y \\ \frac{\hbar}{2}\Omega_x + i\frac{\hbar}{2}\Omega_y & E_0 - \frac{\hbar}{2}\Omega_z \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Y sustituyéndolo en la ecuación $|E_\lambda\rangle - H|\lambda\rangle = \mathbf{0}$ para encontrar sus eigenvalores se obtiene la ecuación:

$$E_\lambda^2 - 2E_\lambda E_0 + E_0^2 - \left(\frac{\hbar}{2}\Omega\right)^2 = 0 \quad (\text{A.2})$$

Sustituyendo en la fórmula general para ecuaciones cuadráticas obtenemos que las energías del sistema son:

$$E_\lambda = E_0 + \lambda \frac{\hbar}{2}\Omega, \quad (\text{A.3})$$

donde $\lambda = \pm 1$.

Puede verse que la diferencia de las energías propias del sistema es $\Delta E = \hbar\Omega$.

Para obtener los estados del sistema $|\lambda\rangle$ con componentes ζ y ξ , se sustituye A.1 y A.3 en $H|\lambda\rangle = E_\lambda|\lambda\rangle$ obteniendo el sistema:

$$\left(E_0 + \frac{\hbar}{2}\Omega_z - E_\lambda\right)\zeta + \frac{\hbar}{2}(\Omega_x - i\Omega_y)\xi = 0 \quad (\text{A.4a})$$

$$\frac{\hbar}{2}(\Omega_x + i\Omega_y)\zeta + \left(E_0 - \frac{\hbar}{2}\Omega_z - E_\lambda\right)\xi = 0 \quad (\text{A.4b})$$

Despejando ξ de la ecuación A.4b y fijando $\zeta = 1$ obtenemos el estado:

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{\Omega_x + i\Omega_y}{\Omega + \lambda\Omega_z} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

Para normalizar el estado, se toma la proyección del estado sobre si mismo por una constante de normalización y se iguala a 1:

$$\langle \lambda | \lambda \rangle |A|^2 = 1 \quad (\text{A.6a})$$

$$1 + \frac{\Omega_x^2 + \Omega_y^2}{\Omega^2 + \Omega_z^2 + 2\lambda\Omega\Omega_z} = |A|^{-2} \quad (\text{A.6b})$$

$$\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega} = |A|^2 \quad (\text{A.6c})$$

Así, los estados $|\lambda\rangle$ normalizados son:

$$|\lambda\rangle = \sqrt{\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{\Omega_x + i\Omega_y}{\Omega + \lambda\Omega_z} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Este estado puede reescribirse de diversas formas, que pueden ser útiles en distintas situaciones. Identificando a:

$$N_\lambda \equiv \sqrt{\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega}}, \quad (\text{A.8})$$

$$\Omega_\pm \equiv \Omega_x \pm i\Omega_y, \quad (\text{A.9})$$

$$\Omega_\uparrow \equiv \Omega + \lambda\Omega_z \quad (\text{A.10})$$

y:

$$\Omega_\downarrow \equiv \Omega - \lambda\Omega_z, \quad (\text{A.11})$$

y sabiendo que $\Omega_+\Omega_- = \Omega_\uparrow\Omega_\downarrow = \Omega_\parallel^2$, Puede escribirse al estado $|\lambda\rangle$ como:

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda \frac{\Omega_+}{\Omega_\uparrow} \sqrt{\frac{\Omega_\uparrow}{2\Omega}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.12})$$

Multiplicando por $\Omega_\downarrow/\Omega_\uparrow\sqrt{\Omega_\downarrow/\Omega_\uparrow}$ y simplificando:

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda N_{-\lambda} \frac{\Omega_+}{\Omega_\parallel} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

Cambiando a coordenadas esféricas bajo:

$$\Omega_x = \Omega \sin(\Theta) \cos(\varphi), \quad (\text{A.14a})$$

$$\Omega_y = \Omega \sin(\Theta) \sin(\varphi), \quad (\text{A.14b})$$

$$\Omega_z = \Omega \cos(\Theta), \quad (\text{A.14c})$$

se obtiene:

$$|\lambda\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda N_{-\lambda} e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

Aplicando las ecuaciones A.14 al estado en la forma A.7 se obtiene:

$$\frac{\sqrt{1 + \lambda \cos(\Theta)}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{e^{i\varphi} \sin(\Theta)}{1 + \lambda \cos(\Theta)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

Evaluando por separado $|+1\rangle$:

$$|+1\rangle = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ e^{i\varphi} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{pmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

y $|-1\rangle$:

$$|-1\rangle = \begin{pmatrix} \sin\left(\frac{\Theta}{2}\right) \\ -e^{i\varphi} \cos\left(\frac{\Theta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (\text{A.18})$$

Apéndice B

Derivación de la contribución espín-órbita a partir de una aproximación cuasi-relativista a la ecuación de Dirac

Con la ecuación de Dirac para un electrón con carga e y masa m_0 en presencia de un potencial eléctrico:

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \mathcal{V} + \beta m_0 c^2)\Psi = i\hbar\dot{\Psi}, \quad (\text{B.1})$$

donde α y β son las matrices de Dirac^{††}, c es la velocidad de la luz, E_s es la energía de Schrödinger y \mathcal{V} es el potencial eléctrico.

Con estados del tipo:

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Upsilon_1 \\ \Upsilon_2 \\ \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

donde Υ_1 y Υ_2 describen el comportamiento de un electrón y Φ_1 y Φ_2 el de un positrón.

Suponiendo estados estacionarios la ecuación B.1 puede reescribirse como:

$$(E - \mathcal{V} - m_0 c^2)\Upsilon - c\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}\Phi = 0, \quad (\text{B.4a})$$

$$(E - \mathcal{V} + m_0 c^2)\Phi - c\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}\Upsilon = 0, \quad (\text{B.4b})$$

††

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \mathcal{I} & 0 \\ 0 & -\mathcal{I} \end{bmatrix} \quad (\text{B.2})$$

Siendo $\boldsymbol{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli e \mathcal{I} la matriz identidad 2x2.

despejando Υ de B.4b, sustituyendo en B.4a, definiendo a $E_s = E - m_0c^2$ y reacomodando se obtiene:

$$(E_s - \mathcal{V})\Upsilon = \frac{c^2}{2m_0c^2}(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \left(\frac{1}{1 + \frac{E_s - \mathcal{V}}{2m_0c^2}} \right) (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}). \quad (\text{B.5})$$

Debido a que $\frac{E_s - \mathcal{V}}{2m_0c^2} \ll 1$ puede hacerse una expansión y a primer orden se obtiene:

$$(E_s - \mathcal{V})\Upsilon = \frac{1}{2m_0}(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \left(1 - \frac{E_s - \mathcal{V}}{2m_0c^2} \right) (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}), \quad (\text{B.6})$$

reacomodando:

$$E_s\Upsilon = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \mathcal{V} \right) \Upsilon - \frac{1}{4m_0^2c^2}(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E_s - \mathcal{V}), (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\Upsilon \quad (\text{B.7})$$

y sabiendo que $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})^2 = \mathbf{p}^2$ y que:

$$(E_s - \mathcal{V})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\Upsilon = \vec{\sigma} \cdot [(\mathbf{p}, \mathcal{V})] \Upsilon + (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E_s - \mathcal{V})\Upsilon, \quad (\text{B.8})$$

donde a primer orden:

$$(E_s - \mathcal{V})\Upsilon = \frac{\mathbf{p}^2}{2m_0}, \quad (\text{B.9})$$

entonces, sabiendo que el conmutador $[E_s, \mathbf{p}] = 0$:

$$(E_s - \mathcal{V})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p})\Upsilon = \vec{\sigma} \cdot [\mathbf{p}, \mathcal{V}] \Upsilon + (\vec{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} \right) \Upsilon. \quad (\text{B.10})$$

Sustituyendo B.10 en B.7 y usando la identidad $(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\vec{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\sigma \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$:

$$E_s\Upsilon = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \mathcal{V} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_0^3c^2} - \frac{1}{4m_0^2c^2}(\mathbf{p} \cdot [\mathbf{p}, \mathcal{V}]) - \frac{i}{4m_0^2c^2}[\mathbf{p}, \mathcal{V}] \cdot (\vec{\sigma} \times \mathbf{p}) \right) \Upsilon, \quad (\text{B.11})$$

y sabiendo que el potencial tiene simetría esférica y es dependiente de la posición \mathbf{r} , que $[\mathbf{p}, f(\mathbf{r})] = i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}f(\mathbf{r})$, la representación en el espacio de posición de $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$ y que el operador de espín $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}$:

$$E_s\Upsilon = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m_0} + \mathcal{V} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m_0^3c^2} - \frac{\hbar^2}{4m_0^2c^2}\nabla^2\mathcal{V} - \frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{|\mathbf{r}|}\frac{dV}{d\mathbf{r}}(\mathbf{S} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{p})) \right) \Upsilon. \quad (\text{B.12})$$

El último término puede escribirse como:

$$\frac{1}{2m_0^2c^2}\frac{1}{|\mathbf{r}|}\frac{dV}{d\mathbf{r}}(\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}) \quad (\text{B.13})$$

Bibliografía

- [1] B R Holstein. «The adiabatic theorem and Berry's phase». En: *American Journal of Physics* 1079.1989 (1989). ISSN: 00029505. DOI: [10.1119/1.15793](https://doi.org/10.1119/1.15793).
- [2] Mauricio Missael Sanchez Diaz. «Dilucidacion del Teorema adiabático». Universidad Nacional Autónoma de México, 2017, pág. 65.
- [3] Robert W. Batterman. «Falling cats, parallel parking, and polarized light». En: *Studies in History and Philosophy of Science Part B - Studies in History and Philosophy of Modern Physics* 34.4 (2003), págs. 527-557. ISSN: 13552198. DOI: [10.1016/S1355-2198\(03\)00062-5](https://doi.org/10.1016/S1355-2198(03)00062-5).
- [4] Raffaele Resta. *Berry's geometric phase: a review*. 2015. URL: <http://www-dft.ts.infn.it/~resta/gtse/lec3.pdf><http://materia.fisica.unimi.it/manini/berryphase.html> (visitado 30-09-2017).
- [5] Michael Berry. «Anticipations of the geometric phase». En: *Physics Today* 43.12 (1990), págs. 34-40. ISSN: 19450699. DOI: [10.1063/1.881219](https://doi.org/10.1063/1.881219).
- [6] Di Xiao, Ming-Che Chang y Qian Niu. «Berry Phase Effects on Electronic Properties». En: (2009). ISSN: 0034-6861. DOI: [10.1103/RevModPhys.82.1959](https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959). arXiv: 0907.2021. URL: <http://arxiv.org/abs/0907.2021><http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959><http://arxiv.org/abs/0907.2021><http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1959>.
- [7] Nicola A. Spaldin. «A beginner's guide to the modern theory of polarization». En: *Journal of Solid State Chemistry* 195.9 (2012), págs. 2-10. arXiv: arXiv:1202.1831v1. URL: <https://arxiv.org/pdf/1202.1831.pdf><https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0022459612003234>.
- [8] S. A. Owerre. «Weyl magnons in noncoplanar stacked kagome antiferromagnets». En: (2017). arXiv: 1708.04240. URL: <http://arxiv.org/abs/1708.04240>.
- [9] Raffaele Resta. «Manifestations of Berry's phase in molecules and condensed matter». En: *J. Phys.: Condens. Matter* 12.00 (2000), págs. 107-143. ISSN: 03700089. DOI: [10.1007/BF03052802](https://doi.org/10.1007/BF03052802). URL: <http://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/12/9/201/pdf><https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-77951500163&origin=resultslist&zone=contextBox>.
- [10] W Wernsdorfer y col. «Quantum phase interference in single-molecule magnets of Mn 12 2Å». En: *Journal of Applied Physics* 911.10 (2002). DOI: [10.1063/1.1450788](https://doi.org/10.1063/1.1450788). URL: <https://doi.org/10.1063/1.1450788><http://aip.scitation.org/toc/jap/91/10><https://doi.org/10.1063/1.1450788><http://aip.scitation.org/toc/jap/91/10>.
- [11] Zhenxing Zhang y col. «Measuring the Berry phase in a superconducting phase qubit by a shortcut to adiabaticity». En: *Physical Review A* 95.4 (2017). ISSN:

24699934. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.042345. arXiv: 1704.00894. URL: <https://arxiv.org/pdf/1704.00894.pdf>.
- [12] H. Murakawa y col. «Detection of Berry's Phase in a Bulk Rashba Semiconductor». En: *Science* 342.6165 (2013), págs. 1490-1493. ISSN: 0036-8075. DOI: 10.1126/science.1242247. URL: <http://www.sciencemag.org/cgi/doi/10.1126/science.1242247>.
- [13] M. V. Berry. «Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes Author». En: *Proceedings of the Royal Society of London* 392.1802 (1984), págs. 45-57. DOI: 10.1098/rspa.1984.0023.
- [14] Born y col. *Principles Of Optics (ref5)*. 6th. Pergamon Press, 1970, pág. 859. ISBN: 9780080264820. DOI: 10.1016/S0030-3992(00)00061-X. arXiv: arXiv:1011.1669v3. URL: <http://assets.cambridge.org/97805216/42224/sample/9780521642224ws.pdf>.
- [15] Frank. Wilczek, Alfred. Shapere y Frank. Wilczek. *Geometric Phases in Physics*. Vol. 5. World Scientific, 1989, pág. 509. DOI: 10.1142/0613. arXiv: 9702011v2 [arXiv:quant-ph]. URL: <http://www.worldscientific.com/worldscibooks/10.1142/0613>.
- [16] M. V. Berry. «The adiabatic phase and Pancharatnam's phase for polarized light». En: *Journal of Modern Optics* 34.11 (1987), págs. 1401-1407. ISSN: 13623044. DOI: 10.1080/09500348714551321.
- [17] Armando Tellez. «La Mecánica Cuántica, El teorema adiabático». En: (2009). URL: <http://la-mecanica-cuantica.blogspot.mx/2009/08/el-teorema-adiabatico-i.html>.
- [18] M V Berry. «The Geometric Phase». En: *Scientific American* 259.6 (1988), págs. 46-52. ISSN: 0036-8733. DOI: 10.1038/scientificamerican1288-46. URL: <http://www.scientificamerican.com/article/the-geometric-phase/>.
- [19] D. Rohrlich. «Berry's phase». En: (2007). arXiv: 0708.3749. URL: <http://arxiv.org/abs/0708.3749>.
- [20] James Stewart. *Stewart - Calculus - Early Transcedentals 6e*. 2007, págs. 1-1308. ISBN: 9780495011668. URL: [papers2://publication/uuid/A6C2205E-0174-4653-A8A9-EACFAE818B74](http://publication/uuid/A6C2205E-0174-4653-A8A9-EACFAE818B74).
- [21] Anupam Garg. «Berry phases near degeneracies: Beyond the simplest case On the role of self-adjointness in the continuum formulation of topological quantum phases Berry phases near degeneracies: Beyond the simplest case». En: *American Journal of Physics* 78.10 (2010), págs. 661-1079. DOI: 10.1119/1.3377135. URL: <http://dx.doi.org/10.1119/1.3377135><http://aapt.scitation.org/toc/ajp/78/7>.
- [22] F. D. M. Haldane. «Berry Curvature on the Fermi Surface: Anomalous Hall Effect as a Topological Fermi-Liquid Property». En: *Phys. Rev. Lett.* 93 (20 2004), pág. 206602. DOI: 10.1103/PhysRevLett.93.206602. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.206602>.
- [23] János K Asbóth, László Oroszlány y András Pályi. *A Short Course on Topological Insulators*. Vol. 919. 2015. ISBN: 978-3-319-25607-8. DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8. arXiv: 1509.02295. URL: <https://link.springer.com/content/pdf/10.1007/978-3-319-25607-8.pdf><http://arxiv.org/abs/1509.02295><http://www.springer.com/us/book/9783319256054>.

- [24] John Oprea. «Geometry and the Foucault Pendulum». En: *American Mathematical Monthly* 102.6 (1995), págs. 515-522. ISSN: 00029890. DOI: 10.2307/2974765. URL: https://www.maa.org/sites/default/files/images/images/upload{_}library/22/Ford/Oprea515-522.pdf.
- [25] T H Chyba y col. «Measurement of the Panchgaratnam phase for a light beam». En: *Optic Letters* 13.7 (1988), págs. 562-564.
- [26] Arno Böhm. *The geometric phase in quantum systems: foundations, mathematical concepts, and applications in molecular and condensed matter physics*. 2003, pág. 439. ISBN: 3-540-00031-3 978-3-540-00031-0. URL: <http://www.amazon.com/The-Geometric-Phase-Quantum-Systems/dp/3540000313>.
- [27] Joseph Samuel y Rajendra Bhandari. «General Setting for Berry's Phase». En: *Physical Review Letters* 60.23 (1988), págs. 2339-2342. URL: <https://journals.aps.org/prl/pdf/10.1103/PhysRevLett.60.2339>.
- [28] Josef W. Zwanziger, Marianne Koenig y Alexander Pines. «Berry's Phase». En: *Annual Review of Physical Chemistry* 41.1 (1990), págs. 601-646. ISSN: 0066-426X. DOI: 10.1146/annurev.pc.41.100190.003125. URL: <http://www.annualreviews.org/doi/abs/10.1146/annurev.pc.41.100190.003125>.
- [29] Supriyo Bandhopadhyaya, S. Bandyopadhyay y M. Cahay. *Introduction to Spintronics*. Taylor & Francis Group, 2008, pág. 526. ISBN: 9781420004748.
- [30] Lorentz institute for theoretical Physics. *Discovery of electron spin*. URL: <https://www.lorentz.leidenuniv.nl/history/spin/spin.html> (visitado 08-10-2017).
- [31] Bretislav Friedrich y Dudley Herschbach. «Stern and Gerlach: How a Bad Cigar Helped Reorient Atomic Physics». En: *Physics Today* 56.12 (2003), págs. 53-59. ISSN: 0031-9228. DOI: 10.1063/1.1650229. URL: <http://physicstoday.scitation.org/doi/10.1063/1.1650229>.
- [32] Wolfgang Pauli. «Zur Quantenmechanik des magnetischen Elektrons». En: *Zeitschrift für Physik* 43.9 (1927), págs. 601-623. ISSN: 0044-3328. DOI: 10.1007/BF01397326. URL: <https://doi.org/10.1007/BF01397326>.
- [33] Paul Adrien Maurice Dirac. «The quantum theory of the electron». En: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* 117.778 (1928), 610 LP -624. URL: <http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/117/778/610.abstract>.
- [34] S. A. Wolf y col. «Spintronics: A spin-based electronics vision for the future». En: *Science* 294.5546 (2001), págs. 1488-1495. ISSN: 00368075. DOI: 10.1126/science.1065389. arXiv: [/www.dtic.mil/cgi-bin/GetTRDoc?AD=ADA516289](http://www.dtic.mil/cgi-bin/GetTRDoc?AD=ADA516289) [http:].
- [35] Jun John Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Ed. por San Fu Tuan. Pearson Education 2014, 1994, pág. 500. ISBN: 0321972074, 9780321972071.
- [36] Roland Winkler. Ed. por J. Kühn y col. Springer. ISBN: 3540011870.
- [37] Georgia Tech University. *Quantum Numbers and Atomic Energy Levels*. 2005. URL: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/quantum/qnenergy.html> (visitado 05-10-2017).
- [38] L. H. THOMAS. «The Motion of the Spinning Electron». En: *Nature* 117.2945 (1926), págs. 514-514. ISSN: 0028-0836. DOI: 10.1038/117514a0. URL: <http://www.nature.com/articles/117514a0>.

- [39] A. Manchon y col. «New perspectives for Rashba spin-orbit coupling». En: *Nature Materials* 14.9 (2015), págs. 871-882. ISSN: 14764660. DOI: 10.1038/nmat4360. arXiv: 1507.02408.
- [40] Boudhayan Paul y Tarun Kanti Ghosh. En: *Physics Letters A* 379.7 (2015), págs. 728-731. ISSN: 0375-9601. DOI: 10.1016/J.PHYSLETA.2014.11.060. arXiv: 1409.6897. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960114012675><https://arxiv.org/pdf/1409.6897.pdf>.
- [41] C M Wang, H T Cui y Q Lin. «Current-induced spin polarization for a general two-dimensional electron system». En: *Physica Status Solidi (B) Basic Research* 246.10 (2009), págs. 2301-2306. ISSN: 03701972. DOI: 10.1002/pssb.200945050. arXiv: 0910.3050. URL: <https://arxiv.org/pdf/0910.3050.pdf>.
- [42] Tsung Wei Chen y Guang Yu Guo. «Torque and conventional spin Hall currents in two-dimensional spin-orbit coupled systems: Universal relation and hyperselection rule». En: *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics* 79.12 (2009). ISSN: 10980121. DOI: 10.1103/PhysRevB.79.125301. arXiv: 0808.3625. URL: <https://arxiv.org/pdf/0808.3625.pdf>.
- [43] Priscila Elizabeth Iglesias-Vázquez. «Orientación de espín por un campo eléctrico AC en heteroestructuras semiconductoras con interacción espín-órbita». Tesis de maestría. 2010.
- [44] Shun-Qing Shen. «Spin Hall effect and Berry phase in two dimensional electron gas». En: (2003), págs. 1-4. ISSN: 1098-0121. DOI: 10.1103/PhysRevB.70.081311. arXiv: 0310368 [cond-mat]. URL: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0310368><http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.70.081311>.
- [45] Jiamin Xue. «Berry phase and the unconventional quantum Hall effect in graphene». En: (sep. de 2013). URL: https://www.researchgate.net/profile/Jiamin_Xue/publication/257069149_Berry_phase_and_the_unconventional_quantum_Hall_effect_in_graphene/links/57d2223208ae6399a38b8c6d/Berry-phase-and-the-unconventional-quantum-Hall-effect-in-graphene.pdf?origin=publication_detail.
- [46] Yuanbo Zhang y col. «Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene». En: *Nature* 438 (nov. de 2005), 201 EP -. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nature04235>.
- [47] S.G. Tan, M.B.A. Jalil y T. Fujita. «Monopole and topological electron dynamics in adiabatic spintronic and graphene systems». En: *Annals of Physics* 325.8 (2010), págs. 1537-1549. ISSN: 0003-4916. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.aop.2010.04.007>. URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491610000710>.
- [48] Yuan Cao y col. «Unconventional superconductivity in magic-angle graphene superlattices». En: *Nature* 556 (mar. de 2018), 43 EP -. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nature26160>.
- [49] Yuanbo Zhang y col. «Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene». En: *Nature* 438 (nov. de 2005), 201 EP -. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nature04235>.
- [50] Y. Shimazaki y col. «Generation and detection of pure valley current by electrically induced Berry curvature in bilayer graphene». En: *Nature Physics* 11 (nov. de 2015), 1032 EP -. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3551>.

- [51] Grigory Gregory Tkachov. *Topological insulators*. 2016. ISBN: 9783642328572. DOI: [10.1557/mrs.2014.217](https://doi.org/10.1557/mrs.2014.217). arXiv: [arXiv:1410.8038v2](https://arxiv.org/abs/1410.8038v2).
- [52] Dimitrie Culcer, Allan Macdonald y Qian Niu. «Anomalous Hall effect in paramagnetic two-dimensional systems». En: *Physical Review B* 68 (2003). DOI: [10.1103/PhysRevB.68.045327](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.045327). URL: https://web2.ph.utexas.edu/~niugroup/article/PhysRevB{_}68{_}045327.pdf<https://journals.aps.org/prb/pdf/10.1103/PhysRevB.68.045327>.
- [53] Ming-Che Chang y Ming-Che. «The effect of in-plane magnetic field on the spin Hall effect in Rashba-Dresselhaus system». En: *Physical Review B*, vol. 71, Issue 8, id. 085315 71.8 (2008), págs. 1-11. ISSN: 1098-0121. DOI: [10.1103/PhysRevB.71.085315](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.71.085315). arXiv: [0411697v1](https://arxiv.org/abs/0411697v1) [arXiv:cond-mat]. URL: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0411697><http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.71.085315>.

«I may not have gone where I intended to go, but I think I have ended up where I needed to be.»

Douglas Adams, *The Long Dark Tea-Time of the Soul*