

POSGRADO EN CIENCIA E INGENIERÍA DE MATERIALES

**“EFECTO HALL DE ESPÍN EN GASES
BIDIMENSIONALES DE ELECTRONES Y
HUECOS PESADOS”**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE

**DOCTOR EN CIENCIA
E INGENIERÍA DE MATERIALES**

P R E S E N T A

M. en C. ARTURO WONG LÓPEZ

Tutor: Dr. Francisco Mireles Higuera



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

Agradecimientos

Con profundo gozo deseo manifestar mi agradecimiento al Dr. Francisco Mireles Higuera por haber dirigido mi trabajo de tesis doctoral, y más allá de ello, le agradezco el apoyo que me brindó, tanto académico como humano, durante mis estudios de posgrado.

Agradezco a los Drs. Jesús Alberto Maytorena Córdova y Manuel Herrera Zaldívar por su participación en mi comité tutorial.

Al Dr. Roland Winkler (Northern Illinois University) por proporcionarme las expresiones que modelan el acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus en huecos pesados, así como por importantes comentarios acerca del tema de interacción espín-órbita.

Al Dr. Qian Niu (Universidad de Texas en Austin) por sus valiosos comentarios sobre la definición del operador de corriente de espín.

A los Drs. Sergio Fuentes Moyado, Amelia Olivas Sarabia, Jesús Heiras Aguirre, al Lic. Juan Antonio Peralta y al Centro de Nanociencias y Nanotecnología por el apoyo brindado durante mis estudios de doctorado.

A los Drs. Ernesto Cota Araiza, Jesús María Siqueiros Beltrones, Roberto Romo

Martínez, Jorge Alberto Villavicencio Aguilar y Francisco Mireles Higuera por su participación como sinodales en mi examen de grado.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología y al proyecto Papiit DGAPA-UNAM No. IN113-807-3 por el apoyo económico recibido para la realización de mis estudios.

De manera muy especial a mi madre, María del Carmen, a mi padre Arturo, a mis hermanos Alfredo y Adainalí por su cariño y a mi esposa Aracely por su amor y compañía de vida.

Arturo Wong López.

WONG LÓPEZ, ARTURO, tesis doctoral, 2009. PCeIM-UNAM

Efecto Hall de espín en Gases Bidimensionales de Electrones y Huecos Pesados.

(151 pp.)

Director de tesis: Dr. Francisco Mireles Higuera.

Resumen: Se realizó un estudio teórico y numérico de la conductividad Hall de espín en el régimen de frecuencia finita para gases de electrones y huecos pesados bidimensionales confinados en heteroestructuras semiconductoras en presencia de acoplamiento espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus. El análisis teórico fue realizado mediante el formalismo de Kubo en el régimen de respuesta lineal y con dependencia explícita del espín de los portadores de carga.

El presente estudio contempla los efectos de emplear una definición alternativa del operador de corriente de espín que, en contraste con el operador convencional, se conserva en sistemas con acoplamiento espín-órbita. Se verificó *a posteriori* que el espectro de la conductividad Hall de espín, tanto de electrones como de huecos pesados, cambia drásticamente cuando se utiliza dicho operador conservado, y esto es debido principalmente a contribuciones de la torca de espín a la corriente total de espín. Mediante estos resultados es posible predecir que en muestras típicas, la contribución de torca de espín al espectro de la conductividad generalmente domina sobre la correspondiente contribución debida al operador convencional.

Para ambos sistemas bidimensionales fue posible obtener expresiones analíticas para la conductividad Hall de espín en el límite cuando la energía característica de espín-órbita es mucho menor a la energía de Fermi, el cuál es un régimen común en semiconductores III-V. La naturaleza relativamente simple de tales fórmulas analíticas permiten explorar la física

relevante en el transporte de espín en semiconductores. Dada la isotropía angular en el espacio k de la relación de dispersión de electrones y huecos pesados para el caso en que un sólo tipo de acoplamiento espín-órbita (Rashba o Dresselhaus) está presente, el espectro de la conductividad de espín no revela rasgos distintivos. Sin embargo, al incluir la interacción simultánea de ambos tipos de acoplamiento espín-órbita, la anisotropía angular existente en la relación de dispersión (de electrones y de huecos pesados) da lugar a un espectro de la conductividad de espín sumamente asimétrico y fuertemente dependiente de la frecuencia de excitación, con picos característicos originados por ciertas transiciones permitidas entre sub-bandas de espín. Así también se estudió la variación de la conductividad Hall de espín como función de las constantes de acoplamiento (Rashba y/o Dresselhaus), encontrando que tanto para electrones como para huecos pesados existe una fuerte correlación entre la magnitud y la dirección de la corriente Hall de espín dinámica, la frecuencia del campo aplicado y el grado de intensidad de ambos acoplamientos espín-órbita.

Particularmente para el caso de electrones, también fue posible extraer una expresión analítica simple que modela la conductividad Hall de espín en el límite d.c. como función del tiempo promedio de relajación entre colisiones con impurezas a bajas temperaturas. En dicha expresión, de manera natural aparece el tiempo de relajación debido a interacciones espín-órbita deducido por D'yakonov y Perel'. Por su parte, para el caso de huecos pesados, fue posible obtener fórmulas que permiten estimar el valor de las constantes de acoplamiento Rashba y Dresselhaus, a partir de la ubicación experimental de las frecuencias características del espectro de la conductividad de carga.

Se espera que estos resultados presenten datos relevantes que, por un lado, permitan evidenciar la validez de los operadores de corriente de espín, además de aportar información

sobre física fundamental en el régimen de frecuencia finita, que a su vez permita el diseño de dispositivos espintrónicos basados en la manipulación del espín de electrones y huecos pesados en heteroestructuras semiconductoras a través del efecto Hall de espín.

Aprobado _____

Dr. Francisco Mireles Higuera

Director de tesis

Prefacio

El efecto Hall de espín (EHS) fue ingeniosamente observado por vez primera en el 2004 a través de técnicas ópticas por el grupo de D. Awschalom de la Universidad de Santa Bárbara (E.U.A.) e independientemente por el grupo de T. Jungwirth de la Universidad de Cambridge (Reino Unido). El término “Efecto Hall de espín” fue acuñado por J. Hirsch en 1999 y se refiere al fenómeno de la acumulación de espines con polarización opuesta en los bordes de un sistema bidimensional (no magnético). Tal acumulación de espines es generada por una corriente transversal de espines en respuesta a la aplicación de un campo eléctrico longitudinal al sistema y como consecuencia de efectos de interacción espín-órbita.

A diferencia del efecto Hall clásico, el EHS se manifiesta en ausencia de campos magnéticos y sin desbalance de cargas eléctricas, *i.e.* a cero voltaje Hall. A su descubrimiento óptico prosiguieron su detección eléctrica (2005) y en condiciones ambientales de temperatura (2006), así como el reciente descubrimiento de un efecto Hall de espín *gigante* ocasionado por interacciones tipo Kondo (2008).

Aunque la predicción teórica del EHS fue hecha hace más de 30 años por D'yakonov

y Perel' (previo al advenimiento de la Espintrónica), no fue sino hasta principios de este siglo cuando se convirtió en un área de investigación intensa, originada en parte por la propuesta teórica de un EHS de carácter *intrínseco* y *universal*. El EHS intrínseco causó gran controversia, apareciendo decenas de artículos que discutían a favor o en contra de su existencia. Así, el papel del desorden resultó un tema central (entre 2004 y 2006) en la cancelación del valor estático de la conductividad Hall de espín d.c. ($e/8\pi$, donde e es la magnitud de carga fundamental) en gases de electrones bidimensionales (GE2D) con interacción Rashba. Actualmente existe consenso en el hecho de que la conductividad Hall de espín se anula sólo en el límite estático sin importar el tipo y la intensidad del desorden en el sistema y para modelos de interacción espín-órbita lineal en el número de onda k . Sin embargo esto no sucede en presencia de campos magnéticos o impurezas magnéticas, ni en sistemas de huecos, para los cuales se ha mostrado que el valor estático de la conductividad Hall de espín es robusto frente al desorden.

Más aún, estudios recientes de transporte en el régimen de frecuencia finita han venido a ampliar el panorama en el tema del EHS. Estudios de respuesta a.c. de carga y de espín en sistemas bidimensionales de electrones y huecos han enfatizado la importancia del régimen dinámico (frecuencia finita). Se ha sugerido que un campo a.c. de prueba puede utilizarse para controlar la corriente Hall de espín en GE2D en presencia de interacción Rashba y/o Dresselhaus.

Por otro lado, uno de los tópicos de carácter fundamental en el contexto de transporte de espines que aún siguen sin una solución completamente satisfactoria es el

establecimiento de una definición físicamente aceptable y apropiada del operador asociado a la corriente de espín. La dificultad subyacente estriba en el hecho de que la corriente de espín no es una observable física en el lenguaje Mecánico-Cuántico y de que la forma convencionalmente utilizada del operador de corriente de espín viola la ecuación de continuidad de densidad de espín en sistemas con acoplamiento espín-órbita. Aunado a esto, se encuentra la imposibilidad de establecer las relaciones de Onsager que interconectan las respuestas eléctricas y de espín con flujos de corriente eléctrica y/o de magnetización. Diversos esfuerzos de diferentes grupos de investigación han intentado clarificar esta situación recientemente. Particularmente, la definición del operador de corriente de espín propuesta por Shi et al. [Phys. Rev. Lett. **96**, 076604 (2006)] resulta muy atractiva, ya que además de satisfacer la ecuación de continuidad para la densidad de espín, permite establecer de manera natural las relaciones de reciprocidad de Onsager. Una de las interrogantes importantes de la definición conservada de corriente de espín de Shi *et al.* es su validez en el régimen dinámico, además de las expectativas que tal estudio ofrece para la comprensión del EHS a frecuencia finita y de la posible física novedosa que expanda el conocimiento y la naturaleza del fenómeno del transporte de espines en semiconductores. Lo anterior sin mencionar sus implicaciones prácticas en dispositivos espintrónicos.

El presente trabajo de tesis se enfoca en el estudio teórico de la conductividad Hall de espín empleando la definición del operador de corriente de espín reportada por Shi *et al.*, para gases bidimensionales de electrones y huecos pesados en presencia de acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus y sujetos a un campo eléctrico

a.c. Algunos de los resultados y hallazgos importantes reportados aquí para el caso del EHS en electrones han sido ya publicados en la revista *Physical Review B* [Wong et al. PRB 77, 035304 (2008)]. Un segundo manuscrito sobre los resultados para el SHE en huecos pesados está actualmente en preparación. Se espera que los resultados presentados aquí permitan evidenciar la validez de los operadores de corriente de espín, además de aportar información sobre física fundamental en el régimen de frecuencia finita y motive la investigación experimental del SHE en tal régimen.

Este escrito está organizado como sigue: en el capítulo 1 se discutirá sobre los inicios de la Espintrónica además de mencionar algunos de los retos actuales y potenciales de ésta fascinante área de estudio. También se detallará a fondo el Efecto Hall de espín y se revisarán las perspectivas de este fenómeno en el contexto del régimen de frecuencia finita y del operador de corriente de espín. En el capítulo 2 se estudiarán a profundidad los fenómenos de acoplamiento espín-órbita de tipo Rashba y Dresselhaus, tanto para electrones como para huecos pesados, además de los efectos originados por la presencia simultánea de ambas interacciones espín-órbita. En el capítulo 3 se analizará a detalle el formalismo de respuesta lineal y se derivará de manera explícita la fórmula de Kubo para el cálculo de la conductividad de carga de un sistema dado. Por su parte, en el capítulo 4 se derivará la ecuación de continuidad de espín, así como el operador de corriente de espín conservado propuesto por Shi *et al.* Todo este marco teórico nos permitirá estudiar a detalle la conductividad Hall de espín de electrones, en el capítulo 5, y de huecos pesados, en el capítulo 6, y así finalizar con las conclusiones de este proyecto.

Contenido

Agradecimientos	v
Prefacio	x
1 Introducción	1
1.1 Antecedentes e inicio de la Espintrónica	2
1.2 Avances y retos actuales de la Espintrónica.	9
1.3 El Efecto Hall de espín.	17
1.4 Transporte en el régimen de frecuencia finita.	23
1.5 El operador de corriente de espín.	23
1.6 Objetivo general del trabajo de tesis.	26
2 Acoplamiento Espín-Órbita en Semiconductores	29
2.1 Introducción	30
2.2 Sistemas cuasi-bidimensionales	31
2.3 Efecto Rashba	32
2.4 Efecto Dresselhaus	36

2.5	Interacción conjunta Rashba-Dresselhaus	40
2.5.1	Electrones (GE2D)	40
2.5.2	Huecos pesados (GH2D)	42
3	Transporte: Formalismo de Kubo	44
3.1	Fórmula General de Kubo	44
3.2	Conductividad de carga	48
3.3	Conductividad de carga: interacción Rashba-Dresselhaus	52
4	Operador de corriente de espín conservado	56
4.1	Ecuación de continuidad de espín	56
4.2	Operador conservado de corriente de espín	58
5	Efecto Hall de espín para electrones	60
5.1	Fórmula de Kubo para la conductividad Hall de espín	61
5.2	Expresiones analíticas en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$	65
5.3	El límite estático	67
5.4	Discusión de resultados	68
5.4.1	Caso Rashba	68
5.4.2	Caso Rashba más Dresselhaus	72
6	Efecto Hall de espín en Huecos pesados	79
6.1	Conductividad Hall de espín de huecos pesados	81
6.2	Expresiones analíticas en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$	84

	xvi
6.3 Conexión entre las conductividades de espín y de carga	86
6.4 Discusión de resultados	88
6.4.1 Caso Rashba	88
6.4.2 Caso anisotrópico	90
7 Conclusiones	103
A Funciones de Correlación corriente de espín-corriente de espín	121

Lista de Figuras

- 1.1 Representación esquemática del efecto de Magneto-Resistencia Gigante (GMR) en una tricapa de dos ferromagnetos idénticos $F1$ y $F2$ en medio de los cuales se sitúa un metal no magnético M , para una corriente en dirección perpendicular a las películas. Cuando las dos capas magnéticas poseen magnetización paralela (panel derecho), los electrones con espín up (espín antiparalelo a la magnetización) pueden viajar a través de la tricapa sin sufrir dispersión, produciendo una resistencia mínima. En contraste, en el caso antiparalelo (panel izquierdo) ambos espines, up y $down$, sufren colisiones ya sea en $F1$ o $F2$ dependiendo de su espín, aumentando la resistencia. Tomado de Ref. [11] 4

1.2 (a) Experimento original del descubrimiento del GMR por Peter Grünberg.

Las muestras eran tricapas compuestas por $Fe(12\text{ nm})/Cr(1\text{ nm})/Fe(12\text{ nm})$, depositadas en sustratos de $GaAs$ (110) mediante epitaxia de haces moleculares. Las gráficas superiores muestran las curvas de magnetización medidas mediante efecto Kerr, y las gráficas inferiores muestran la Magneto-Resistencia medida con la corriente en el plano de las capas, a temperatura ambiente. Tomado de Ref. [10].

(b) Experimento original del descubrimiento del GMR por el grupo de Albert Fert. La gráfica muestra la variación de la resistencia eléctrica con el campo magnético aplicado para tres multicapas Fe/Cr depositadas mediante epitaxia de haces moleculares en sustratos de $GaAs$ (001) y medidas a 4.2 K. La corriente y el campo magnético se aplicaron en el plano de la capas, en posiciones paralelas a lo largo del eje $[1\ 1\ 0]$. Tomado de Ref. [9]. 6

1.3 Representación esquemática del transistor de efecto de campo de espín (SFET) de Datta y Das. (Cortesía: F. Mireles) 7

1.4 Diagrama esquemático del efecto de Magneto-Resistencia túnel (MTJ), en el caso de dos capas de metales ferromagnéticos idénticos separadas por una barrera amorfa, aislante y no magnética, tal como Al_2O_3 . El proceso de tunelaje preserva el espín. Para los electrones será más fácil tunelear, si la magnetización es paralela (figura superior) en comparación cuando la magnetización es antiparalela (figura inferior). Tomado de Ref. [11] 11

1.5 Diagrama esquemático de una MRAM, en la arquitectura básica de punto de cruce (lado izquierdo) y el diseño más realista (lado derecho) que incluye un transistor(T) por celda(MTJ). Tomado de Ref.[11] . . . 12

1.6 Cambio de magnetización en un dominio vía transferencia de espín. (a)

Principio del efecto STT, para el caso típico de una tricapa $Co(F1)/Cu/Co(F2)$.

Una corriente S de electrones que fluye de izquierda a derecha adquiere a través de $F1$ una polarización promedio de espín a lo largo de la magnetización $F1$. Cuando los electrones llegan a $F2$, la interacción de intercambio alinea rápidamente el momento de espín promedio a lo largo de la magnetización de $F2$. Para conservar el momento angular total, el momento angular de espín transversal perdido por los electrones es transferido a la magnetización de $F2$, el cual sufre una torca resultante que tiende a alinear su magnetización en dirección de $F1$.

(b) Principio de escritura STT en una celda MRAM: invirtiendo la dirección de la corriente a través de la celda, se inducirá una orientación, ya sea paralela o antiparalela, de ambas capas ferromagnéticas $F1$ y

$F2$. Tomado de Ref.[11] 14

- 1.7 Representación esquemática de diferentes tipos de Efectos Hall. (a) En el efecto Hall clásico, un campo magnético externo B_{ext} desvía (por fuerza de Lorentz) a los electrones de una corriente, hacia uno de los bordes, creando un desbalance transversal de carga. (b) En el efecto Hall anómalo, también se presenta un desbalance transversal de carga, para un sistema ferromagnético con campo magnético interno B_{int} , en ausencia de campo magnético externo. (c) En el efecto Hall de Espín, los electrones de diferente orientación de espín son desviados hacia bordes opuestos, debido a un campo magnético efectivo producido por acoplamiento espín-órbita, B_{SO} , creando un desbalance transversal de espín. 18
- 1.8 Descubrimiento experimental del efecto Hall de espín. El panel izquierdo co-rresponde al experimento realizado por Kato *et al.* [39], y muestra la imagen producida por efecto Kerr, donde se observa la acumulación de espín en los bordes. El panel derecho pertenece al experimento llevado a cabo por Wunderlich *et al.* [40], y muestra la polarización de los fotones emitidos por recombinación electrón-hueco, la cual es opuesta para ambos bordes, confirmando la acumulación de espín. 20

- 1.9 Comprobación experimental de la existencia de corrientes de espín. (a) Esquema del sistema experimental, el cual consiste en una barra Hall con canales perpendiculares a la barra. (b) Amplitud de polarización de espín como función de la posición medida para diferentes longitudes del canal conectado a la barra Hall, $0 \mu m$ (negro), $10 \mu m$ (rojo), $20 \mu m$ (verde), y $40 \mu m$ (azul). Puede observarse que mientras más largo el canal la amplitud de polarización de espín disminuye, comprobando la existencia de corrientes de espín. Tomado de Ref. [56] 22
- 1.10 (a) Definición intuitiva de corriente de espín I_S , dada como la diferencia entre la cantidad de portadores con espín *up* I_\uparrow espín *down* I_\downarrow . (b) Definición convencional del operador de corriente de espín. De forma análoga a la corriente de carga $J^{(e)}$, el operador convencional de corriente de espín $J^{(S)}$ se define como el producto de la densidad de espín \hat{s}_z y la velocidad \mathbf{v} . Sin embargo, este operador de corriente de espín no satisface la ecuación de continuidad en sistemas con acoplamiento espín-órbita, apareciendo un término de torca \mathcal{T}_z . Tomado de Ref. [79] 24
- 2.1 Banda de conducción de una heteroestructura con dopaje modulado, mostrando cómo se separan los electrones de sus donadores para formar un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D); E_F es la energía de Fermi y ΔE_C es la diferencia en las energías de las bandas conducción entre el material I y el material II ($n-AlGaAs$ y $GaAs$ respectivamente para la figura) y ε_1 es la energía del estado base. Tomado de Ref. [89] 32

- 2.2 Representación esquemática de la relación de dispersión, ecuación (2.4).
 Para cada banda, la orientación de espín (flechas verdes) está dada por $\langle \pm | \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) | \pm \rangle = \mp \frac{1}{k} (k_y, -k_x)$, la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ 34
- 2.3 Comparativo del desdoblamiento de espín producido sólo por el término lineal $\beta_1 k_F$ (color rojo), el desdoblamiento producto del término cúbico βk_F^3 (color azul, con $\beta = (\beta_2 + \beta_3)/2$), y el desdoblamiento correspondiente a la suma de ambos términos $\beta_1 k_F + \beta k_F^3$ (color verde) como función de la densidad de huecos n , para dos materiales distintos (*InAs* en el panel izquierdo y *GaAs* en el panel derecho). Puede verse que dependiendo del tipo de material, y del valor de n , el término lineal puede o no ser significativo. 39
- 2.4 Diagrama esquemático de la anisotropía angular de la banda de conducción a la energía de Fermi, desdoblada por interacción conjunta Rashba-Dresselhaus. Las flechas verdes indican la dirección de polarización de espín, dadas por $\langle \pm | \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) | \pm \rangle = \mp (\cos \phi, \sin \phi)$ 40
- 3.1 Conductividad de carga $\text{Re } \sigma_{yy}^{ch}(\omega)$ para diferentes valores de la razón β/α . Tomado de Ref. [72] 54

- 5.1 Parte real de la conductividad Hall de espín como función de la energía fotónica para un GE2D en presencia de la interacción espín-órbita Rashba ($\beta = 0$). La curva punteada (verde) se obtiene utilizando la definición convencional del operador de corriente de espín. La curva discontinua (roja) y la curva sólida (azul) son la contribución de la torca y la conductividad total de espín respectivamente, empleando el operador de corriente de espín conservado. Como inserción se muestra el resultado obtenido considerando las correcciones de vértice $\sigma_{VC}(\omega)$ y se comparan con los cálculos del presente trabajo. 70
- 5.2 (a) Diagrama esquemático de la anisotropía angular del desdoblamiento de espín de la banda de conducción al nivel de Fermi en un GE2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus. La curva punteada $C_r(\omega)$ es una elipse rotada que resulta de la condición $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$, véase el texto para los detalles. (b) Diagrama de las transiciones ópticas permitidas (region sombreada) entre las ramas inicial ε_- y final ε_+ a un determinado ángulo polar θ 71

5.3 (a) Conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia para un GE2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$), empleando la definición convencional de corriente de espín (curva punteada), el operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S,z}$ en el límite $\varepsilon_{so} \ll \varepsilon_F$ (curva discontinua) y la integración exacta de la ecuación (5.4) (curva sólida), respectivamente. El valor de η se fijó tal que $\hbar\eta = 0.25$ meV y el resto de los parámetros son iguales a los considerados en la figura 5.1. (b) Gráfica de la correspondiente Densidad Conjunta de Estados (DCE). Existen cuatro frecuencias principales, dos definidas por las fronteras de absorción óptica, ω_- y ω_+ , y las otras dos corresponden a los picos en la DCE presentes a frecuencias ω_a y ω_b . Las últimas dos frecuencias surgen debido a la simetría de las bandas de conducción desdobladas al nivel de Fermi, en el espacio k . Las líneas discontinuas verticales se trazan como guías en las cuatro frecuencias mencionadas.

- 5.4 (a) Conductividad Hall de espín para $\beta/\alpha = 0.5, 0.25, 0.1$ (curvas sólida, discontinua y punteada respectivamente) utilizando la propuesta de operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S,z}$. Los parámetros utilizados son idénticos a los de la Figura 5.3. Nótese que los picos de resonancia tienden a separarse en energía a medida que la razón β/α se incrementa, mientras que su magnitud disminuye. (b) Mapa de contornos de la conductividad Hall de espín a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción β/α 76
- 6.1 Parte real de la conductividad Hall de espín como función de la energía fotónica para un GH2D en presencia sólo de interacción espín-órbita Rashba ($\beta = 0$). La curva punteada se obtiene utilizando la definición convencional del operador de corriente de espín. La curva discontinua y la curva sólida son la contribución de la torca y la conductividad total de espín respectivamente, empleando el operador de corriente de espín conservado. Como inserción se muestra la comparación entre el caso $\beta = 0$ ($\alpha = 7.48 \times 10^{-23} \text{ eVcm}^3$) y el caso $\alpha = 0$ ($\beta = 7.48 \times 10^{-23} \text{ eVcm}^3$). Se observa que para este último, la intensidad del espectro de conductividad es menor al caso anterior cerca del pico central. 89

- 6.2 Esquema de la anisotropía angular del desdoblamiento de espín de la banda de valencia al nivel de Fermi en un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus para un sistema basado en *GaAs*. La curva punteada $C_r(\omega)$ resulta de la condición $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$, véase el texto para los detalles. 91
- 6.3 Conductividad (a) Hall y (b) longitudinal de espín dependiente de la frecuencia para un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$), empleando la definición convencional de corriente de espín (curva punteada), el operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S,z}$ en el límite $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$ (curva discontinua) y la integración exacta de la ecuación (5.4) (curva sólida), respectivamente. En la figura se muestran las cuatro frecuencias principales, dos definidas por las fronteras de absorción óptica, ω_- y ω_+ , y las otras dos, ω_a y ω_b , surgen debido a la simetría de las bandas de valencia desdobladas al nivel de Fermi, en el espacio k . Las líneas discontinuas verticales se ubican como guías en las cuatro frecuencias mencionadas. También se observa una buena concordancia entre las curvas sólida y discontinua para frecuencias menores a ω_b 92

- 6.4 (a) Conductividad Hall de espín para $\alpha/\beta = 0, 0.5, 1, 3/2$ (curvas azul, verde, rojo y negro respectivamente) utilizando la propuesta de operador conservado de corriente de espín \mathcal{J}_{xy}^{sz} . Nótese que los picos característicos ω_b y ω_- tienden a separarse en energía a medida que la razón α/β se incrementa. (b) Mapa de contornos de la conductividad Hall de espín a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción α/β 95
- 6.5 Conductividad (a) longitudinal y (b) Hall de carga dependiente de la frecuencia para un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$). La curvas sólidas corresponden a la conductividad de carga obtenida utilizando la integración numérica de la ecuación(6.12) y las curvas discontinuas corresponden a las fórmulas analíticas (6.13) obtenidas en el límite $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$. En la figura se muestran las cuatro frecuencias principales, ω_+ , ω_a , ω_b y ω_- . Se observa una buena concordancia entre las curvas sólida y discontinua para frecuencias menores a ω_b 96

- 6.6 (a) Gráfica de $\frac{\hbar}{8k_F^3}(\omega_+ + \omega_a + \omega_b + \omega_-)$ como función de la densidad de huecos n . Puede observarse una variación lineal con la densidad cuando $\alpha > \beta$, mientras que en el caso opuesto ($\alpha < \beta$) prácticamente no existe tal variación. Lo anterior obedece a la dependencia en la densidad que posee el parámetro α , no así el parámetro β . Esta información puede ser útil para identificar cual de los dos acoplamientos domina.
- (b) Conductividad longitudinal de carga para valores diferentes del parámetro η . Puede observarse una variación del orden del 8% entre la posición de las frecuencias características, a medida que $\hbar\eta$ cambia de 0.035 meV a 0.0035 meV, lo cual hace confiable la estimación de los parámetros de acoplamiento espín-órbita a través de las frecuencias características. 98
- 6.7 (a) Conductividad longitudinal de carga para $\alpha/\beta = 0.5, 1, 3/2$ (curvas verde, rojo y negro respectivamente). Los parámetros utilizados son idénticos a los de la Figura 6.3. Nótese que para valores tales que $\beta \geq \alpha$, la diferencia entre los picos característicos ω_+ y ω_b es casi imperceptible. (b) Mapa de contornos de la conductividad longitudinal de carga a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción α/β 100

- 6.8 (a) Conductividad Hall de espín y (b) Conductividad longitudinal de carga, para un GH2D basado en *InAs*, en presencia de interacción conjunta Rashba y Dresselhaus, utilizando el término propuesto por Winkler, ecn. (2.12). Véase el texto para los parámetros utilizados. 101
- 6.9 Diagrama del desdoblamiento anisotrópico de las bandas de espín en el espacio k a la energía de Fermi, considerando un sistema basado en *InAs*, para el Hamiltoniano conjunto Rashba más Dresselhaus, empleando el término de Dresselhaus propuesto por Winkler, ecn. (2.12). Nótese que a la frecuencia $\omega_{a,b}$, la curva C_r toca a la vez los puntos $k_{F,-}(\pi/4)$ y $k_{F,+}(3\pi/4)$, de modo tal que las frecuencias ω_a y ω_b se presentan, en el espectro óptico de conductividad, a la misma energía de excitación 102

Capítulo 1

Introducción

La segunda mitad del siglo XX se caracterizó por un notable desarrollo en el área de la Microelectrónica, evolucionando desde los primeros transistores de los años 50's hasta los más modernos microprocesadores y circuitos integrados actuales (2009). La base operacional de todo dispositivo electrónico consiste en la manipulación de un lenguaje binario expresado en presencia (bit 1) y ausencia (bit 0) de cargas o corrientes eléctricas. El gran desarrollo de la Microelectrónica ha sido popularmente resumido en la ley de Moore [1], la cual sostiene que los microprocesadores aumentarán su velocidad de procesamiento y su densidad de componentes (transistores) por chip en un factor de dos aproximadamente cada dieciocho meses. De acuerdo a una estimación reciente realizada por la Asociación de Industrias Semiconductoras [2], el tamaño de las compuertas de voltaje en los transistores será de 18 *nm* en el 2010 y alcanzará los 9 *nm* en el 2016. Como consecuencia, estos dispositivos nanométricos requerirán para su diseño un tratamiento completamente cuántico.

Esto ha motivado en parte el estudio de otra propiedad de los electrones diferente a la carga: el momento angular intrínseco o *espín* [3], característica esencialmente cuántico-relativista de los portadores de carga. Se ha señalado que el incorporar el espín del electrón a la electrónica convencional permitirá aumentar las velocidades de

procesamiento y disminuir tanto el tamaño como los consumos de energía de los dispositivos, al grado de sustituir a los equipos convencionales [4]. En la última década, diversos experimentos que van desde mantener la coherencia de espines durante varios nanosegundos a temperatura ambiente en semiconductores [5] y transportarlos varias micras de distancia [6], hasta la detección eléctrica del espín [7], han mostrado la viabilidad de una tecnología basada en esta fascinante propiedad de los electrones. Estos avances vislumbran la posibilidad de construir una amplia gama de nuevos dispositivos tales como memorias no volátiles, baterías, diodos y transistores de espín entre otros. Más aún, la manipulación de los estados cuánticos individuales permitiría la construcción de compuertas lógicas cuánticas, que darían paso al desarrollo y a la creación de una computadora basada en efectos cuánticos. Nos encontramos pues frente a una nueva y excitante ciencia sin precedentes, denominada *Espintrónica* [8], en la que la información ya no sólo es transportada por la carga del electrón, sino también por su espín.

1.1 Antecedentes e inicio de la Espintrónica

A finales de la década de los 80's, dos grupos de manera independiente [9, 10] realizaron estudios experimentales de transporte electrónico en multicapas *Ferromagneto/Metal no magnético/Ferromagneto*, encontrando que, en ausencia de campos

magnéticos externos, la resistencia de este sistema era mínima si la dirección de magnetización de las capas magnéticas era paralela, y máxima si era antiparalela, aumentando la resistividad un orden de magnitud en comparación con el efecto de Magneto-Resistencia ordinario. A tal efecto se le acuñó el nombre de Magneto-Resistencia Gigante (GMR, por sus siglas en inglés).

La explicación de este fenómeno se puede dar en términos del esquema de bandas de los componentes de la nanoestructura, y del camino libre medio dependiente del espín [11]. En materiales ferromagnéticos (como *Fe*, *Ni* o *Co*), las bandas *4s* y *3d* contribuyen a la densidad de estados al nivel de Fermi E_F . Debido a la fuerte interacción de intercambio (que favorece una orientación paralela de los espines) las bandas *3d* de los espines *up* (arriba) y espines *down* (abajo) se encuentran desfazadas en energía. Este desdoblamiento crea un desbalance entre el número de electrones *3d* con espín *up* y espín *down*, dando lugar a un momento ferromagnético neto, mientras que la conducción es dominada por electrones de la banda *4s* (no desdoblada). Ocurre que las transiciones *s-d* (que deben conservar el momento angular total) son la principal fuente de dispersión de electrones *s* en estos materiales. Esto tiene dos consecuencias importantes para el transporte: la densidad de estados para los electrones *3d* (con desbalance en espín) a la energía de Fermi resulta en probabilidades de dispersión que dependen fuertemente del espín (Regla de Oro de Fermi). De esta forma, entre dos eventos de rotación de espín producidos por dispersión, un electrón puede sufrir varios eventos de dispersión de momento manteniendo su dirección de espín. Por lo tanto, en el límite donde los eventos de rotación de espín producidos

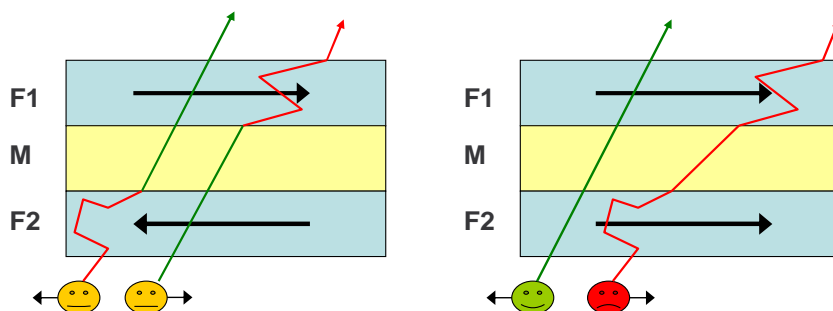


Figura 1.1: Representación esquemática del efecto de Magneto-Resistencia Gigante (GMR) en una tricapa de dos ferromagnetos idénticos $F1$ y $F2$ en medio de los cuales se sitúa un metal no magnético M . La corriente se hace fluir en dirección perpendicular a las películas. Cuando las dos capas magnéticas poseen magnetización paralela (panel derecho), los electrones con espín up (espín antiparalelo a la magnetización) pueden viajar a través de la tricapa sin sufrir dispersión, produciendo una resistencia mínima. En contraste, en el caso antiparalelo (panel izquierdo) ambos espines, up y $down$, sufren colisiones ya sea en $F1$ o $F2$ dependiendo de su espín, aumentando la resistencia. Tomado de Ref. [11].

por dispersión son despreciables, la conducción se lleva a cabo de forma paralela a través de dos canales de espín que poseen diferentes conductividades.

En el contexto del modelo de transporte difuso, se pueden establecer ciertas escalas de longitud. Las probabilidades de dispersión dependientes del espín dan como resultado diferentes caminos libre medio λ_{up} y λ_{down} , o de manera equivalente, tiempos de relajación τ_{up} y τ_{down} . En películas delgadas típicas, la escala para λ_{up} y λ_{down} va de unas cuantas unidades de nanómetros hasta unas cuantas decenas de nanómetros, con una relación $\lambda_{up}/\lambda_{down}$ muy variable. Algunas impurezas poseen una sección transversal que dependen fuertemente del espín: por ejemplo en Ni , la razón $\lambda_{up}/\lambda_{down}$ puede alcanzar el valor de 20 para impurezas de Co , o decrecer hasta 0.3 con impurezas de Cr [12].

Esta fenomenología era conocida tiempo atrás, y sirvió como motivación para los experimentos antes mencionados, con el fin de construir multicapas con espesores

individuales comparables con los caminos libre medio λ_{up} y λ_{down} de modo tal que se pudiera evidenciar el transporte dependiente del espín. En la Figura 1.1 se muestra el caso más simple de una tricapa de dos ferromagnetos idénticos $F1$ y $F2$ en medio de los cuales hay un metal no magnético M y mostrando una corriente transversal a las capas. Se asume $\lambda_{up}^F \gg \lambda_{down}^F$ con $\lambda_{up}^F > t_f > \lambda_{down}^F$ (el superíndice F denota “a la energía de Fermi”), donde t_f es el grosor de la capa magnética y $t_M \ll \lambda_{down}^F$ para un grosor t_M de la capa no magnética. Cuando ambas capas magnéticas poseen magnetización paralela (P) los electrones con espín up pueden viajar a través de la estructura sin ser dispersados, minimizando la resistencia. Por el contrario, en el caso antiparalelo (AP), ambos espines sufren colisiones en una u otra capa F (dependiendo de su espín) dando como resultado una resistencia máxima. La Magneto-Resistencia $\Delta R/R = (R_{AP} - R_P)/R_P$ (Figura 1.2), puede alcanzar hasta un 100% o más en multicapas con varios períodos F/M. Por este hallazgo, Albert Fert y Peter Grünberg recibieron el Premio Nóbel de Física en el 2007. El descubrimiento del efecto GMR marcó el inicio de la Espintrónica y en la actualidad es ampliamente utilizado en las memorias no volátiles, y ha sido uno de los hallazgos más rentables, ya que apenas seis años después de haberse reportado experimentalmente, aparecieron en el mercado los primeros discos duros con cabezas lectoras basadas en el GMR, generando ganancias multimillonarias al año.

Poco tiempo después del descubrimiento del GMR, apareció la primer propuesta teórica de un dispositivo espintrónico, diseñado por Datta y Das [13], el cual consiste en un *transistor de efecto de campo de espín* (SFET, por sus siglas en inglés), análogo

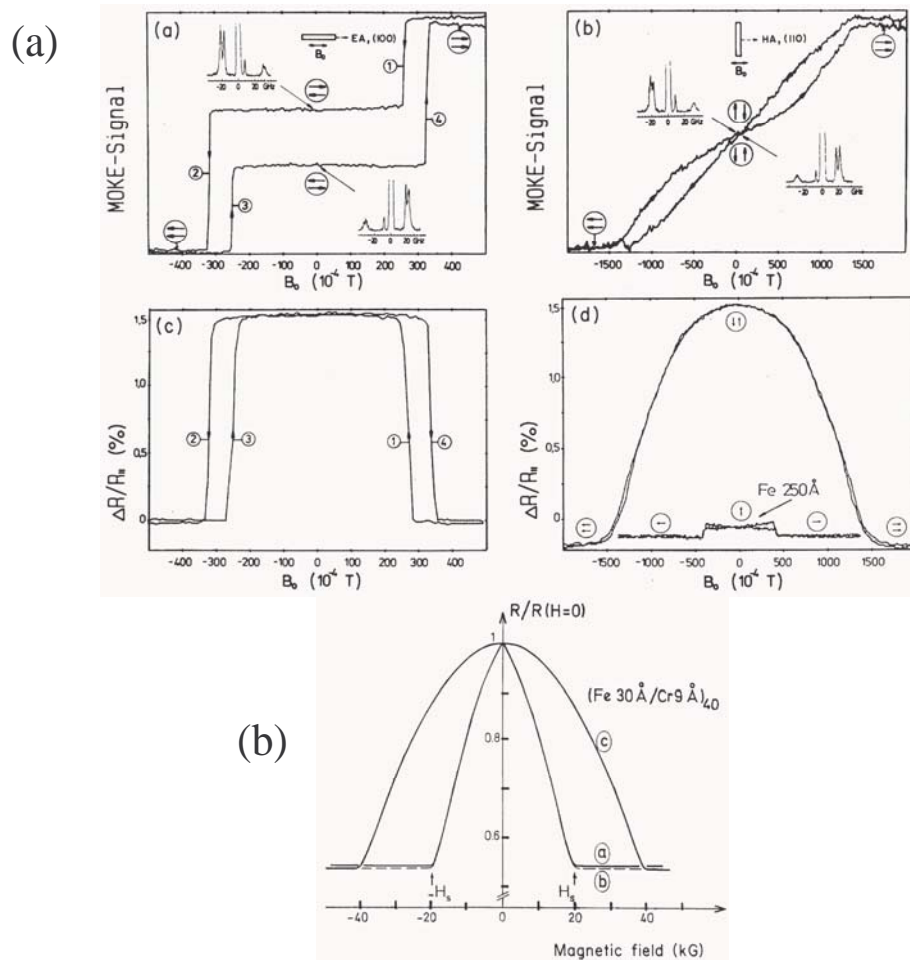


Figura 1.2: (a) Experimento original del descubrimiento del GMR por Peter Grünberg. Las muestras eran tricapas compuestas por $Fe(12\text{ nm})/Cr(1\text{ nm})/Fe(12\text{ nm})$, depositadas en sustratos de $GaAs$ (110) mediante epitaxia de haces moleculares. Las gráficas superiores muestran las curvas de magnetización medidas mediante efecto Kerr, y las gráficas inferiores muestran la Magneto-Resistencia medida con la corriente en el plano de las capas, a temperatura ambiente. Tomado de Ref. [10]. (b) Experimento original del descubrimiento del GMR por el grupo de Albert Fert. La gráfica muestra la variación de la resistencia eléctrica con el campo magnético aplicado para tres multicapas Fe/Cr depositadas mediante epitaxia de haces moleculares en sustratos de $GaAs$ (001) y medidas a 4.2 K. La corriente y el campo magnético se aplicaron en el plano de las capas, en posiciones paralelas a lo largo del eje [1 1 0]. Tomado de Ref. [9]

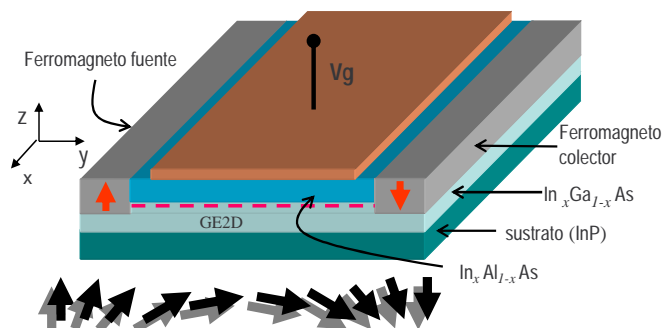


Figura 1.3: Representación esquemática del transistor de efecto de campo de espín (SFET) de Datta y Das. (Cortesía: F. Mireles)

al modulador electro-óptico. En dicho transistor de espines, una heteroestructura de $InAlAs / InGaAs$ (por ejemplo) proporciona un canal de transporte para los electrones y los confina en un sistema bidimensional. Dicho canal une dos electrodos ferromagnéticos, de los cuales uno de ellos actúa como fuente y el otro como colector (Figura 1.3). La fuente emite electrones con espines orientados a lo largo de la dirección de magnetización de dicho electrodo, mientras que el colector, con magnetización paralela al electrodo fuente, actúa como un filtro de espín y sólo permite el paso a electrones con espines orientados en la misma dirección que la magnetización del electrodo colector. Una compuerta de voltaje produce un cambio en la dirección de polarización del espín vía *acoplamiento espín-órbita* de tipo “intrínseco” [14].

Como es sabido, el acoplamiento espín-órbita es un efecto relativista en el que se acoplan el momento angular orbital, que actúa como campo magnético efectivo, y el momento magnético de espín de los electrones. Sin embargo, en semiconductores existen dos tipos de acoplamiento espín-órbita inherentes al material, en los cuales el campo magnético efectivo ya no es producto del movimiento orbital de los electrones,

sino de la asimetría espacial del cristal. El primero de ellos es conocido como efecto Dresselhaus [15] y es debido a la asimetría de inversión espacial que existe en el bulto de un semiconductor (*e.g.* semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda o wurtzita); otro tipo de acoplamiento es el efecto Rashba [16], el cual es producto de la asimetría de inversión en la (hetero-)estructura semiconductor y su magnitud puede ser modificable mediante voltajes externos. En el trabajo original de Datta y Das el efecto Rashba fue propuesto para lograr la rotación de los espines, y en la actualidad ambos fenómenos de acoplamiento espín-órbita (detallados en el siguiente capítulo) han sido propuestos como mecanismos de manipulación de espín. Diversas variantes del transistor de espines de Datta y Das aparecieron posteriormente [17, 18, 19]. Lograr la implementación práctica del SFET ha sido uno de los principales paradigmas en Espintrónica, impulsando grandes esfuerzos en diversas áreas a la vez, tales como inyección eficiente de espines polarizados, control de coherencia, detección eficiente y manipulación de la precesión del espín. Aunque la construcción del dispositivo SFET no se ha concretado (por razones que se comentarán más adelante), éste ha originado un gran desarrollo en el conocimiento de la Física fundamental de dichas áreas. El SFET constituye uno de los principales arquetipos que ha movido significativamente el impulso de la Espintrónica y que ha marcado (en cierta medida) la pauta sobre los retos actuales de ésta ciencia.

1.2 Avances y retos actuales de la Espintrónica.

Aunque se han logrado grandes avances en el área de la Espintrónica, aun existen desafíos que deben vencerse antes de ver equipos electrónicos integrados por dispositivos netamente cuánticos [20]. Buen ejemplo de ello es la implementación del SFET. Cuestiones de almacenamiento, procesamiento (lógica) y transferencia de información deben ser resueltas antes de integrar estos tres elementos en aparatos multifuncionales, y que eventualmente darían lugar a la computación cuántica. Los instrumentos de procesamiento y transferencia de datos se basan en la actualidad en materiales semiconductores, mientras que el almacenamiento de información recae en multicapas de metales magnéticos. En los equipos magnéticos de almacenamiento, la información es almacenada y recuperada mediante la reorientación de los dominios magnéticos (aunque el flujo de carga es comúnmente utilizado para la lectura final de dicha información).

En 1997 IBM introdujo el sensor de *válvula de espín* a las cabezas lectoras de discos duros, basada en el efecto GMR. El efecto válvula de espín consiste en un sistema Ferromagneto/Metal No magnético/Ferromagneto, donde uno de los ferromagnetos posee una magnetización fija, mientras que el segundo ferromagneto posee una magnetización libre, la cual cambia de orientación para aumentar o disminuir la resistividad, aprovechando así el efecto GMR. Mediante este principio, IBM logró incrementar en más de 100% por año la densidad de almacenamiento por unidad de área, pasando de 0.1 a 100 Gbit/pulgada² entre 1991 y 2003. Este efecto también

permitió la construcción de discos duros más pequeños (0.85 pulgadas de diámetro) y discos duros con capacidades de almacenamiento de hasta 1 Terabyte (10^{12} bytes).

Sin embargo, a partir de 2003 se inició un descenso en la tendencia de crecimiento de la densidad de almacenamiento por unidad de área. El siguiente paso en esta dirección fue el reemplazar la capa metálica no magnética por una película delgada de un aislante no magnético, creando una unión túnel magnética, (MTJ, por sus siglas en inglés). En este sistema, los electrones viajan de un ferromagneto a otro vía efecto túnel, lo cual conserva el espín (Figura 1.4). De manera análoga al GMR, la resistividad de la MTJ cambia dependiendo de la polarización de los ferromagnetos, dando lugar a la *Magneto-Resistencia Túnel* (TMR por sus siglas en inglés). Este efecto se conocía desde 1975 [21] pero su aplicación tuvo que esperar hasta que las técnicas de crecimiento de películas delgadas fuesen eficientes. Las primeras MTJ emplearon capas de Al_2O_3 como aislante, mostrando una TMR de 70% a temperatura ambiente. Al utilizar específicamente una barrera de MgO entre capas de Co se obtienen valores de TMR de 1010% a 5 K y 500% a temperatura ambiente. La primera cabeza lectora basada en el MTJ fue comercializada por Seagate en 2005 [11].

En 1995 inició la carrera por desarrollar la Memoria de Acceso Aleatorio Magnética (MRAM, por sus siglas en inglés). La Figura 1.5 muestra el principio de esta memoria magnética, en la arquitectura básica “punto de cruce” (*cross point*). La información binaria (“0” y “1”) es grabada en dos orientaciones opuestas de la magnetización de la capa libre a lo largo de su eje de magnetización. Las MTJ’s están conectadas en

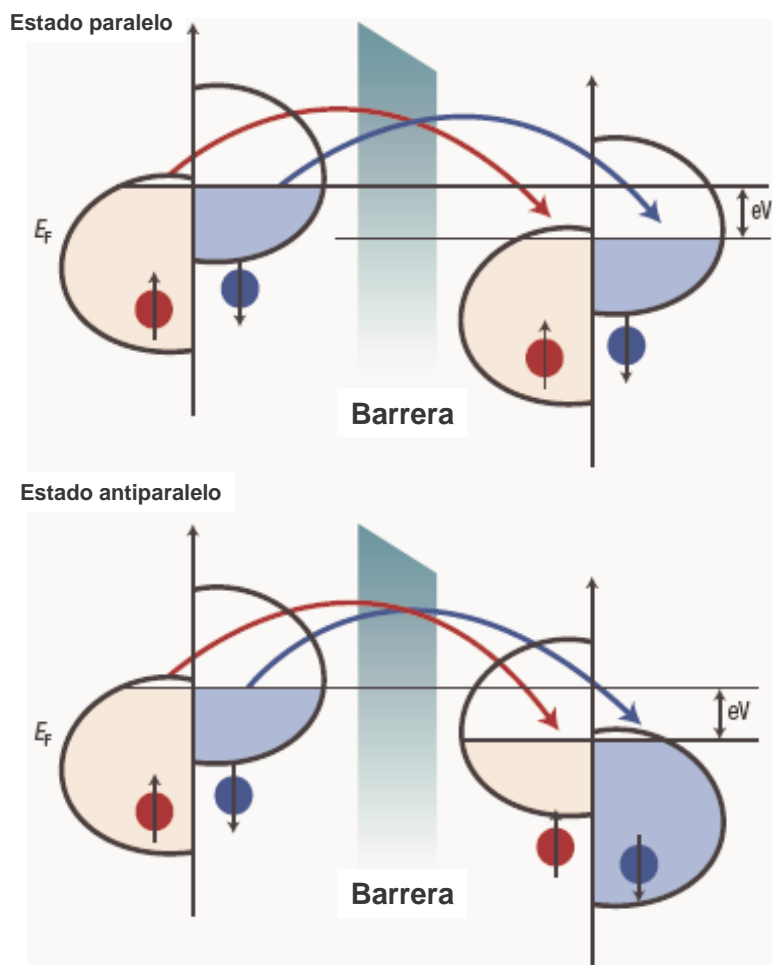


Figura 1.4: Diagrama esquemático del efecto de Magneto-Resistencia túnel (MTJ), en el caso de dos capas de metales ferromagnéticos idénticos separadas por una barrera amorfa, aislante y no magnética, tal como Al_2O_3 . El proceso de tunelaje preserva el espín. Para los electrones será más fácil tunelear, si la magnetización es paralela (figura superior) en comparación cuando la magnetización es antiparalela (figura inferior). Tomado de Ref. [11].

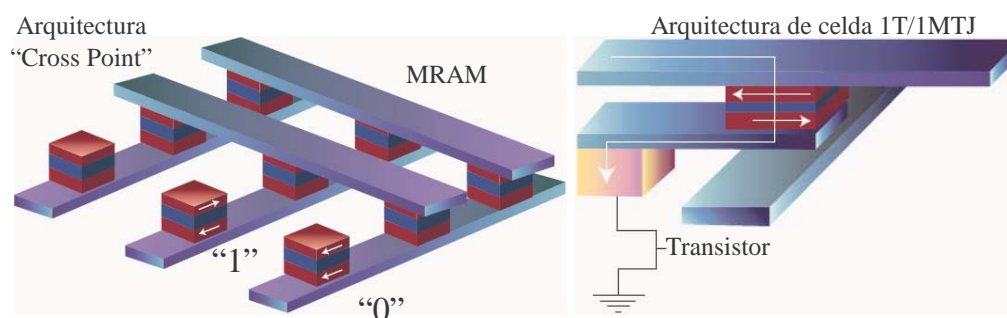


Figura 1.5: Diagrama esquemático de una MRAM, en la arquitectura básica de punto de cruce (lado izquierdo) y el diseño más realista (lado derecho) que incluye un transistor(T) por celda(MTJ). Tomado de Ref.[11].

los puntos de cruce de dos arreglos perpendiculares de líneas conductoras paralelas. Para escribir, se envían pulsos de corriente a través de las líneas de cada arreglo, y sólo en el punto de cruce de estas líneas el campo magnético producido es lo suficientemente grande para reorientar la magnetización de la capa libre. Para leer, se mide la resistencia entre las dos líneas que conectan el arreglo. En un principio, la arquitectura de punto de cruce prometía memorias con muy altas capacidades. En la práctica, la amplitud de la Magneto-Resistencia es demasiado débil para tener una lectura rápida y confiable, debido a la existencia de rutas de corriente no deseadas. Un diseño más realista incluye un transistor por celda, resultando en una arquitectura más compleja. El primer producto que utilizó este sistema fue una memoria MRAM de 4-Mbit comercializada por Freescale en el 2006. Entre las ventajas de las MRAM se encuentra la no volatilidad y acceso aleatorio rápido (5 ns lectura/escritura).

Sin embargo, el uso de un campo magnético para escribir información todavía tiene limitaciones. Con el objetivo de construir un dispositivo funcional a temperatura ambiente, la energía térmica debe ser menor a la barrera de excitaciones térmicas,

la cual es proporcional al volumen V del sistema en cuestión, con una constante de proporcionalidad por unidad de volumen, K . Para que no haya volatilidad en el sistema magnético se debe cumplir que $KV > 50 - 60 k_B T$, donde k_B es la constante de Boltzman y T es la temperatura. Reducir el volumen requiere un aumento en la constante K , pero un aumento en K implica un aumento en el campo magnético requerido para escribir. En esta área, uno de los grandes logros ha sido la manipulación de los dominios magnéticos en un metal ferromagnético mediante corrientes eléctricas [22, 23], basado en la transferencia de momento magnético entre los espines electrónicos (STT, por sus siglas en inglés) y los dominios magnéticos (Figura 1.6). Este efecto permitió la construcción de memorias MRAM-STT no volátiles, las cuales se encuentran en el mercado desde el verano del 2007. Más aun, la demostración experimental de este mismo efecto en semiconductores magnéticos a bajas temperaturas [24], ha marcado el inicio de una nueva etapa de integración de funcionalidades (procesamiento-almacenamiento) en un solo dispositivo y es uno de los campos de investigación más activos en la actualidad.

Por su parte, la tecnología de transferencia de datos está basada en sistemas láser que permiten enviar y recibir datos de manera óptica. Para ello, es necesario afectar la componente magnética de la luz, lo cual se logra mediante aparatos rotativos de Faraday, en los cuales la luz polarizada interactúa con un material magnético. La manipulación eléctrica de la temperatura de Curie [25] y del campo coercitivo [26] en semiconductores ferromagnéticos ha sido demostrada experimentalmente; esto permitirá la construcción de aparatos rotativos de Faraday modulables eléctricamente.

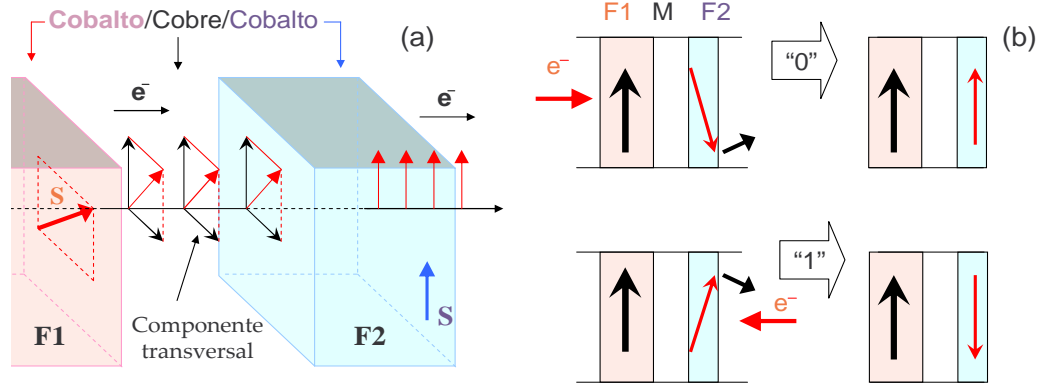


Figura 1.6: Cambio de magnetización en un dominio vía transferencia de espín. (a) Principio del efecto STT, para el caso típico de una tricapa $Co(F1)/Cu/Co(F2)$. Una corriente S de electrones que fluye de izquierda a derecha adquiere a través de F1 una polarización promedio de espín a lo largo de la magnetización F1. Cuando los electrones llegan a F2, la interacción de intercambio alinea rápidamente el momento de espín promedio a lo largo de la magnetización de F2. Para conservar el momento angular total, el momento angular de espín transversal perdido por los electrones es transferido a la magnetización de F2, el cual sufre una torca resultante que tiende a alinear su magnetización en dirección de F1. (b) Principio de escritura STT en una celda MRAM: invirtiendo la dirección de la corriente a través de la celda, se inducirá una orientación, ya sea paralela o antiparalela, de ambas capas ferromagnéticas F1 y F2. Tomado de Ref.[11].

Sin embargo, los tiempos de vida ópticos son muy cortos y en semiconductores ferromagnéticos son apenas los suficientemente largos como para ser medidos [27]. Además, los dispositivos magneto-ópticos requieren típicamente una rotación de Faraday sustancial, sin pérdidas ópticas significativas. En ese sentido, los semiconductores magnéticos no han podido desplazar a los aislantes magnéticos, y aunque el descubrimiento de nuevos semiconductores ferromagnéticos sugieren la existencia de materiales con mejores propiedades ópticas, tales como el $ZnCrTe$, sin embargo aún existe mucho por hacer en esta área.

En el tema de procesamiento de datos, los transistores actuales funcionan con base en permitir o no el paso de corriente eléctrica, logrando este control vía barreras de

potencial. En espintrónica, la información se codifica, no en el transporte electrónico, sino en la orientación del espín de los electrones. Cambiar de “0” a “1” implicaría producir una rotación de 180° en el espín, lo cual se puede lograr mediante campos magnéticos reales o efectivos, como lo ha sugerido el transistor de espines de Datta y Das [13]. La energía y el tiempo necesarios para lograr esta rotación de espín resultan ser mucho menores que lo necesario para crear barreras electrostáticas en un transistor convencional. Los tiempos de coherencia suficientemente largos (superiores a 100 ns) como para realizar operaciones lógicas, alcanzados experimentalmente en semiconductores a temperatura ambiente [28], sugieren la posibilidad de realizar operaciones con espines antes de que éstos alcancen equilibrio térmico y se pierda la polarización. A pesar de ello, existen varios factores físicos que aceleran la pérdida de polarización de espín. Entre ellos se encuentran las altas densidades de dopaje (necesarias para hacer más eficiente el transporte electrónico) y los grandes campos eléctricos (indispensables en la electrónica) que en conjunto producen campos magnéticos efectivos, provocando una orientación aleatoria del espín [29].

Parte importante del procesamiento de datos es la inyección y la detección del espín, que en esencia constituyen las etapas de entrada y lectura en un dispositivo lógico. Diversos trabajos han orientado esfuerzos en lograr inyecciones de espines polarizados de un metal ferromagneto a un semiconductor mediante contactos óhmicos, el cual resulta ser el método más directo de inyección; sin embargo las eficiencias logradas hasta ahora son menores al 10% [30, 31]. Un trabajo de Schmidt *et al.* [32] señaló que la efectividad de la inyección óhmica depende de la razón entre las

conductividades de los electrodos ferromagnéticos y no ferromagnéticos, σ_f y σ_{nf} respectivamente; cuando el material no ferromagnético es un semiconductor $\sigma_f \gg \sigma_{nf}$ y por tanto la eficiencia en la inyección de espines se vuelve significativamente pequeña. Ante esta situación, gran expectación produjo el descubrimiento de aleaciones semiconductoras III-V dopadas con impurezas magnéticas (como Mn^{+2}) con propiedades ferromagnéticas y que poseen una temperatura de Curie de hasta 110 K [33], conocidos como *semiconductores magnéticos diluidos*. Años más tarde, experimentos de Fiederling *et al.* [34] y Ohno Y. *et al.* [35] demostraron inyecciones de espines polarizados de un semiconductor magnético a un semiconductor no magnético, con eficiencias de hasta el 90%, dándole un fuerte impulso al área de la Espintrónica. En el contexto teórico, Dietl *et al.* [36] utilizaron el modelo de Zener para describir el comportamiento ferromagnético de estos materiales (particularmente $Ga_{1-x}Mn_xAs$) y predijeron que podrían alcanzar una temperatura de Curie superior a la temperatura ambiente, lo cual eventualmente permitiría integrar la inyección y el transporte de espines en un solo dispositivo.

Como se ha comentado, en un transistor de efecto de campo de espín, los electrones atraviesan un canal semiconductor en el cual el espín es manipulado mediante un campo magnético externo (real) o interno (efectivo). Se ha demostrado que los campos magnéticos internos en semiconductores con interacciones espín órbita pueden utilizarse para reorientar los espines [37]. La demostración experimental de la manipulación de estos campos magnéticos efectivos, mediante campos eléctricos externos [38], acentúa la posibilidad de la construcción de los transistores de espín. Más aun, la

separación de espines puede ser alcanzada mediante el *efecto Hall de espín* (SHE, por sus siglas en inglés), demostrado experimentalmente en semiconductores [39, 40] (2004), después en metales [41] (2005) y posteriormente a temperatura ambiente [42] (2006). La manipulación del SHE vía el control de la movilidad del material puede utilizarse para cambiar la magnitud y la dirección de las corrientes de espín [43]. Así pues, el SHE podría sustituir la inyección de espines desde un ferromagneto como método de suministro de espines en semiconductores y de manera similar, un detector de SHE podría reemplazar la necesidad de un contacto ferromagnético que mida eléctricamente la polarización de espín, todo esto a temperatura ambiente. En este sentido el SHE se perfila como un fenómeno de importancia fundamental y práctica en Espintrónica. El SHE es tema central del presente trabajo de tesis, por lo que en la siguiente sección se discutirá a detalle su fenomenología, origen y trascendencia en Espintrónica.

1.3 El Efecto Hall de espín.

Los efectos Hall conforman una de las “familias” de fenómenos físicos más reconocidos en física básica. El *efecto Hall clásico* fue descubierto por Edwin Hall en 1879 y se produce cuando por un material conductor se hace circular una corriente eléctrica en presencia de un campo magnético perpendicular a la dirección de dicha corriente (Figura 1.7 a); debido a la fuerza de Lorentz, los portadores de carga se desvían hacia uno de los bordes de la muestra creando un voltaje perpendicular tanto a la

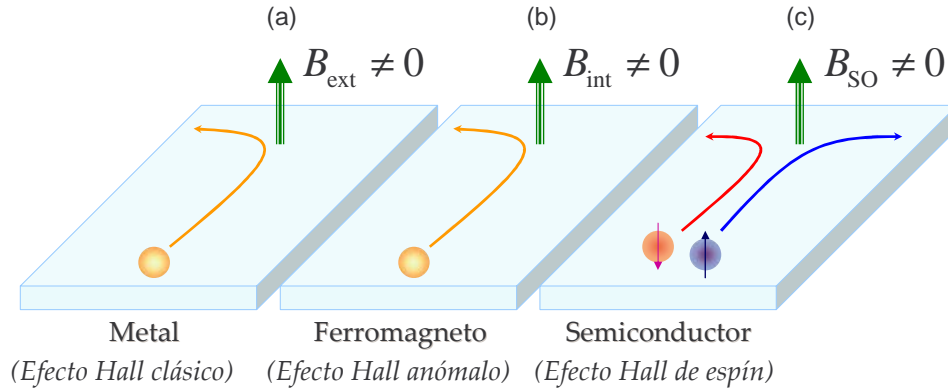


Figura 1.7: Representación esquemática de diferentes tipos de Efectos Hall. (a) En el efecto Hall clásico, un campo magnético externo B_{ext} desvía (por fuerza de Lorentz) a los electrones de una corriente, hacia uno de los bordes, creando un desbalance transversal de carga. (b) En el efecto Hall anómalo, también se presenta un desbalance transversal de carga, para un sistema ferromagnético con campo magnético interno B_{int} , en ausencia de campo magnético externo. (c) En el efecto Hall de Espín, los electrones de diferente orientación de espín son desviados hacia bordes opuestos, debido a un campo magnético efectivo producido por acoplamiento espín-órbita, B_{SO} , creando un desbalance transversal de espín.

dirección de la corriente como al campo magnético debido a la acumulación de carga con signos opuestos en los bordes. En ferromagnetos, este efecto se conoce como *efecto Hall anómalo* (Figura 1.7 b) y se presenta inclusive en ausencia de campos magnéticos externos, debido a la contribución de resistencia Hall adicional inducida por las dispersiones dependientes del espín, y depende de la magnetización del material ferromagnético [44]. Otra variante del efecto Hall clásico es el efecto Hall cuántico, descubierto en 1980 por K. Von Klitzing, en el que la corriente circula a través de un sistema bidimensional en presencia de un campo magnético externo perpendicular al flujo de carga; dicho campo magnético produce una cuantización en la densidad de estados (dando lugar a los niveles de Landau) y con ello la resistencia Hall (R_H) se cuantiza como $R_H = h/(e^2n)$ con $n = 1, 2, 3, \dots$

Por su parte, el *efecto Hall de espín* es un fenómeno que se presenta en sistemas con acoplamiento espín-órbita, en el que al inducirse una corriente de electrones (o huecos), se produce de manera simultánea, una corriente transversal de espines, perpendicular a la dirección de corriente de carga, de modo tal que electrones con espín *up* y espín *down* se acumulan en bordes opuestos del canal de transporte (Figura 1.7 c). Este fenómeno fue evidenciado teóricamente por D'yakonov y Perel' [45], como producto de mecanismos de esparcimiento asimétrico (dependiente del espín), debido al acoplamiento espín-órbita entre electrones e impurezas en el sistema. Casi tres décadas más tarde, Hirsch [46] propuso un experimento en el que podía ser observado el efecto Hall de espín, sugiriendo además la existencia de un efecto inverso, en el que una corriente longitudinal de espines produciría una corriente eléctrica transversal y con ello un desbalance de carga en los bordes del sistema. Dicho efecto inverso fue verificado experimentalmente por Ganichev et al. [47] a bajas temperaturas y subsecuentemente por Saitoh et al. [48] a temperatura ambiente, y en la actualidad es conocido en la literatura como *efecto galvánico de espín* o *efecto Hall de espín inverso*. A principios del 2008, Seki et al. [49] realizaron un experimento a temperatura ambiente en sistemas basados en *Au/FePt*, en los que lograron medir conductividades Hall de espín (vía efecto Hall de espín inverso) del orden de $10^5 \Omega^{-1} \text{cm}^{-1}$, dos órdenes de magnitud mayor a las medidas experimentales reportadas hasta ese entonces. Este efecto fue recientemente (2009) explicado por Guo et al. [50], bajo el argumento de que el efecto se presenta debido a las dispersiones que producen las impurezas de *Fe* en los portadores de carga vía efecto Kondo.

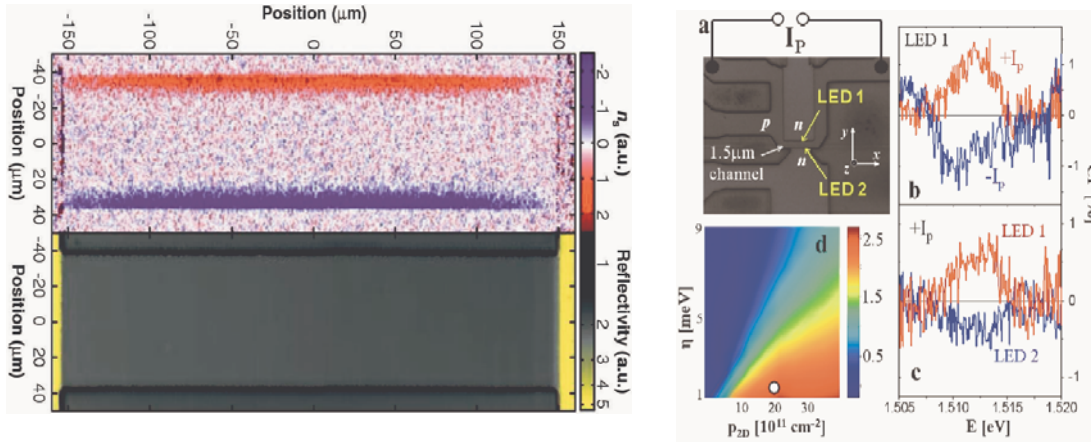


Figura 1.8: Descubrimiento experimental del efecto Hall de espín. El panel izquierdo corresponde al experimento realizado por Kato *et al.* [39], y muestra la imagen producida por efecto Kerr, donde se observa la acumulación de espín en los bordes. El panel derecho pertenece al experimento llevado a cabo por Wunderlich *et al.* [40], y muestra la polarización de los fotones emitidos por recombinación electrón-hueco, la cual es opuesta para ambos bordes, confirmando la acumulación de espín.

Por otro lado, Murakami *et al.* [51] dieron un nuevo giro al tema en el 2003, al predecir un efecto Hall de espín de huecos, producido no por dispersión debido a impurezas, sino debido a acoplamiento espín-órbita intrínseco en semiconductores. Casi de manera simultánea, Sinova *et al.* [52] predijeron un efecto similar en electrones debido al efecto Rashba, para el que la conductividad Hall de espín adquiriría un valor *universal* para un campo d.c., siendo éste $e/(8\pi)$, donde e es la magnitud fundamental de la carga eléctrica. Esto llevó a definir un efecto Hall de espín *extrínseco*, debido a acoplamiento espín-órbita entre portadores de carga e impurezas, y un efecto Hall de espín *intrínseco* debido a acoplamiento espín-órbita inherente al material. A estos trabajos se sumó un estudio de la conductividad Hall de espín de Schliemann y Loss [53], mediante el formalismo de Kubo, de un sistema de huecos pesados de dos dimensiones sujeto a acoplamiento Rashba, en el que el valor *universal* obtenido

por Sinova *et al.* para electrones, se modificaba para huecos pesados en un factor de nueve, $9e/(8\pi)$. La primera evidencia experimental del efecto Hall de espín fue producto de los trabajos de Kato *et al.* [39] y Wunderlich *et al.* [40] (Figura 1.8), quienes observaron el efecto extrínseco e intrínseco respectivamente. En ambos estudios, se detectaba la acumulación de espines en los bordes de una barra Hall mediante métodos ópticos. Desde su descubrimiento experimental, el efecto Hall de espín ha sido una línea de investigación muy activa, extendiéndose a otros sistemas de gran importancia como el grafeno [54].

Luego de mediciones ópticas, el SHE fue detectado a través de mediciones eléctricas vía el efecto Hall de espín inverso en sistemas metálicos [41]. Las primeras medidas experimentales del SHE a temperatura ambiente fueron realizadas por Stern *et al.* [42] utilizando espectroscopía Kerr en muestras tipo *n* de *ZnSe*. En todos estos experimentos, la detección del SHE se realizó de manera indirecta, midiendo acumulación de espines en los bordes. Al no existir un modo experimental de medir corrientes de espines, surgió la necesidad de comprobar si el SHE era producto de corrientes de espines, o si era un efecto de borde [55]. Esta cuestión fue clarificada por Sih *et al.* [56] mediante un experimento en el que en una barra Hall con canales transversales conectados a los bordes se medía la rotación de Kerr, permitiendo visualizar espines polarizados más allá de los bordes, comprobando así la existencia de corrientes de espín (Figura 1.9).

Como ya se ha mencionado, los primeros trabajos teóricos sobre el SHE intrínseco fueron realizados en el marco del límite d.c., y predecían un valor universal para

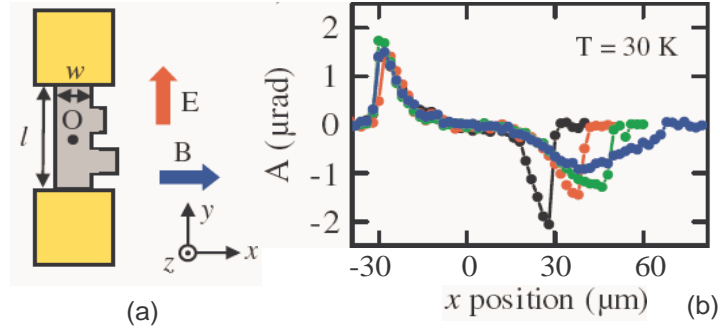


Figura 1.9: Comprobación experimental de la existencia de corrientes de espín. (a) Esquema del sistema experimental, el cual consiste en una barra Hall con canales perpendiculares a la barra. (b) Amplitud de polarización de espín como función de la posición medida para diferentes longitudes del canal conectado a la barra Hall, $0 \mu\text{m}$ (negro), $10 \mu\text{m}$ (rojo), $20 \mu\text{m}$ (verde), y $40 \mu\text{m}$ (azul). Puede observarse que mientras más largo el canal la amplitud de polarización de espín disminuye, comprobando la existencia de corrientes de espín. Tomado de Ref. [56].

diferentes sistemas [57, 58, 53]. Estudios posteriores que incluyeron correcciones de vértice (sistemas con desorden, en el lenguaje de teoría de muchos cuerpos) mostraron que el límite estático se volvía nulo [59] para un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D) en presencia de acoplamiento Rashba [60] sin importar la intensidad de dicho acoplamiento [61], la intensidad de interacciones electrón-electrón [62] o la intensidad del potencial y la densidad de las impurezas [63]. Sin embargo, actualmente está establecido que las correcciones de vértice no cancelan el límite estático en presencia de campos magnéticos [64] o impurezas magnéticas [65], así tampoco en otros modelos de acoplamiento espín-órbita, tal como el de huecos pesados en pozos cuánticos [66, 67] y huecos en el bulto de un semiconductor [68].

1.4 Transporte en el régimen de frecuencia finita.

El estudio de transporte en el régimen de frecuencia finita (a.c), representa un interesante campo de investigación. Por un lado, se ha demostrado que las correcciones de vértice tampoco cancelan la conductividad Hall de espín para un campo a.c. en el rango de terahertz [69, 70]. Por otro lado, se ha sugerido que un campo eléctrico de prueba dependiente de la frecuencia puede ser utilizado para controlar la corriente Hall de espín en un GE2D con interacción espín-órbita Rashba y Dresselhaus [71, 72]. También se ha reportado que el desdoblamiento de espín inducido por el efecto Rashba puede ser identificado ópticamente, y que propiedades espintrónicas importantes (densidad de portadores de carga, polarización de espín, etc.) de sistemas bidimensionales de electrones [73] y huecos [74] pueden ser medidas a través de experimentos ópticos. Como ha señalado Rashba [75], las propiedades ópticas y dinámicas de los sistemas espintrónicos pueden jugar un papel importante en la dinámica y el transporte de espines.

1.5 El operador de corriente de espín.

Desde el punto de vista teórico (fundamental) y con el objetivo de describir el transporte de espín, resultaría atractivo encontrar un esquema similar a la teoría de transporte de carga. De manera intuitiva se puede definir la corriente de espín como la diferencia entre la cantidad de portadores de carga con espín *up* y espín *down* trasladándose en una misma dirección (véase la Figura 1.10). Por otro lado, es bien

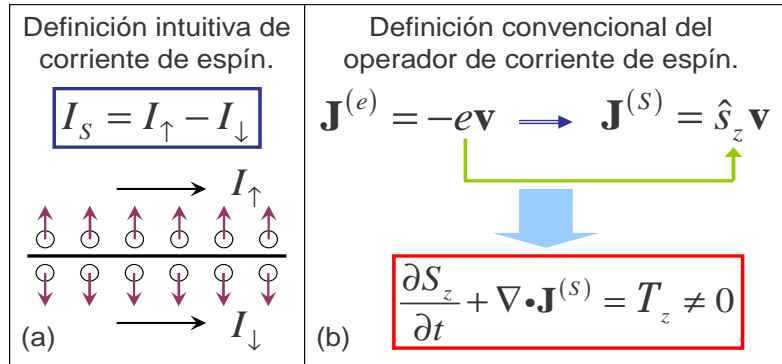


Figura 1.10: (a) Definición intuitiva de corriente de espín I_S , dada como la diferencia entre la cantidad de portadores con espín *up* I_{\uparrow} espín *down* I_{\downarrow} . (b) Definición convencional del operador de corriente de espín. De forma análoga a la corriente de carga $J^{(e)}$, el operador convencional de corriente de espín $J^{(s)}$ se define como el producto de la densidad de espín \hat{s}_z y la velocidad \mathbf{v} . Sin embargo, este operador de corriente de espín no satisface la ecuación de continuidad en sistemas con acoplamiento espín-órbita, apareciendo un término de torca \mathcal{T}_z . Tomado de Ref. [79].

sabido que la densidad de corriente de carga $J^{(e)}$ se define como el producto de la carga e y la velocidad \mathbf{v} ($J^{(e)} = e\mathbf{v}$). En este sentido, la elección natural para el operador de corriente de espín sería definirlo como el producto de los operadores de espín $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2}\sigma_z$ (σ_z es la matriz de Pauli) y velocidad \mathbf{v} , es decir $J^{(s)} = \hat{s}_z \mathbf{v}$ para una partícula que se mueve con velocidad \mathbf{v} y con espín paralelo al eje z .

Sin embargo, ésta forma convencional del operador de corriente de espín, viola la conservación de espín en sistemas con acoplamiento espín-órbita, al no satisfacer la correspondiente ecuación de continuidad [76, 77] apareciendo en ella un término “fuente” de torca de espín [78] (véase el capítulo 4), por lo cual esta definición resulta incompleta para describir el transporte de espín en sistemas con acoplamiento espín-órbita [80].

Diversos trabajos han intentado clarificar este problema fundamental. Por ejemplo, Sun y Xie [81] definieron un operador de corriente total, como la suma de la corriente lineal de espín y la corriente angular de espín. Por su parte Jin *et al.* [82] construyeron un operador de corriente de espín que se conserva, a partir del formalismo Lagrangiano. Por otro lado, Shen *et al.* [83] partieron de la ecuación de Dirac y usaron una descomposición tipo Gordon, para separar el operador de corriente de espín (conservado) del operador de corriente de momento angular total. Así también, Chen *et al.* [84] propusieron que la corriente que debe conservarse es la corriente de momento angular total, es decir la corriente de espín más la corriente de momento angular; dicho operador de corriente de momento angular total fue obtenido por Li y Tao [85] a través del teorema de Noether. A su vez, Yang y Liu [86] utilizaron el formalismo de matriz de densidad para establecer un operador de corriente de espín conservado. Entre todos estos trabajos, destaca el de Shi *et al.* [80] en el cual el operador de corriente de espín conservado resulta de agregar un término de densidad dipolar de torca $\mathbf{P}^{(\tau)}$ al operador convencional $\mathbf{J}^{(s)}$ (capítulo 4). Esta densidad de torca dipolar está asociada con el movimiento de precesión del espín. Imponiendo la condición de que la densidad dipolar de torca fuera del bulto se anule, es posible demostrar entonces que el operador de corriente de espín de Shi *et al.*, $\mathcal{J}^s = \mathbf{J}^{(s)} + \mathbf{P}^{(\tau)}$, se puede reescribir como la derivada temporal del desplazamiento de espín,

$$\mathcal{J}_z^s = \frac{d(\hat{r}\hat{s}_z)}{dt} \quad (1.1)$$

donde \hat{r} es el vector operador de posición y se ha supuesto la polarización del espín

en dirección z . De la ecuación (1.1) puede verse (al efectuar la derivada temporal) que el operador de corriente de espín propuesto por Shi *et al.* está compuesto por dos términos: uno de ellos es el producto de la densidad de espín por la velocidad (operador convencional de corriente de espín), más un segundo término que consiste en el producto del operador de posición con el operador de torca de espín. Entre las propiedades de éste operador de corriente de espín se encuentra (i) el satisfacer la respectiva ecuación de continuidad $\frac{\partial S_z}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{J}_s = 0$, siendo $S_z = \frac{\hbar}{2} \Psi^\dagger \sigma_z \Psi$ la densidad de espín y Ψ es el espinor que define el estado de la partícula. Además, a diferencia del operador convencional, (ii) éste operador conservado de corriente de espín se vuelve nulo para sistemas aislantes, donde los eigenestados están localizados. Más aun, (iii) este operador se encuentra en conjugación con una fuerza mecánica o termodinámica, satisfaciendo las relaciones de reciprocidad de Onsager [80]. Por tales razones, esta propuesta para el operador de corriente de espín resulta físicamente apropiada y por tanto merece ser examinada con mayor detalle, conformando parte fundamental de la motivación del presente trabajo.

1.6 Objetivo general del trabajo de tesis.

Como hemos visto, la gran importancia del efecto Hall de espín en el campo de la Espintrónica ha dado lugar recientemente a una intensa investigación del fenómeno, tanto teórica como experimental. Sin embargo, el estudio teórico de dicho efecto se ha concentrado en mayor medida en el límite estático ($\omega = 0$), desaprovechándose las

potenciales ventajas de dominar este efecto en el campo de la frecuencia finita, como la posibilidad de manipular el mismo mediante la modulación de la frecuencia del campo eléctrico aplicado y el estudio de los requerimientos energéticos para ello. Más aun, para el estudio de transporte de espín, se ha venido utilizando una definición para el operador de corriente de espín que no satisface las propiedades físicas requeridas, mostrando una clara ausencia de una teoría completa que describa corrientes de espín en sistemas con acoplamiento espín-órbita. Lo anterior ha dado lugar a preguntas tales como ¿es la corriente de espín una observable física?, y de ser afirmativo ¿cómo se podrían medir una corriente de espín? Así pues estas cuestiones abren nuevas posibilidades de estudio a nivel fundamental en el área de la Espintrónica.

En el presente trabajo de tesis se estudiará la conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia, utilizando el formalismo de Kubo de respuesta lineal y empleando la definición del operador de corriente reportada por Shi et al. [80], para gases bidimensionales de electrones y huecos pesados, sujetos a interacción espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus y a un campo eléctrico a.c. Se obtendrán expresiones para la conductividad de espín, y de manera sistemática se estudiará la contribución de la parte del operador convencional de corriente de espín y la contribución de la torca de espín, así como el efecto de incluir este último término (conductividad total). Se revisará el límite estático para el operador conservado de corriente de espín, y se estudiará la variación de la conductividad Hall de espín como función de las constantes de acoplamiento (Rashba y/o Dresselhaus), la densidad de portadores de carga y los posibles efectos debido a la anisotropía en la relación de dispersión generada por

la interacción conjunta Rashba-Dresselhaus. Se espera que estos resultados presenten datos relevantes que permita evidenciar la validez de los operadores de corriente de espín, además de aportar información sobre física fundamental en el régimen de frecuencia finita.

En el siguiente capítulo se revisará detalladamente el fenómeno de acoplamiento espín-órbita y sus diferentes tipos, tanto para electrones como para huecos pesados, así como sus implicaciones físicas.

Capítulo 2

Acoplamiento Espín-Órbita en Semiconductores

Desde los inicios de la Mecánica Cuántica se sabe que el movimiento orbital de los electrones dentro del átomo produce un campo magnético efectivo que interactúa con el espín electrónico, modificando su orientación. A este efecto se le conoce como *acoplamiento espín-órbita* y es uno de los mecanismos físicos más estudiados en Es-pintrónica en la actualidad ya que juega un papel importante en la manipulación del espín de los portadores de carga. Esta correlación entre el movimiento orbital y la orientación del espín da lugar a una variedad de interesantes fenómenos físicos, entre ellos el efecto Hall de espín. Particularmente en semiconductores, el campo magnético efectivo es producto de la falta de simetría de inversión espacial en el material. Dependiendo del tipo de asimetría de inversión (estructural ó espacial), la interacción espín-órbita puede ser de tipo Rashba o Dresselhaus. En ambos casos, el acoplamiento espín-órbita depende del momento de los portadores de carga, rompiendo la degeneración de los estados de espín en el vector de onda \mathbf{k} , a diferencia del efecto Zeeman que rompe la degeneración en energía. En el presente capítulo se estudiará de manera detallada el fenómeno de acoplamiento espín-órbita en semiconductores. Se revisarán

los Hamiltonianos de acoplamiento espín-órbita de Rashba y de Dresselhaus, tanto para electrones como para huecos pesados, los cuales posteriormente serán utilizados en el estudio de transporte de espín.

2.1 Introducción

El acoplamiento entre el movimiento orbital y el grado de libertad de espín de los electrones es un efecto relativista descrito por la ecuación de Dirac y su expansión no-relativista en series del inverso de la velocidad de la luz, c . A segundo orden se obtiene, además de otras contribuciones independientes del espín, el siguiente término *genérico* de acoplamiento espín-órbita [87],

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

donde m_0 es la masa en reposo del electrón, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ es el operador de momento, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli y representa el espín del electrón ($\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$) y $V(\mathbf{r})$ es el potencial externo. Como es bien sabido, el acoplamiento espín-órbita afecta de manera importante el espectro atómico. En semiconductores, el término genérico de acoplamiento espín-órbita se renormaliza y su intensidad aumenta hasta 3 órdenes de magnitud. Como ya se mencionó, la interacción espín-órbita en semiconductores es producto de la asimetría de inversión espacial propia del material [88]. Ésta asimetría de inversión en el bulto (BIA) da origen a la interacción tipo Dresselhaus. Por otro lado, uno de los sistemas físicos más estudiados en Espintrónica

son las heterouniones conformadas por películas delgadas de dos semiconductores diferentes con similiar constante de red, en las que por medio de ingeniería de bandas, es posible confinar a los portadores de carga (electrones o huecos) en un gas de dos dimensiones. Estas heteroestructuras semiconductoras poseen una asimetría de inversión estructural (SIA) que da lugar a la interacción tipo Rashba. Antes de discutir en mayor detalle el acoplamiento espín-órbita en semiconductores, es importante describir la formación de un gas bidimensional de electrones (GE2D).

2.2 Sistemas cuasi-bidimensionales

Existen diversas formas de crear un gas (o sistema) cuasi-bidimensional de portadores de carga. Una de ellas es construir heteroestructuras dopadas utilizando técnicas de crecimiento tales como epitaxia de haces moleculares (MBE) o depósito químico de vapores metal-orgánicos (MOCVD). Para evitar problemas de dispersión por interacción electrostática, se utiliza el *dopaje modulado*, en el que sólo uno de los materiales que conforman la heteroestructura es afectado con impurezas. Esto se observa de manera esquemática en la Figura 2.1. En el lado izquierdo de dicha figura, se muestra la banda de conducción de una heteroestructura $n - AlGaAs/GaAs$ antes de que los donadores desprendan electrones (Figura 2.1 a). Una vez que las impurezas liberan electrones (Figura 2.1 b), estos migran hacia el material intrínseco, cuya energía de banda de conducción está por debajo de la banda de conducción del material

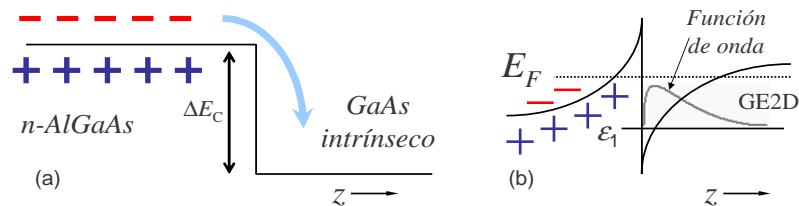


Figura 2.1: Banda de conducción de una heteroestructura con dopaje modulado, mostrando cómo se separan los electrones de sus donadores para formar un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D); E_F es la energía de Fermi y ΔE_C es la diferencia en las energías de las bandas conducción entre el material I y el material II ($n\text{-AlGaAs}$ y GaAs respectivamente para la figura) y ε_1 es la energía del estado base. Tomado de Ref. [89]

dopado; esto causa un desequilibrio de carga y crea con ello un campo eléctrico efectivo, formándose así un pozo de potencial cuántico cuasi-triangular que crea estados ligados. Así pues se logra confinar a los electrones en la dirección de crecimiento de la heteroestructura (dirección z en la figura), pero manteniéndolos libres en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento (plano $x - y$), conformando así un gas de electrones de dos dimensiones.

2.3 Efecto Rashba

El campo eléctrico producido en la interfaz (paralelo a la dirección de crecimiento), se transforma (debido al acoplamiento espín-órbita) en un campo magnético efectivo que actúa sobre el espín de los portadores de carga confinados. A este fenómeno se lo conoce como *efecto Rashba*. En un artículo extensamente citado, Bychkov y Rashba [16] derivaron el siguiente término para describir el acoplamiento espín-órbita en un gas de electrones (e) de dos dimensiones (GE2D),

$$H_e^R = \frac{\alpha_e}{\hbar} (\sigma_y p_x - \sigma_x p_y) \quad (2.2)$$

siendo α_e una constante relacionada con la intensidad de acoplamiento. El valor de α_e en materiales III-V tipo zinc-blenda ha sido evaluado a través de expresiones analíticas utilizando la teoría $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [90]. Particularmente, de Andrada e Silva *et al.* [91] emplearon el modelo de Kane de 8 bandas y obtuvieron que el valor de α_e puede estimarse mediante la expresión

$$\alpha_e = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{E_\Delta}{E_g} \frac{2E_g + E_\Delta}{(E_g + E_\Delta)(3E_g + 2E_\Delta)} eE \quad (2.3)$$

donde E_g representa la brecha energética principal del semiconductor en la región del pozo cuántico que contiene al GE2D, E_Δ es la brecha entre la banda de huecos split-off y la banda degenerada huecos pesados-huecos ligeros, m^* es la masa efectiva de los electrones, e es la magnitud fundamental de carga y E es el campo eléctrico creado en la interfaz del sistema bidimensional de electrones, por lo cual α_e puede ser modulada mediante voltajes externos.

Para una partícula con momento \mathbf{p} y Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2m^*} + H_e^R$, el término (2.2) rompe la degeneración en el vector de onda \mathbf{k} produciendo dos ramas en la relación de dispersión de los electrones dadas por,

$$\varepsilon_\pm = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha_e k \quad (2.4)$$

con los respectivos eigenvectores,

$$|\psi_{\mathbf{k},\pm}(\mathbf{r})\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \begin{bmatrix} 1 \\ \pm i e^{i\theta} \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

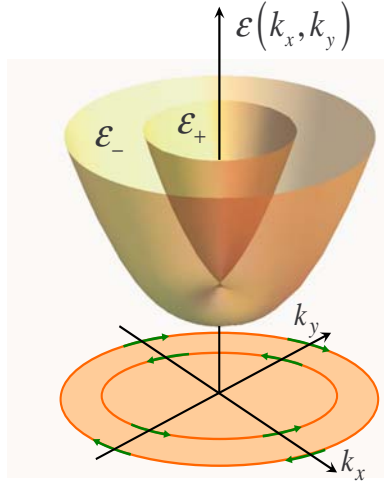


Figura 2.2: Representación esquemática de la relación de dispersión, ecuación (2.4). Para cada banda, la orientación de espín (flechas verdes) está dada por $\langle \pm | \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) | \pm \rangle = \mp \frac{1}{k}(k_y, -k_x)$, la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$

donde $k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, $\theta = \tan^{-1}(k_y/k_x)$ y A es el área del sistema. La relación de dispersión (2.4) consiste en dos cuasi-paraboloides concéntricos representados esquemáticamente en la Figura 2.2. Para cada banda, la orientación de espín (flechas verdes) está dada por $\langle \pm | \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) | \pm \rangle = \mp \frac{1}{k}(k_y, -k_x)$, la cual es perpendicular a la dirección del vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. La energía del desdoblamiento de los estados de espín del GE2D, $\Delta_s \equiv \varepsilon_+ - \varepsilon_- = 2\alpha_e k$, puede ser determinada mediante experimentos de antilocalización en barras Hall [92] ó vía oscilaciones de Shubnikov-de Haas [93, 94]. Los valores experimentales de α_e varían desde 0.06 a 0.4 eV-Å [95], lo cual conduce a una energía de desdoblamiento de espín de 1 hasta 10 meV al número de onda de Fermi k_F , dependiendo de la composición química del semiconductor y del nivel de dopaje modulado.

El efecto Rashba también se presenta en las bandas de valencia. Mediante teoría de grupos, Gerchikov y Subashiev [96] mostraron que el acoplamiento Rashba en la

subbanda de huecos pesados (hh) debería seguir la forma

$$H_{hh}^R = \frac{i\alpha_{hh}}{\hbar^3}(\sigma_+ p_-^3 - \sigma_- p_+^3) \quad (2.6)$$

con $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$, $p_{\pm} = p_x \pm ip_y$ y donde α_{hh} es una constante análoga a α_e . Nótese que la expresión del acoplamiento Rashba para huecos pesados varía de forma cúbica con el momento, a diferencia del caso de los electrones cuya dependencia es lineal en k .

Este término de acoplamiento produce dos sub-bandas de la forma $\varepsilon_{\pm} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha_e k^3$.

El Hamiltoniano de Rashba para huecos pesados obtenido por Gerchikov y Subashiev, fue confirmado posteriormente por Winkler *et al.* [97] mediante teoría de invariantes.

Utilizando el modelo de Pidgeon-Brown, Liu *et al.* [98] encontraron la siguiente expresión para α_{hh} :

$$\alpha_{hh} = \frac{512d^4\gamma_2^2 eE}{9\pi^6(3\gamma_1 + 10\gamma_2)(\gamma_1 - 2\gamma_2)} \quad (2.7)$$

donde d es el ancho del pozo de confinamiento, $\gamma_{1,2,3}$ son los parámetros de Luttinger, y como ya se mencionó, E es el campo eléctrico en la interfaz del pozo. La magnitud del campo eléctrico puede estimarse como $E = en/\varepsilon_{SC}$, con e la magnitud fundamental de la carga eléctrica, ε_{SC} es la constante dieléctrica del material y n la densidad de portadores de carga por unidad de área. Nótese pues, que el parámetro α_{hh} es proporcional a n (y de igual forma para α_e). Para semiconductores III-V la energía de desdoblamiento Δ_s de los estados de espín de huecos pesados debido a interacción Rashba varía de 0.05 a 5 meV, es decir, aproximadamente un orden de magnitud menor comparado al caso de electrones.

2.4 Efecto Dresselhaus

Otra contribución importante al desdoblamiento de los estados de espín (en ausencia de campos magnéticos externos) proviene de la asimetría de inversión que existe en el bulto de un cristal semiconductor, tal como sucede en los compuestos tipo zincblenda. Esta asimetría produce un campo efectivo que da lugar al efecto Dresselhaus. Utilizando teoría $k \cdot p$ a tercer orden, Dresselhaus [15] propuso que el desdoblamiento de los estados de espín era causado por el término de la forma,

$$H_D^{(3D)} = \frac{\gamma}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - p_z^2) + \sigma_y p_y (p_z^2 - p_x^2) + \sigma_z p_z (p_x^2 - p_y^2)] \quad (2.8)$$

donde la constante γ proporciona la intensidad de acoplamiento espín-órbita. A diferencia del efecto Rashba, el parámetro γ es intrínseco de cada material y no puede ser modulable. Los valores experimentales de γ para semiconductores III-V tipo zincblenda varían desde 130 a 187 eV-Å³ [91], lo cual conduce a una energía de desdoblamiento de espín de hasta 3 meV al número de onda de Fermi, dependiendo de la densidad electrónica. En una heteroestructura semiconductor donde los electrones se encuentren confinados en la dirección z (formando un gas bidimensional), el valor de expectación del operador de momento en esta dirección se vuelve nulo, es decir $\langle p_z \rangle = 0$ y generalmente $\langle p_z^2 \rangle \neq 0$. Despreciando contribuciones a orden cuadrático, el término de Dresselhaus para electrones bidimensionales se reduce a la forma,

$$H_e^D = \frac{\beta_e}{\hbar} (\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) \quad (2.9)$$

donde $\beta_e = -\gamma \langle p_z^2 \rangle / \hbar^2 \simeq -\gamma (\pi/d)^2$, para un pozo con un ancho de confinamiento d .

Nótese que al igual que en el efecto Rashba, el término (2.9) rompe la degeneración en el vector de onda \mathbf{k} produciendo dos ramas en la relación de dispersión de los electrones análogas a la ecuación (2.4).

Por otro lado, la contraparte del efecto Dresselhaus para huecos pesados ha sido poco investigada. En un estudio sobre relajación de espín y decoherencia en puntos cuánticos sujetos a campos magnéticos perpendiculares, Bulaev y Loss [99] propusieron que el término de acoplamiento Dresselhaus para un gas de huecos pesados de dos dimensiones (GH2D) debería ser de la forma,

$$H_{hh}^{D,BL} = -\frac{\beta_{hh}}{\hbar^3}(\sigma_+ p_- p_+ p_- + \sigma_- p_+ p_- p_+) \quad (2.10)$$

donde β_{hh} es la constante de acoplamiento Dresselhaus de huecos pesados dada por,

$$\beta_{hh} = \frac{3\gamma_2\gamma\langle p_z^2 \rangle}{2m_0\rho\delta} \quad (2.11)$$

siendo δ la brecha energética entre la banda de huecos pesados y huecos ligeros, $\rho = E_\Delta/(E_g + E_\Delta)$ y γ es la constante de acoplamiento debido a asimetría de inversión en el bulto. De acuerdo a la propuesta de Bulaev y Loss, el término de Dresselhaus varía de forma cúbica con el momento al igual que en el caso del efecto Rashba para huecos pesados. Por su parte, utilizando teoría de invariantes y la teoría $k \cdot p$ de 14×14 bandas, Winkler [comunicación privada] obtuvo que el término de Dresselhaus de huecos pesados debería seguir la forma,

$$H_{hh}^{D,W} = \frac{\beta_1}{\hbar}(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) + \frac{\beta_2}{\hbar^3}(\sigma_x p_x^3 + \sigma_y p_y^3) + \frac{\beta_3}{\hbar^3}(\sigma_x p_x p_y^2 + \sigma_y p_y p_x^2) \quad (2.12)$$

Tabla 2.1: Parámetros de bulto de algunos semiconductores III-V tipo zincblenda a T=0 K. Los subíndices e , lh y hh denotan electrones, huecos ligeros y huecos pesados respectivamente. Tomados de Refs. [88, 89]

	E_g (eV)	E_Δ (eV)	m_e^*	m_{lh}^*	m_{hh}^*	γ_1	γ_2	γ_3	$C_k \times 10^{-10}$ (eVcm)	γ (eVA ³)
<i>GaAs</i>	1.52	0.34	0.067	0.82	0.51	6.8	1.9	2.73	-0.34	28
<i>InAs</i>	0.42	0.41	0.023	0.26	0.41	20.4	8.3	9.1	-1.12	130

donde de acuerdo con Winkler, las constantes $\beta_{1,2,3}$ están dadas por,

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= -C_k \left[\frac{128\gamma_3\sqrt{3}}{9\pi^2(3\gamma_1/2 + 5\gamma_2)} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right] \\
\beta_2 &= \frac{3\gamma}{4\rho} - \frac{C_k d^2 \sqrt{3}}{4\pi^2} - \frac{512\gamma_3(\sqrt{3}d^2\rho C_k \gamma_2 + 6\pi^2\gamma\gamma_3)}{9\pi^4\rho(3\gamma_1 + 10\gamma_2)^2} \\
\beta_3 &= \frac{(3\pi^2\gamma - \sqrt{3}d^2\rho C_k)(2\gamma_3 - \gamma_2)}{4\pi^2\gamma_2\rho} - \frac{512\gamma_3(\sqrt{3}d^2\rho C_k \gamma_2 + 6\pi^2\gamma\gamma_3)}{9\pi^4\rho(3\gamma_1 + 10\gamma_2)^2}
\end{aligned} \tag{2.13}$$

siendo C_k un parámetro de acoplamiento BIA (véase la Tabla 2.1 para valores numéricos), y como ya se mencionó, d es el ancho del pozo de confinamiento. Nótese que en la ecuación (2.12) existe una contribución lineal al desdoblamiento de los estados de espín, además de las contribuciones cúbicas. En la Tabla 2.2 se muestran los valores numéricos para las constantes α_e , α_{hh} y $\beta_{1,2,3}$. Puede verse que β_2 y β_3 son del mismo orden de magnitud (poseen valores numéricos muy similares), por lo que hacer $\beta_2 \approx \beta_3 = \beta$ resultaría una buena aproximación. Si aunado a esto, se despreciara el término lineal de la expresión (2.12), ésta última se reduce al término de Bulaev y Loss, ecuación (2.10). En la figura 2.3 se graficó un comparativo del desdoblamiento de espín a la energía de Fermi (es decir, cuando el número de onda

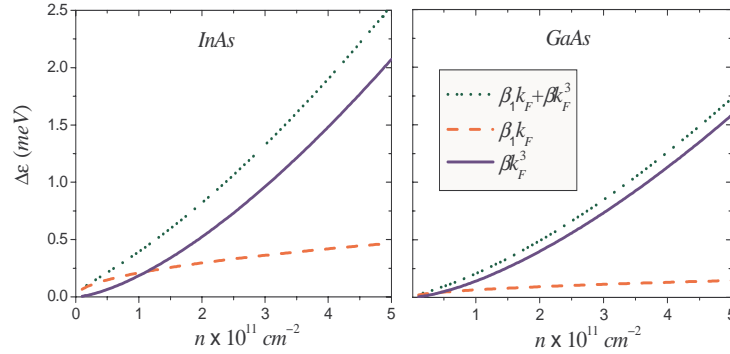


Figura 2.3: Comparativo del desdoblamiento de espín producido sólo por el término lineal $\beta_1 k_F$ (color rojo), el desdoblamiento producto del término cúbico βk_F^3 (color azul, con $\beta = (\beta_2 + \beta_3)/2$), y el desdoblamiento correspondiente a la suma de ambos términos $\beta_1 k_F + \beta k_F^3$ (color verde) como función de la densidad de huecos n , para dos materiales distintos (*InAs* en el panel izquierdo y *GaAs* en el panel derecho). Puede verse que dependiendo del tipo de material, y del valor de n , el término lineal puede o no ser significativo.

equivale al número de onda de Fermi, $k_F = \sqrt{2\pi n}$, producido sólo por el término lineal $\beta_1 k_F$ (color rojo), el desdoblamiento producto del término cúbico βk_F^3 (color azul, con $\beta = (\beta_2 + \beta_3)/2$), y el desdoblamiento correspondiente a la suma de ambos términos $\beta_1 k_F + \beta k_F^3$ (color verde) como función de la densidad de huecos n , para dos materiales distintos (*InAs* y *GaAs*). Puede verse que dependiendo del tipo de material y del valor de n , el término lineal puede o no ser despreciado. En la actualidad no se han reportado medidas experimentales de la energía de desdoblamiento de espín causada por acoplamiento espín-órbita de Dresselhus para huecos pesados.

Tabla 2.2: Valores numéricos de las constantes de acoplamiento espín-órbita, calculados a partir de las expresiones (2.3), (2.7) y (2.13), considerando una densidad $n = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y un ancho de pozo de 10 nm .

	$\alpha_e \times 10^{-11}$ (eVcm)	$\alpha_{hh} \times 10^{-22}$ (eVcm ³)	$\beta_1 \times 10^{-11}$ (eVcm)	$\beta_2 \times 10^{-22}$ (eVcm ³)	$\beta_3 \times 10^{-22}$ (eVcm ³)
<i>GaAs</i>	0.77	0.30	4.12	0.91	1.92
<i>InAs</i>	6.13	1.06	13.2	1.66	2.05

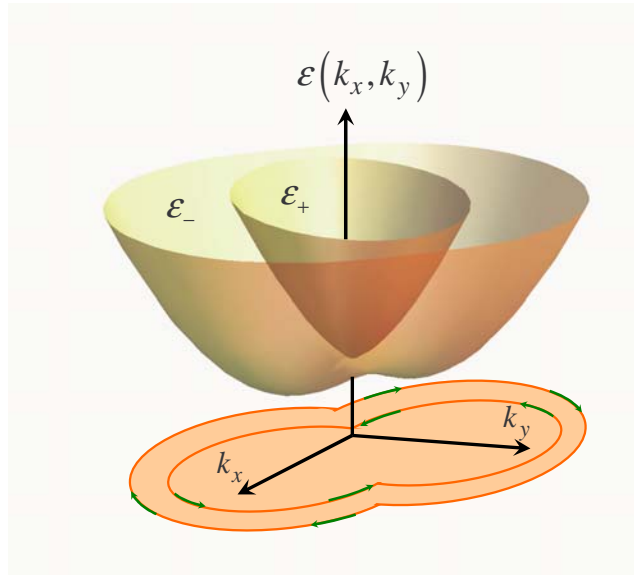


Figura 2.4: Diagrama esquemático de la anisotropía angular de la banda de conducción a la energía de Fermi, desdoblada por interacción conjunta Rashba-Dresselhaus. Las flechas verdes indican la dirección de polarización de espín, dadas por $\langle \pm | \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) | \pm \rangle = \mp(\cos \phi, \sin \phi)$.

2.5 Interacción conjunta Rashba-Dresselhaus

2.5.1 Electrones (GE2D)

Suponga un electrón confinado en un GE2D, sujeto a acoplamiento espín-órbita de ambos tipos, Rashba y Dresselhaus (lineal). El Hamiltoniano de ésta partícula es descrito por,

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{\alpha_e}{\hbar}(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y) + \frac{\beta_e}{\hbar}(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y) \quad (2.14)$$

Para éste Hamiltoniano, el espectro de energía está dado por,

$$\varepsilon_\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mu k \Delta(\theta) \quad (2.15)$$

donde $\mu \in \{+1, -1\}$ denota los estados de espín. Note que a diferencia de la ecuación

(2.4), el espectro de energía (2.15) posee una anisotropía angular (ángulo polar, Figura 2.4) dada por la función $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha_e^2 + \beta_e^2 - 2\alpha_e\beta_e \sin(2\theta)}$, con $\theta = \tan^{-1}\left(\frac{k_y}{k_x}\right)$. Tal y como se detallará más adelante, como consecuencia de dicha anisotropía el espectro de la conductividad de carga como función de la frecuencia de absorción se vuelve asimétrico, presentando cuatro frecuencias características. Cuando α_e o β_e es cero, el desdoblamiento de espín en el espacio \mathbf{k} se vuelve isotrópico y su correspondiente espectro de conductividad óptica se vuelve constante entre las frecuencias de absorción.

Los eigenestados del Hamiltoniano (2.14) son de la forma,

$$|\psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r})\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \begin{bmatrix} 1 \\ -\mu e^{-i\phi} \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

con el vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = k(\cos\theta, \sin\theta)$ en coordenadas polares, $\phi = \tan^{-1}\left(\frac{\alpha_e k_x - \beta_e k_y}{\alpha_e k_y - \beta_e k_x}\right)$ y A es el área del sistema. Se puede mostrar que para cada banda de espín existe un número de onda de Fermi asociado dado por

$$k_F^\mu(\theta) = \sqrt{\frac{2m^*\varepsilon_F}{\hbar^2} + k_{so}^2 \frac{\Delta(\theta)}{\alpha_e^2 + \beta_e^2}} - \mu k_{so} \sqrt{\frac{\Delta(\theta)}{\alpha_e^2 + \beta_e^2}} \quad (2.17)$$

donde $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ es la energía de Fermi con el número de onda de Fermi $k_F = \sqrt{2\pi n - 2k_{so}^2}$ y n la densidad electrónica. La interacción espín-órbita introduce una energía y un número de onda de espín-órbita característicos dados por $\varepsilon_{so} = \frac{\hbar^2 k_{so}^2}{2m^*}$ y $k_{so} = \frac{m^* \sqrt{\alpha_e^2 + \beta_e^2}}{\hbar^2}$, respectivamente.

2.5.2 Huecos pesados (GH2D)

Por su parte, un gas de huecos pesados de dos dimensiones (GH2D) en presencia de acoplamiento Rashba y Dresselhaus está descrito por el Hamiltoniano,

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{i\alpha_{hh}}{\hbar^3}(\sigma_+ p_-^3 - \sigma_- p_+^3) - \frac{\beta_{hh}}{\hbar^3}(\sigma_+ p_- p_+ p_- + \sigma_- p_+ p_- p_+) \quad (2.18)$$

donde se asume que la masa efectiva es negativa y se ha considerado el término de Dresselhaus de Bulaev y Loss, ecuación (2.10). Para este Hamiltoniano, el espectro de energía y los eigenvectores están dados respectivamente por

$$\varepsilon_\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mu \Delta(\theta) k^3 \quad (2.19)$$

$$\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha_{hh}^2 + \beta_{hh}^2 - 2\alpha_{hh}\beta_{hh} \sin(2\theta)} \quad (2.20)$$

$$|\psi_{k,\mu}(\mathbf{r})\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \begin{bmatrix} 1 \\ \mu e^{i(2\theta-\phi)} \end{bmatrix} \quad (2.21)$$

donde las definiciones para θ y ϕ son similares al caso de electrones. Para la relación de dispersión (2.19), existe un número de onda de Fermi asociado a cada banda, dado por [53],

$$k_F^\mu(\theta) = \mu \frac{\hbar^2}{4m^* \Delta(\theta)} \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2m^* \Delta(\theta)}{\hbar^2} \right)^2 4\pi n} \right] + \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\hbar^2}{2m^* \Delta(\theta)} \right)^2 \left[1 - \sqrt{1 - \left(\frac{2m^* \Delta(\theta)}{\hbar^2} \right)^2 4\pi n} \right] + 3\pi n \right\}^{1/2} \quad (2.22)$$

Resulta interesante notar que la anisotropía angular del espectro de energía (2.19) tiene una forma idéntica al caso de los electrones, a pesar de la diferencia cualitativa que existe en los términos de acoplamiento espín-órbita de electrones y huecos. Esto nos conducirá a algunas similitudes en el espectro de conductividad óptica para electrones y huecos pesados, mostrando sin embargo importantes diferencias, tal y como se verá en capítulos subsiguientes.

Si en la ecuación (2.18) se reemplaza el término de Dresselhaus de Bulaev y Loss por el respectivo propuesto por Winkler (2.12), el espectro de energía y los eigenvectores correspondientes toman la forma

$$\varepsilon_\mu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \mu\sqrt{\lambda_+\lambda_-} \quad (2.23)$$

$$|\psi_{k,\mu}(\mathbf{r})\rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \begin{bmatrix} 1 \\ \mu \frac{\lambda_-}{\sqrt{\lambda_+\lambda_-}} \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

donde $\lambda_\pm = \beta_1 k_\mp + \beta_2(k_x^3 \mp ik_y^3) \mp i\beta_3 k_x k_y k_\pm \pm i\alpha_{hh} k_\mp^3$ y $k_\pm = k_x \pm ik_y$. Las expresiones obtenidas en el presente capítulo para las relaciones de dispersión y eigenvectores de los Hamiltonianos con interacción conjunta serán utilizados para calcular la conductividad de espín de electrones y huecos pesados en los capítulos 5 y 6 respectivamente. Antes de ello, en el siguiente capítulo se estudiará a fondo el formalismo de Kubo, el cual nos permitirá el cálculo de dichas conductividades.

Capítulo 3

Transporte: Formalismo de Kubo

La teoría de respuesta lineal es un concepto ampliamente utilizado en todas las ramas de la Física. Ésta se basa en asumir que la respuesta de un sistema a una pequeña perturbación es proporcional a la magnitud de la misma, por lo que solo se necesita conocer el correspondiente factor de proporcionalidad para la descripción completa del sistema. La respuesta (lineal) de un sistema se puede obtener empleando la fórmula de Kubo, la cual se basa en la siguiente premisa: dada una perturbación externa H' a un sistema dado, uno se pregunta cuál es la consecuencia o cambio que ésta produce en una observable Ξ determinada a orden lineal en H' . En el presente capítulo se utilizará el formalismo de respuesta lineal para derivar (por completez) la fórmula de Kubo, que nos permitirá posteriormente calcular la conductividad de carga y de espín de un sistema sujeto a un campo eléctrico externo.

3.1 Fórmula General de Kubo

Considérese un sistema cuántico descrito por un Hamiltoniano cualquiera H_0 (independiente del tiempo) en equilibrio termodinámico, y eigenestados $|n\rangle$ tal que

$H_0 | n \rangle = E_n | n \rangle$. El valor esperado de una cantidad física descrita por un operador se puede calcular utilizando el formalismo de matriz de densidad. El valor promedio termodinámico de tal operador Ξ está definido por [100],

$$\langle \Xi \rangle = \frac{1}{Z_0} \text{Tr}[\rho_0 \Xi] = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | \Xi | n \rangle e^{-E_n/(k_B T)} \quad (3.1)$$

donde $\rho_0 = \sum_n | n \rangle \langle n | e^{-E_n/(k_B T)}$ es el operador de densidad, $Z_0 = \sum_n e^{-E_n/(k_B T)}$ es la función de partición canónica, k_B es la constante de Boltzmann y T es la temperatura. Considere que al tiempo $t = t_0$ inicia una perturbación, rompiendo el equilibrio del sistema. Para tal situación, el Hamiltoniano total adquiere la forma $H(t) = H_0 + H'(t)$ con $H'(t) = h'(t)\Theta(t - t_0)$, donde $h'(t)$ es la perturbación y $\Theta(t - t_0)$ la función escalón de Heaviside. Suponga que se desea calcular el valor esperado del operador Ξ para tiempos mayores a t_0 . Para ello, necesitamos conocer la evolución temporal de los eigenestados (*i.e.* $| n(t) \rangle$) y con ello calculamos $\langle \Xi(t) \rangle$ de manera similar a la ecuación (3.1), esto es,

$$\langle \Xi(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | \Xi | n(t) \rangle e^{-E_n/(k_B T)} = \frac{1}{Z_0} \text{Tr}[\rho(t) \Xi] \quad (3.2)$$

con $\rho(t) = \sum_n | n(t) \rangle \langle n(t) | e^{-E_n/(k_B T)}$. La dependencia temporal de los eigenestados está gobernada por la ecuación de Schrödinger, $H(t) | n(t) \rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | n(t) \rangle$. Debido a que $H'(t)$ es una pequeña perturbación, conviene utilizar el esquema de interacción ($\hat{\Xi}(t), | \hat{n}(t) \rangle$) para describir la evolución temporal de los eigenestados y de los operadores,

$$\text{Esquema de interacción} \Rightarrow \begin{cases} |\hat{n}(t)\rangle = e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle \\ \hat{\Xi}(t) = e^{iH_0t/\hbar} \Xi e^{-iH_0t/\hbar} \end{cases} \quad (3.3)$$

donde como se mencionó, el Hamiltoniano H_0 es independiente del tiempo. Nótese que en el esquema de interacción,

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle) \\ &= [H(t) - H_0] e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle \\ &= H'(t) |\hat{n}(t)\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

Sea $u(t, t_0)$ un operador de evolución temporal tal que $|\hat{n}(t)\rangle = u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle \equiv u(t, t_0) |n\rangle$. Sustituyendo en (3.4) se obtiene,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle] = H'(t) u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle \quad (3.5)$$

Como $|\hat{n}(t_0)\rangle$ no depende del tiempo, esto implica que $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u(t, t_0) = H'(t) u(t, t_0)$. Resolviendo esta ecuación diferencial para el operador de evolución temporal $u(t, t_0)$ obtenemos

$$\begin{aligned} u(t, t_0) &= \exp\left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'(\tau) d\tau\right] \\ &\approx 1 + \frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'(\tau) d\tau + O[2] \end{aligned} \quad (3.6)$$

donde el operador $u(t, t_0)$ se ha expandido en series de Taylor a orden lineal. Así pues, la evolución temporal de los eigenestados $|n(t)\rangle$ puede ser calculada utilizando

el operador de evolución temporal (a primer orden),

$$\begin{aligned} |n(t)\rangle &= e^{-iH_0t/\hbar} |\hat{n}(t)\rangle = e^{-iH_0t/\hbar} u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle \\ &\approx e^{-iH_0t/\hbar} \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'(\tau) d\tau \right] |\hat{n}(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (3.7)$$

Insertando este resultado en la ecuación (3.2) para calcular la respuesta del operador $\Xi(t)$ después de la perturbación $H'(t)$, y considerando que $\langle n(t) | \Xi | n(t) \rangle = \langle \hat{n}(t) | e^{iH_0t/\hbar} \Xi e^{-iH_0t/\hbar} | \hat{n}(t) \rangle = \langle \hat{n}(t) | \hat{\Xi}(t) | \hat{n}(t) \rangle = \langle \hat{n}(t_0) | u^\dagger(t, t_0) \hat{\Xi}(t) u(t, t_0) | \hat{n}(t_0) \rangle$, se obtiene

$$\begin{aligned} \langle \Xi(t) \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | \Xi | n(t) \rangle e^{-E_n/(k_B T)} \\ &\approx \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} \langle \hat{n}(t_0) | \left[1 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'(\tau) d\tau \right] \hat{\Xi}(t) \\ &\quad \times \left[1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H'(\tau) d\tau \right] | \hat{n}(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (3.8)$$

Realizando las operaciones algebraicas correspondientes y despreciando términos a orden cuadrático, no es difícil demostrar que la ecuación anterior se reduce a

$$\begin{aligned} \langle \Xi(t) \rangle &\approx \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} \langle \hat{n}(t_0) | \hat{\Xi}(t) | \hat{n}(t_0) \rangle \\ &\quad + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} \langle \hat{n}(t_0) | [H'(\tau), \hat{\Xi}(t)] | \hat{n}(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (3.9)$$

donde $[H'(\tau), \hat{\Xi}(t)]$ es el conmutador entre la perturbación $H'(\tau)$ y el operador Ξ escrito en el esquema de interacción. Definiendo el promedio térmico respecto a H_0 ,

$\langle \dots \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/(k_B T)} \langle \dots \rangle$, finalmente obtenemos

$$\langle \Xi(t) \rangle = \langle \hat{\Xi}(t) \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \langle [H'(\tau), \hat{\Xi}(t)] \rangle_0 \quad (3.10)$$

que es la fórmula general de Kubo. Note que la ecuación (3.10) ha sido escrita en términos de la función de correlación retardada de un sistema en equilibrio, y nos permite conocer la respuesta de un operador Ξ ante una perturbación $H'(t)$ en términos de los eigenvectores del sistema no perturbado.

3.2 Conductividad de carga

Considere ahora que el sistema cuántico descrito en la sección anterior es un conjunto de electrones, que al tiempo $t = t_0$ son perturbados por un campo electromagnético (fotónico) que produce una corriente eléctrica. Se desea calcular el valor esperado del operador de corriente de carga para tiempos mayores a t_0 , *i.e.* $\langle \mathbf{j}(t) \rangle$. El Hamiltoniano total del sistema después de la perturbación, es de la forma,

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{1}{2m^*} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 + V(\mathbf{r}) \\ &\approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{2m^*c} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}] \end{aligned} \quad (3.11)$$

donde $-e$ es la carga de un electrón de masa efectiva m^* , c es la velocidad de la luz, \mathbf{p} el operador de momento, $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ es el potencial vectorial, $V(\mathbf{r})$ es el potencial eléctrico externo y se han despreciado términos a orden cuadrático en el potencial vectorial. Se

buscará ahora reescribir la ecuación (3.11) de la forma $H(t) = H_0 + H'(t)$ de manera explícita. Para ello, suponga que el campo fotónico consiste en una onda plana con vector de onda \mathbf{q} y frecuencia ω , cuya componente en dirección ν ($\nu = x, y, z$) para el vector potencial de magnitud A_0 es $A_\nu(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$ y de manera similar para las componentes del campo eléctrico de magnitud E_0 . De las relaciones de Maxwell $\nabla \times \mathbf{E} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$ y $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ no es difícil demostrar que $A_0 = \frac{-ic}{\omega} E_0$. Sustituyendo en la ecuación (3.11) obtenemos para H_0 y $H'(t)$,

$$\begin{aligned} H(t) &= H_0 + H'(t) \\ H_0 &= \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}) \\ H'(t) &= \frac{ie}{2m^*\omega} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}] \Theta(t - t_0) \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde se ha asumido que la perturbación inicia al tiempo $t = t_0$ y $\Theta(t - t_0)$ es la función escalón de Heaviside. A continuación escribiremos H' en términos del operador de corriente de carga del sistema no perturbado, $\mathbf{j}(t < t_0)$. De manera general el operador de corriente de carga (para un electrón) se define como el producto del operador de velocidad \mathbf{v} y la magnitud fundamental de carga, $\mathbf{j} = e\mathbf{v}$. El operador de velocidad a $t < t_0$ se puede calcular mediante el anticonmutador del operador de posición con el Hamiltoniano no perturbado, $\mathbf{v} = i\hbar[\mathbf{r}, H_0] = \mathbf{p}/m^*$, resultando entonces $\mathbf{j}(t < t_0) = e\mathbf{p}/m^*$. Así pues, la perturbación se puede escribir como $H'(t) = -\frac{i}{2\omega} [\mathbf{j}(t < t_0) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{j}(t < t_0)] \Theta(t)$. Suponga que el campo eléctrico es espacialmente uniforme, de modo tal que se pueda asumir una respuesta lineal.

Entonces, de manera conveniente se puede tomar el límite $\mathbf{q} \rightarrow 0$ y se elimina la dependencia espacial del campo eléctrico.

La corriente inducida medida en los experimentos es el valor promedio de la velocidad a $t > t_0$, multiplicada por la densidad de carga. Al inicio de la perturbación ($t = t_0$), el operador de velocidad es $\mathbf{v}(t = t_0) = i\hbar[\mathbf{r}, H(t)] = [\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}_0]/m^*$. Para $t > t_0$, el valor esperado de la densidad de corriente de carga \mathbf{J} es

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}(t) \rangle &= \frac{e}{\Omega} \langle \mathbf{v}(t) \rangle \\ &= \frac{e}{m^* \Omega} \langle \mathbf{p}(\mathbf{t}) \rangle - \frac{e^2}{m^* c \Omega} \mathbf{A}(t) \\ &= \frac{1}{\Omega} \langle \mathbf{j}(t) \rangle + \frac{ine^2}{m^* \omega} \mathbf{E}(t) \end{aligned} \quad (3.13)$$

donde se ha promediado sobre el volumen del sistema Ω y $n = 1/\Omega$ es la densidad electrónica. Utilizaremos ahora la fórmula generalizada de Kubo (3.10) para calcular el valor esperado de la ν -ésima componente del operador de corriente de carga $\mathbf{j}(t)$; haciendo la analogía con la sección anterior, $\Xi(t) = j_\nu(t)$, $H'(\tau) = \frac{-i}{\omega} j_\nu(t < t_0) E_0 e^{-i\omega\tau}$ y utilizando la función de distribución de Fermi-Dirac $f(\varepsilon_n) = (1 + e^{(\varepsilon_n - E_F)/k_B T})^{-1}$, la ecuación (3.10) queda de la forma,

$$\begin{aligned} \langle j_\nu(t) \rangle &= \sum_n f(\varepsilon_n) \langle \hat{n}(t_0) | \hat{j}_\nu(t) | \hat{n}(t_0) \rangle + \sum_\mu \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t d\tau \sum_n f(\varepsilon_n) \times \\ &\quad \langle \hat{n}(t_0) | \left[\frac{-i}{\omega} j_\mu(t < t_0) E_0 e^{-i\omega\tau}, \hat{j}_\nu(t) \right] | \hat{n}(t_0) \rangle \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde $\nu, \mu = x, y, z$. Debido a que antes de la perturbación no hay corriente, el primer

término en el lado derecho de la ecuación anterior es cero. Sustituyendo (3.14) en la ecuación (3.13) tenemos para la ν -ésima componente de la densidad de corriente,

$$\langle J_\nu(t) \rangle = \frac{ine^2}{m^*\omega} E_\nu(t) + \frac{1}{\Omega\hbar\omega} \sum_\mu \int_{t_0}^t d\tau \sum_n f(\varepsilon_n) \langle \hat{n}(t_0) | \times \\ [j_\mu(t < t_0), \hat{j}_\nu(t)] | \hat{n}(t_0) \rangle e^{i\omega(t-\tau)} E_\mu(t) \quad (3.15)$$

De la definición de conductividad de carga (σ^C), $J_\nu = \sum_\mu \sigma_{\nu,\mu}^C E_\mu$, llegamos al tensor de la conductividad de carga eléctrica,

$$\sigma_{\nu,\mu}^C = \frac{ine^2}{m^*\omega} \delta_{\nu,\mu} + \frac{1}{\Omega\hbar\omega} \int_{t_0}^t d\tau e^{i\omega(t-\tau)} \sum_n f(\varepsilon_n) \langle \hat{n}(t_0) | [j_\mu(t < t_0), \hat{j}_\nu(t)] | \hat{n}(t_0) \rangle. \quad (3.16)$$

Se asumirá que el campo eléctrico se aplica de forma adiabática, esto es $t_0 \rightarrow -\infty$ y sumamos el término $i\eta$ a la frecuencia ω , *i.e.* $\omega \Rightarrow \omega + i\eta$. El parámetro η nos permite regularizar la integral en τ , y se puede visualizar fenomenológicamente como la medida de los efectos de disipación del momento del electrón debido a impurezas u otras interacciones de muchos cuerpos [58]. Haciendo el cambio de variable $t - \tau \Rightarrow t$ obtenemos finalmente la expresión de Kubo para el cálculo de la conductividad de carga,

$$\sigma_{\nu,\mu}^C(\omega) = \delta_{\nu,\mu} \frac{ine^2}{m^*\tilde{\omega}} + \frac{1}{\Omega\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \sum_n f(\varepsilon_n) \langle n | [\hat{j}_\nu(t), j_\mu(0)] | n \rangle \quad (3.17)$$

donde $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$. El primer término en la ecuación anterior es la conocida conductividad de Drude, mientras que el segundo término es la contribución cuántica (a orden lineal) a la conductividad de carga. Esta representación de la fórmula de Kubo es muy útil para nuestros propósitos pues nos permite calcular la conductividad de carga como función de la frecuencia del campo eléctrico a.c. aplicado en términos de los eigenestados del sistema no perturbado.

3.3 Conductividad de carga: interacción Rashba-Dresselhaus

Un ejemplo ilustrativo de la aplicación de la fórmula (3.17) es el sistema bidimensional de electrones en presencia simultánea de acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus, y sujeto a un campo eléctrico a.c. Utilizaremos el formalismo de Kubo en respuesta lineal para calcular la conductividad longitudinal de carga a temperatura cero, como función de la frecuencia de excitación [72]. Por simplicidad se asumirá que el transporte longitudinal se realiza a lo largo del eje y . Para tal situación, el Hamiltoniano H_0 antes de la perturbación está dado por la ecuación (2.14), y sus correspondientes eigenestados y eigenvectores por las ecuaciones (2.15) y (2.16) respectivamente. Como ya se mencionó en la sección anterior, el operador de corriente de carga, es el producto de la densidad electrónica y el operador de velocidad, cuya componente en dirección y es $v_y(0) = \frac{1}{i\hbar}[y, H_0] = \frac{p_y}{m^*} - \left(\frac{\alpha\sigma_x + \beta\sigma_y}{\hbar}\right)$. Por tanto, la conductividad longitudinal de carga $\sigma_{yy}^C(\omega)$ en este sistema estará dada por $\sigma_{yy}^C(\omega) = \sigma_D(\omega) + \sigma_{yy}^{ch}$,

donde $\sigma_D(\omega) = \frac{ine^2}{m^*\omega}$ es la conductividad de Drude y σ_{yy}^{ch} es la contribución debido a transiciones interbanda de espín,

$$\sigma_{yy}^{ch}(\omega) = \frac{1}{A\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \sum_{\mathbf{k},\mu} f(\varepsilon_\mu)_{T=0} \langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\hat{j}_y(t), j_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle \quad (3.18)$$

donde A es el área del sistema. El operador $\hat{j}_y(t)$ está escrito en el esquema de interacción, es decir, $\hat{j}_y(t) = e^{iH_0t/\hbar} j_y(0) e^{-iH_0t/\hbar}$. Puede demostrarse que el valor esperado de la función de correlación de corriente de carga en la ecuación (3.18) $\langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\hat{j}_y(t), j_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle = \mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t)$ toma la forma (ver Apéndice A),

$$\mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t) = -\frac{ie^2\mu}{\Delta^2\hbar^2} (\alpha^2 - \beta^2)^2 \text{sen}\left(\frac{2\Delta kt}{\hbar}\right) \cos^2\theta \quad (3.19)$$

donde θ y Δ se definieron en la sección (2.5) y el subíndice (e) de las constantes α y β se ha omitido en $\mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t)$ por simplicidad. Insertando este resultado en la ecuación (3.18), integrando sobre t y utilizando la identidad $\sum_{\mathbf{k},\mu} \mu f(\varepsilon_\mu)_{T=0} = -\sum_{\mathbf{k}} \Theta[(k - k_F^+)(k_F^- - k)]$, obtenemos

$$\sigma_{yy}^{ch}(\omega) = \frac{ie^2(\alpha^2 - \beta^2)^2}{2\pi^2\hbar^2\tilde{\omega}} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\cos^2\theta}{\Delta} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{\hbar^2\tilde{\omega}^2 - 4\Delta^2k^2} \quad (3.20)$$

donde la sumatoria en \mathbf{k} se ha sustituido por una integral (*i.e.* $\sum_{\mathbf{k}} \Rightarrow \frac{A}{4\pi^2} \int k dk d\theta$) y $k_F^\pm(\theta)$ se definió en la ecuación (2.17). La integral sobre k en la expresión (3.20) puede obtenerse de manera exacta analíticamente, sin embargo su expresión resulta muy larga y complicada, por lo que no será proporcionada aquí. Por otro lado, las subsecuentes integrales en θ no pueden ser resueltas analíticamente por lo que

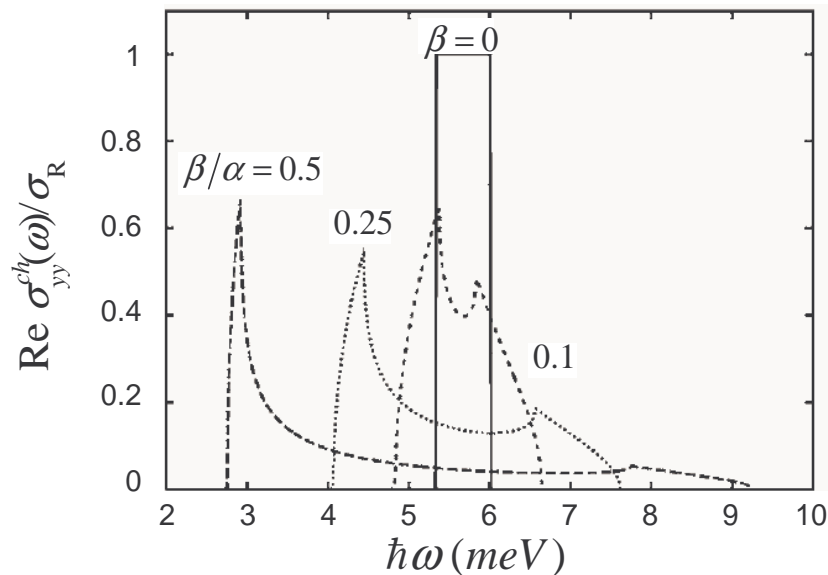


Figura 3.1: Conductividad de carga $\text{Re } \sigma_{yy}^{ch}(\omega)$ para diferentes valores de la razón β/α . Tomado de Ref. [72]

necesariamente debe implementarse una integración numérica para obtener $\sigma_{yy}^{ch}(\omega)$.

La Figura 3.1 muestra el espectro óptico de la conductividad de carga (3.20). Se aprecia una notable diferencia entre el caso isotrópico $\beta = 0$, $\alpha \neq 0$, para el cual la conductividad es igual a una constante $\sigma_R = e^2/16\hbar$, con el caso anisotrópico ($\beta \neq 0$) en el que el espectro se vuelve más ancho y asimétrico. Note que para el caso $\alpha \neq \beta \neq 0$ aparecen nuevas propiedades espectrales respecto al caso del sistema con interacción de Rashba (Dresselhaus) solamente. Observe que una consecuencia crucial de la existencia simultánea de las interacciones espín-órbita de Rashba más Dresselhaus es que la magnitud de la conductividad de carga $\sigma_R = e^2/16\hbar$ puede ser modulada mediante la frecuencia del campo eléctrico y la relación β/α , confirmando la importancia del régimen de frecuencia finita anteriormente mencionada. En los capítulos 5 y 6 se mostrará que en el espectro de conductividad de espín también

aparecen ciertas características espectrales análogas a las de la figura 3.1, derivadas de la anisotropía en el Hamiltoniano de acoplamiento espín-órbita.

Capítulo 4

Operador de corriente de espín conservado

En el presente capítulo se derivará la ecuación de continuidad de densidad de espín y se verificará que el operador convencional de corriente de espín no se conserva en sistemas con acoplamiento espín-órbita. Posteriormente se obtendrá el operador conservado de corriente de espín propuesto por Shi *et al.* [80].

4.1 Ecuación de continuidad de espín

Suponga una partícula en presencia de un potencial V dependiente de la posición \mathbf{r} , del tiempo t , y del espín $\boldsymbol{\sigma}$. El Hamiltoniano para dicha partícula de masa m está dado por $H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\sigma})$ y la respectiva ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo por,

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\sigma}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.1)$$

donde p es el operador de momento y $\psi(\mathbf{r}, t)$ es un espinor de dos componentes. Al multiplicar esta ecuación por $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t) s_z$ por izquierda (con $s_z = \frac{\hbar}{2} \sigma_z$) se obtiene

$$i\hbar \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) s_z \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) s_z \frac{p^2}{2m} \psi(\mathbf{r}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{r}, t) s_z V(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\sigma}) \psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.2)$$

Posteriormente, al calcular el adjunto de la ecuación anterior y restando ambas, obtenemos

$$i\hbar \frac{\partial[\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)s_z\psi(\mathbf{r}, t)]}{\partial t} = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)s_z H\psi(\mathbf{r}, t) - \frac{p^2\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t) - \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)V(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\sigma})s_z\psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.3)$$

Sumando y restando $\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\frac{p^2}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t)$ en el lado derecho de la ecuación anterior y definiendo la densidad de espín $S_z(\mathbf{r}, t) = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)s_z\psi(\mathbf{r}, t)$ se obtiene,

$$i\hbar \frac{\partial S_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)[s_z, H]\psi(\mathbf{r}, t) - \frac{p^2\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t) + \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\frac{p^2}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.4)$$

Utilizando la definición de torca de espín $\tau_z = \frac{ds_z}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[s_z, H]$, y el hecho de que

$$\begin{aligned} (p^2\psi^\dagger)s_z\psi &= \mathbf{p} \cdot [(\mathbf{p}\psi^\dagger)s_z\psi] - \mathbf{p}\psi^\dagger \cdot \mathbf{p}(s_z\psi) \\ \psi^\dagger p^2(s_z\psi) &= \mathbf{p} \cdot [\psi^\dagger(\mathbf{p}s_z\psi)] - \mathbf{p}\psi^\dagger \cdot \mathbf{p}(s_z\psi) \end{aligned} \quad (4.5)$$

no es difícil ver que la ecuación (4.4) se transforma en

$$\frac{\partial S_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \left[\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\frac{\mathbf{p}}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t) + \left(\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\frac{\mathbf{p}}{2m}s_z\psi(\mathbf{r}, t) \right)^\dagger \right] = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\tau_z\psi(\mathbf{r}, t) \quad (4.6)$$

La ecuación (4.6) puede escribirse en forma compacta al emplear el operador convencional de corriente de espín, $\mathbf{J}^{(S)} = Re[\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\mathbf{v}s_z\psi(\mathbf{r}, t)]$, con $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, \mathbf{r}] = \frac{\mathbf{p}}{m}$, y definiendo la densidad de torca $\mathcal{T}_z = \psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\tau_z\psi(\mathbf{r}, t)$, lo que conduce

a la ecuación de continuidad para la corriente de espín [78],

$$\frac{\partial S_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{J}^{(S)} = \mathcal{T}_z \quad (4.7)$$

La presencia de la densidad de torca \mathcal{T}_z en (4.7) refleja el hecho de que el espín no se conserva microscópicamente en sistemas con acoplamiento espín-órbita ya que éste último fenómeno induce una precesión y eventualmente una rotación en el espín.

4.2 Operador conservado de corriente de espín

Sin embargo, la densidad de torca promedio de espín es cero en el bulto, (*i.e.* $\frac{1}{V} \int dV \mathcal{T}_z(\mathbf{r}) = 0$). Por ello, siguiendo a Shi *et al.* es posible reescribir la densidad de torca como la divergencia de la densidad de torca dipolar, esto es $\mathcal{T}_z(\mathbf{r}) = -\nabla \cdot \mathbf{P}^{(\tau)}(\mathbf{r})$. Sustituyendo en la ecuación (4.7) se obtiene,

$$\frac{\partial S_z(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{J}^{(S)} + \mathbf{P}^{(\tau)}) = 0 \quad (4.8)$$

la cual es la forma de una ecuación de continuidad estándar sin fuentes. Esto muestra que el espín se conserva en promedio en sistemas con acoplamiento espín-órbita y podemos definir la correspondiente corriente de espín como $\mathcal{J}^s = \mathbf{J}^{(S)} + \mathbf{P}^{(\tau)}$. Al imponer la restricción de que la densidad de torca dipolar debe ser cero fuera de la muestra, se obtiene que $\int dV \mathbf{P}^{(\tau)} = -\int dV \mathbf{r} \nabla \cdot \mathbf{P}^{(\tau)} = \int dV \mathbf{r} \mathcal{T}_z(\mathbf{r})$, lo cual implica $\mathbf{P}^{(\tau)} = \mathbf{r} \frac{ds_z}{dt}$. Finalmente, ya que $\mathbf{J}^{(S)} = s_z \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ (*i.e.* $\mathcal{J}^s = \mathbf{r} \frac{ds_z}{dt} + s_z \frac{d\mathbf{r}}{dt}$), el operador conservado de corriente de espín se puede escribir como la derivada temporal del

desplazamiento de espín $\mathbf{r}s_z$, esto es,

$$\mathcal{J}^s = \frac{d(\mathbf{r}s_z)}{dt} \quad (4.9)$$

Ésta es la propuesta de Shi *et al.* [80] para el operador de corriente de espín. El operador (4.9), además de satisfacer la ecuación de continuidad en sistemas con acoplamiento espín-órbita, permite establecer las relaciones de Onsager y, a diferencia del operador convencional, posee la propiedad de que su valor esperado es cero en sistemas aislantes. En los capítulos 5 y 6 se utilizará esta propuesta del operador de corriente de espín, para calcular la conductividad Hall de espín.

Capítulo 5

Efecto Hall de espín para electrones

En la mayoría de los estudios acerca de corrientes de espín generadas mediante un campo eléctrico, *i.e.* el Efecto Hall de Espín (SHE), la corriente de espín J^s y su conductividad asociada σ^{SHE} se han definido como $J^s = \langle \{v_x, s_z\}/2 \rangle \equiv \sigma^{SHE} E_y$, donde v_x y s_z son los operadores de velocidad y de espín respectivamente y E_y es el campo eléctrico longitudinal [55]. Como se comentó en la Introducción del presente trabajo, ésta es una elección natural para el operador de corriente de espín; sin embargo, tal definición de dicho operador no satisface la correspondiente ecuación de continuidad en sistemas con acoplamiento espín-órbita, condición indispensable para el adecuado estudio de transporte de espín en sistemas con presencia de éste tipo de interacciones. Por tal motivo, en el presente capítulo se utilizará la propuesta de definición del operador conservado de corriente de espín reportada por Shi *et al.* [80] para estudiar la conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia como respuesta a un campo eléctrico a.c., de un gas bidimensional de electrones (GE2D) sujetos a acoplamiento espín-órbita Rashba y Dresselhaus. Se mostrará que el espectro óptico de la conductividad Hall de espín se modifica notablemente cuando se aplica la definición conservada del operador de corriente de espín y se contrastará con el resultado propio de la definición convencional. Tal cambio obedece principalmente

a una contribución significativa del término de torca de espín, el cual se encuentra ausente en la forma convencional del operador de corriente de espín. También se observa que la magnitud y la dirección de la corriente Hall dinámica de espín depende fuertemente de la frecuencia, además del valor relativo de las intensidades de las constantes de acoplamiento espín-órbita.

5.1 Fórmula de Kubo para la conductividad Hall de espín

Al igual que en la sección 3.3, considérese nuevamente un sistema bidimensional de electrones en presencia de acoplamiento espín-órbita de ambos tipos, Rashba y Dresselhaus. El Hamiltoniano H_0 de este sistema está dado por la ecuación (2.14), y sus correspondientes eigenestados y eigenvectores por las ecuaciones (2.15) y (2.16) respectivamente (el subíndice “ e ” será omitido por simplicidad). Suponga que al tiempo $t_0 = 0$ inicia una perturbación que consiste en un campo eléctrico a.c. Utilizaremos el formalismo de Kubo para calcular la conductividad Hall de espín como función de la frecuencia del campo eléctrico aplicado. De manera similar a la sección anterior, el transporte longitudinal se realiza a lo largo del eje y y el transporte Hall se orienta en la dirección x . La polarización de espín se ubicará en la dirección z . Dentro del formalismo de respuesta lineal, la conductividad Hall de espín $\sigma_{xy}^{S,z}(\omega)$ se puede calcular con la fórmula de Kubo (3.17),

$$\sigma_{xy}^{S,z}(\omega) = \frac{e}{\hbar A(\omega + i\eta)} \int_0^\infty e^{i(\omega+i\eta)t} \sum_{\mathbf{k},\mu} f(\varepsilon_\mu)_{T=0} \langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle dt, \quad (5.1)$$

donde se ha asumido temperatura cero y se ha despreciado la interacción entre portadores de carga. El parámetro $\eta > 0$ es un artificio matemático mediante el cual se evita una divergencia en la integral en t , pero como se mencionó en el capítulo anterior, está conectada fenomenológicamente con la medida de los efectos de disipación del momento de los electrones, debido a interacción con impurezas, con un tiempo de relajación $\tau = \eta^{-1}$.

En la fórmula de Kubo (5.1), $v_y(0) = \frac{p_y}{m^*} - \left(\frac{\alpha\sigma_x + \beta\sigma_y}{\hbar} \right)$ corresponde al operador de velocidad de los electrones para el GE2D en presencia de interacción conjunta Rashba y Dresselhaus. A su vez, $\mathcal{J}_x^{S,z}(t)$ es el operador conservado de corriente de espín reportado por Shi *et al.*[80] escrito en el esquema de interacción. En la Introducción del presente trabajo de tesis se mencionó que ésta definición de dicho operador se puede escribir como la derivada temporal del desplazamiento de espín, $\hat{\mathcal{J}}_s = \frac{\hbar}{2} \frac{d(\hat{r}\sigma_z)}{dt}$. Al realizar la derivada temporal, aparecen dos términos. Uno de ellos es el operador convencional de corriente de espín, dado por el producto del operador de espín y el operador de velocidad. El otro, es la contribución a la corriente de espín debido a la variación del espín con el tiempo, dado por el producto del operador de posición con el operador de torca de espín. Con el objetivo de obtener la forma explícita del operador $\mathcal{J}_x^{S,z}(t)$, se utilizará la ecuación de movimiento de Heisenberg

para obtener la derivada temporal del operador de desplazamiento de espín $x\sigma_z$ en dirección x . Para el Hamiltoniano H_0 del sistema descrito anteriormente, se obtiene explícitamente

$$\mathcal{J}_x^{S,z}(0) = \frac{\hbar}{2m^*}\sigma_z p_x + \left\{ x, \frac{\beta}{2\hbar}(\sigma_x p_y + \sigma_y p_x) - \frac{\alpha}{2\hbar}(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) \right\} \quad (5.2)$$

donde el símbolo $\{, \}$ denota el anticonmutador. El primer término en (5.2) representa la contribución del operador convencional del operador de corriente de espín, mientras que el segundo término surge de la contribución de la torca de espín. Se puede demostrar que el valor esperado de la función de correlación “corriente de espín-corriente de carga” en (5.1) $\langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle \equiv \mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t)$ toma la forma (Ver Apéndice A)

$$\mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t) = i\mu \frac{\hbar k_x^2 (\beta^2 - \alpha^2)}{m^* k \Delta(\theta)} \left[\cos\left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}t\right) - \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}t \sin\left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}t\right) \right] \quad (5.3)$$

Insertando este resultado en (5.1) y siguiendo un procedimiento similar al de la sección 3.3, es posible descomponer la conductividad de espín en la suma de dos contribuciones dadas por

$$\sigma_{xy}^{S,z}(\omega) = \sigma_c^{sH}(\omega) + \sigma_\tau^{sH}(\omega) \quad (5.4)$$

para las cuales, la primera de ellas proviene de la contribución del operador convencional de corriente de espín y está dada por

$$\sigma_c^{sH}(\omega) = \frac{e(\beta^2 - \alpha^2)}{4\pi^2 m^*} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\cos^2 \theta}{\Delta(\theta)} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - (2k\Delta(\theta)/\hbar)^2} \quad (5.5)$$

mientras el segundo término resulta de la contribución a la torca de espín y está dado por

$$\sigma_{\tau}^{sH}(\omega) = \frac{8e(\beta^2 - \alpha^2)}{4\pi^2 m^* \hbar^2} \int_0^{2\pi} d\theta \cos^2 \theta \Delta(\theta) \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^4}{[(\omega + i\eta)^2 - (2k\Delta(\theta)/\hbar)^2]^2}. \quad (5.6)$$

En este punto es importante remarcar el hecho de que en el límite $\omega/\tau \rightarrow \infty$ la dispersión por impurezas no juega un papel significativo en el transporte de espín [55]. De hecho, en términos de la técnica diagramática (teoría de muchos cuerpos) se sabe que las correcciones de vértice resultantes son despreciables a frecuencia finita, si la dispersión debido a impurezas es débil [55]. Esto ocurre debido a que en el régimen de respuesta lineal, la expansión perturbativa en potencias de n_i (densidad de impurezas) de la función de correlación corriente de espín-corriente de carga es de la forma $1/(\omega\tau)^n$, por lo que a altas frecuencias la contribución de las correcciones de vértice son despreciables [55, 71]. Por lo tanto, el cálculo mediante la fórmula de Kubo de respuesta lineal, sin incluir explícitamente las correcciones de vértice, produce una concordancia cualitativamente aceptable con la técnica diagramática a frecuencias suficientemente altas y a bajas densidades de impurezas [71, 101].

Dicho lo anterior nótese que las integrales en k en las expresiones (5.5) y (5.6) pueden resolverse analíticamente. La parte convencional conduce a

$$\frac{\sigma_c^{sH}(\omega)}{e/8\pi} = \frac{1}{\pi} \frac{\alpha^2 - \beta^2}{\alpha^2 + \beta^2} \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2(\theta)}{\lambda(\theta)} \left\{ 1 + \frac{\hbar\tilde{\omega}}{8\varepsilon_{so}\lambda(\theta)} \tanh^{-1} \left[\frac{8\varepsilon_{so}\lambda(\theta)\hbar\tilde{\omega}}{16\varepsilon_F\varepsilon_{so}\lambda(\theta) - \hbar^2\tilde{\omega}^2} \right] \right\} d\theta \quad (5.7)$$

con $\lambda(\theta) = 1 - \frac{2\alpha\beta}{\alpha^2 + \beta^2} \sin(2\theta)$, $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$, $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$ es la energía de Fermi y $\varepsilon_{SO} = \frac{m^*(\alpha^2 + \beta^2)}{2\hbar^2}$ es la energía de espín-órbita (véase la sección 2.5.1). Por otro lado la contribución de la torca está dada por

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_\tau^{sH}(\omega)}{e/8\pi} = & -\frac{1}{\pi} \frac{\alpha^2 - \beta^2}{\alpha^2 + \beta^2} \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2(\theta)}{\lambda(\theta)} \left\{ 2 + \frac{3\hbar\tilde{\omega}}{8\varepsilon_{so}\lambda(\theta)} \tanh^{-1} \left[\frac{8\varepsilon_{so}\lambda(\theta)\hbar\tilde{\omega}}{16\varepsilon_F\varepsilon_{so}\lambda(\theta) - \hbar^2\tilde{\omega}^2} \right] \right. \\ & \left. + \frac{[16\varepsilon_F\varepsilon_{so}\lambda(\theta) + \hbar^2\tilde{\omega}^2]\hbar^2\tilde{\omega}^2}{[16\varepsilon_F\varepsilon_{so}\lambda(\theta) - \hbar^2\tilde{\omega}^2]^2 - 64\varepsilon_{so}^2\lambda^2(\theta)\hbar^2\tilde{\omega}^2} \right\} d\theta \end{aligned} \quad (5.8)$$

Nótese que si $\beta = 0$ (o $\alpha = 0$), *i.e.* si $\lambda(\theta) = 1$, la dependencia angular del integrando en las expresiones (5.7) y (5.8) se reduce significativamente conduciendo a formas analíticas cerradas para $\sigma_c^{sH}(\omega)$ y $\sigma_\tau^{sH}(\omega)$.

Para el caso $\alpha \neq \beta$ las integrales en θ no se pueden calcular analíticamente, por lo que debe utilizarse un método de integración numérica. Por tal motivo, resulta conveniente considerar en primera instancia el caso límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$, el cual es válido para GE2Ds basadas en heteroestructuras semiconductoras III-V (*e.g.* $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \approx 0.01$ para *InAs*), y para el cual se puede derivar una expresión analítica para la conductividad de espín dependiente de la frecuencia.

5.2 Expresiones analíticas en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$

De las ecuaciones (5.5) y (5.6) se obtiene a primer orden en $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F$,

$$\sigma_{xy}^{S,z}(\omega) \simeq \sigma_{c,o}^{sH}(\omega) + \sigma_{\tau,o}^{sH}(\omega), \quad (5.9)$$

donde la parte convencional está dada por

$$\frac{\sigma_{c,o}^{sH}(\omega)}{e/8\pi} = -\frac{16(\beta^2 - \alpha^2)}{(\beta^2 + \alpha^2)} \frac{\varepsilon_F \varepsilon_{so}}{\prod_{\mu} [\xi_{\mu}^2 - \hbar^2 \tilde{\omega}^2]^{1/2}}, \quad (5.10)$$

siendo \prod_{μ} la productoria sobre los estados de espín. La parte de la torca de espín resulta ser

$$\frac{\sigma_{\tau,o}^{sH}(\omega)}{e/8\pi} = \frac{32(\beta^2 - \alpha^2)}{(\beta^2 + \alpha^2)} \left[\frac{\varepsilon_F \varepsilon_{so}}{\prod_{\mu} [\xi_{\mu}^2 - \hbar^2 \tilde{\omega}^2]^{1/2}} + \frac{\varepsilon_F \varepsilon_{so} \hbar^2 \tilde{\omega}^2 [16\varepsilon_F \varepsilon_{so} - \hbar^2 \tilde{\omega}^2]}{\prod_{\mu} [\xi_{\mu}^2 - \hbar^2 \tilde{\omega}^2]^{3/2}} \right], \quad (5.11)$$

con $\xi_{\mu} = 2k_F |\alpha + \mu\beta|$. Nuestro resultado en la ecuación (5.10) concuerda exactamente con la ecuación (39) del trabajo de Erlingsson *et al.*[102] obtenido vía el cálculo de la susceptibilidad de espín [103]. Nótese también que el segundo término de la ecuación (5.11) se reduce a cero para $\tilde{\omega} = 0$, mientras que el primer término, cuando se suma a (5.10), cambia el signo del valor estático de la conductividad Hall de espín total (5.9), esto es,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{sz}(\omega = 0) &= \sigma_{c,o}^{sH}(\omega = 0) + \sigma_{\tau,o}^{sH}(\omega = 0) \\ &= \sigma_{c,o}^{sH}(\omega = 0) - 2\sigma_{c,o}^{sH}(\omega = 0) \\ &= -\sigma_{c,o}^{sH}(\omega = 0) \end{aligned} \quad (5.12)$$

Por otro lado, como se verá posteriormente, la contribución de torca dipolar del operador de corriente de espín de Shi *et al.*[80] generalmente domina sobre la contribución del operador convencional de corriente de espín.

5.3 El límite estático

Por razones que quedarán evidenciadas más adelante, resulta ilustrativo analizar el comportamiento de la conductividad Hall de espín en el límite estático ($\omega \rightarrow 0$) utilizando la definición del operador conservado de corriente de espín para un sistema libre de impurezas. De las ecuaciones (5.10) y (5.11), el valor estático en presencia sólo de acoplamiento Rashba ($\beta = 0$) puede escribirse, sorprendentemente, en términos de tiempos característicos de relajación como

$$\frac{\sigma_{xy}^{S,z}(0)}{e/8\pi} = \frac{\eta/\eta_{so} - 1}{(\eta/\eta_{so} + 1)^2} \quad (5.13)$$

donde $\eta_{so} = \tau_{so}^{-1}$, siendo τ_{so} el tiempo de relajación espín-órbita de D'yakonov y Perel' [104] con $\tau_{so}^{-1} = \frac{(2\alpha k_F/\hbar)^2}{\tau^{-1}}$ y como ya se mencionó, τ es el tiempo medio entre colisiones con impurezas. Debido a que η es típicamente menor que η_{so} (*i.e.* $2\alpha k_F > \hbar\eta$), el valor estático de $\sigma_{xy}^{S,z}$ es siempre negativo. La importancia de la expresión (5.13) radica en el hecho de que permite caracterizar el grado de impurezas en un material, a través de la medición experimental de la conductividad Hall de espín a frecuencia cero.

Por su parte, es importante mencionar que el límite $\omega \rightarrow 0$ (d.c.) dentro del formalismo de Kubo (empleando el operador convencional de corriente de espín) conduce a resultados físicamente incorrectos para $\varepsilon_{so} \gg \hbar\eta$ como producto de despreciar la contribución de las correcciones de vértice [58]. Este no es el caso a frecuencias finitas y a bajas densidades de impurezas (como ya se discutió anteriormente), el cual de hecho es el régimen de interés en el presente trabajo. En el límite opuesto,

$\varepsilon_{so} \ll \hbar\eta$, la fórmula de Kubo produce resultados que concuerden cualitativamente con la conclusión física esperada [58]. Se examinará este último caso.

Tomando el límite $\omega \rightarrow 0$, considerando una dispersión con impurezas finita pero débil, con una tasa de tiempo de relajación $\tau^{-1} = \eta$ y expandiendo la ecuación (5.10) y (5.11) en potencias de $\varepsilon_{so}/\hbar\eta \ll 1$ a orden más bajo se obtiene

$$\frac{\sigma_{c,o}^{sH}(0)}{e/8\pi} \simeq \frac{\alpha^2 - \beta^2}{\alpha^2 + \beta^2} \left(\frac{16\varepsilon_F\varepsilon_{so}}{\hbar^2\eta^2} \right) \quad (5.14)$$

siendo $\sigma_{\tau,o}^{sH}(0) = 0$ a primer orden. Si la dispersión por impurezas es débil comparada con el acoplamiento espín-órbita, $\varepsilon_{so}/\hbar\eta \gg 1$, se obtiene a primer orden,

$$\frac{\sigma_{c,o}^{sH}(0)}{e/8\pi} \simeq \left[1 - \frac{\hbar^2\eta^2}{16\varepsilon_F\varepsilon_{so}} \frac{(\alpha^2 + \beta^2)^2}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} \right] \text{sign}(\alpha^2 - \beta^2) \quad (5.15)$$

y la contribución de la torca de espín es

$$\frac{\sigma_{\tau,o}^{sH}(0)}{e/8\pi} \simeq \left[-2 + \frac{\hbar^2\eta^2}{4\varepsilon_F\varepsilon_{so}} \frac{(\alpha^2 + \beta^2)^2}{(\alpha^2 - \beta^2)^2} \right] \text{sign}(\alpha^2 - \beta^2) \quad (5.16)$$

Las dos expresiones para $\sigma_{c,o}^{sH}(0)$ antes escritas, en cada caso, se reducen a las fórmulas para $\beta = 0$ reportadas por Schliemann y Loss [58].

5.4 Discusión de resultados

5.4.1 Caso Rashba

Por simplicidad se estudiará en primera instancia el caso donde sólo se encuentra presente el acoplamiento Rashba ($\beta = 0$); la física resultante en esta sección es idéntica

al considerar el caso opuesto, en el que sólo se presenta la interacción tipo Dresselhaus (*i.e.* $\alpha = 0$). En la Figura 5.1 se muestra la parte real de la conductividad Hall de espín contra la frecuencia del campo eléctrico aplicado, utilizando las ecuaciones (5.7) y (5.8) ($\lambda(\theta) = 1$). El parámetro de Rashba se ha fijado a $\alpha = 1.6 \times 10^{-9} \text{ eVcm}$, el cual es un valor experimental típico para GE2D confinado en un pozo cuántico basado en *InAs*. Utilizando una masa efectiva electrónica de $m^* = 0.055 m_o$, estos valores producen una energía característica de Rashba (definida en la sección 2.5.1) de $\varepsilon_{so} = 0.092 \text{ meV}$ con un desdoblamiento de los estados de espín al número de onda de Fermi (*i.e.* $k = k_F$) de $\Delta_R = 2\alpha k_F \simeq 5.6 \text{ meV}$. El correspondiente número de onda de Fermi se estimó mediante la expresión $k_F = \sqrt{2\pi n}$ considerando una densidad electrónica moderada de $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. El parámetro que describe la tasa de relajación de momento se ha escogido tal que $\hbar\eta = 0.4 \text{ meV}$, valor que corresponde a una muestra de alta calidad con movilidad $\mu = e\tau/m^* \simeq 5 \text{ m}^2/\text{Vs}$ con tiempos de relajación de $\tau \simeq 1.6 \text{ ps}$. Como referencia, se ha graficado el resultado obtenido empleando sólo la definición convencional de corriente de espín (curva punteada de color verde en la Figura 5.1) dado por la ecuación (5.5).

La conductividad Hall de espín $\sigma_c^{sH}(\omega)$ muestra resonancias a energías dadas por $\hbar\omega_+ \simeq 2\alpha k_F^+$ y $\hbar\omega_- \simeq 2\alpha k_F^-$, las cuales corresponden respectivamente a la energía fotónica mínima y máxima requeridas para inducir transiciones ópticas entre la ramas desdobladas $\mu = -1$ (inicial) y $\mu = +1$ (final) (Véase la figura 5.2). A bajas

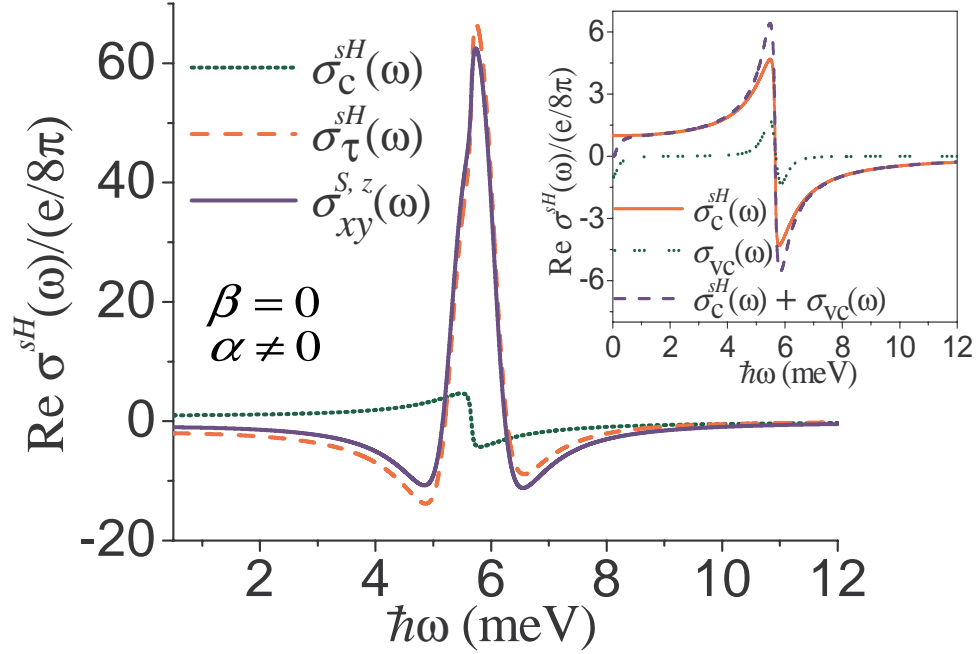


Figura 5.1: Parte real de la conductividad Hall de espín como función de la energía fotónica para un GE2D en presencia de la interacción espín-órbita Rashba ($\beta = 0$). La curva punteada (verde) se obtiene utilizando la definición convencional del operador de corriente de espín. La curva discontinua (roja) y la curva sólida (azul) son la contribución de la torca y la conductividad total de espín respectivamente, empleando el operador de corriente de espín conservado. Como inserción se muestra el resultado obtenido considerando las correcciones de vértice $\sigma_{VC}(\omega)$ y se comparan con los cálculos del presente trabajo.

frecuencias se aproxima al valor universal $e/8\pi$, y se vuelve cero a altas frecuencias. No es difícil demostrar que, debido al valor finito del parámetro de amortiguamiento η , el espectro posee una forma suavizada a lo largo de las frecuencias (desplazadas respecto a ω_\pm) $\omega'_\pm = \sqrt{\omega_\pm^2 + \eta^2}$. Por otro lado (para $\varepsilon_{so} \ll \varepsilon_F$), encontramos que la solución aproximada de $\sigma_{c,o}^{sH}(\omega)$ en la ecuación (5.10) arroja esencialmente los mismo valores numéricos con frecuencias de resonancia ligeramente corridas $\omega'_\pm \simeq \sqrt{\omega_o^2 \pm 2\eta^2 \sqrt{(\Delta_R/\hbar\eta)^2 + 1}}$, donde $\eta > 0$ y $\omega_o = \eta \sqrt{(\Delta_R/\hbar\eta)^2 + 1}$ es la frecuencia intermedia en la que la parte convencional se vuelve cero.

En contraste, en la inserción de la Figura 5.1 se exhibe el comportamiento de

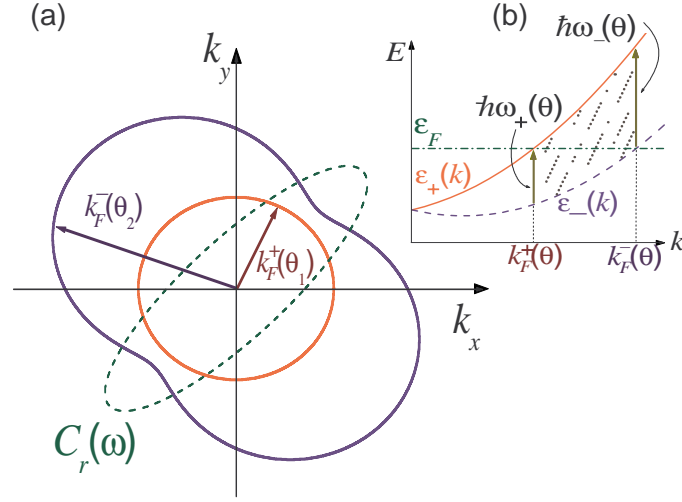


Figura 5.2: (a) Diagrama esquemático de la anisotropía angular del desdoblamiento de espín de la banda de conducción al nivel de Fermi en un GE2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus. La curva punteada $C_r(\omega)$ es una elipse rotada que resulta de la condición $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$, véase el texto para los detalles. (b) Diagrama de las transiciones ópticas permitidas (region sombreada) entre las ramas inicial ε_- y final ε_+ a un determinado ángulo polar θ .

la parte convencional de la conductividad Hall de espín (ecn.(5.5)) y se graficó la expresión

$$\sigma_{VC}(\omega) = \frac{e}{8\pi} \frac{x^2}{x^2 + a^2} \frac{x^2/2}{(1 - 2i\omega\tau) \frac{x^2}{2} - i\omega\tau a^2} \quad (5.17)$$

con $x = 2\alpha k_F \tau$ y $a = 1 - i\omega\tau$, que corresponde a la ecuación (20) del trabajo de Chalaev y Loss [69] la cual incorpora explícitamente las correcciones de vértice (VC). Se muestra que a frecuencias altas ($\hbar\omega \geq 0.5$ meV) el resultado obtenido despreciando las correcciones de vértice reproduce cualitativamente el comportamiento esperado, concordando a frecuencias fuera de la correspondiente ventana de energía referida anteriormente, es decir para $\omega \geq \omega'_-$ and $\omega \leq \omega'_+$.

En cuanto al efecto de la contribución de la torca dipolar en la conductividad Hall de espín se aprecia que los primeros dos términos en la expresión (5.8) cambian el signo

de los correspondientes en la expresión $\sigma_c^{sH}(\omega)$ en (5.7), al sumar tales expresiones para obtener la conductividad total $\sigma_{xy}^{S,z}(\omega)$. Por otro lado, el último término de $\sigma_\tau^{sH}(\omega)$ (ecn.(5.8)) es una función racional que se puede reescribir (para $\beta = 0$ y $\tilde{\omega} \neq 0$) como

$$-\frac{(\tilde{\omega}^2 + \Delta_R^2/\hbar^2)(\tilde{\omega}^2 + 4\varepsilon_R^2/\hbar^2)}{(\tilde{\omega}^2 - \omega_+^2)(\tilde{\omega}^2 - \omega_-^2)}, \quad (5.18)$$

donde $\varepsilon_R = 2\varepsilon_{so} = m^*\alpha^2/\hbar^2$. Como se muestra en la Figura 5.1, esta contribución domina la forma del espectro. Dicha contribución también posee resonancias (desplazadas) en ω'_\pm , siendo positiva para valores de ω entre ω'_+ y ω'_- , y negativa fuera de este rango. Por consiguiente, al incorporar el término de torca, se observa un cambio substancial en todo el espectro, respecto a los resultados obtenidos mediante el operador convencional. Es éste uno de los principales resultados de la presente tesis. A este punto arribamos a la siguiente importante propuesta: al medir la corriente y/o la acumulación de espín [105] a bajas temperaturas en el dominio de la frecuencia, podría establecerse la validez de la definición del operador de corriente de espín propuesto por J. Shi *et al.* [80], mediante el contraste de los resultados mostrados en el presente trabajo.

5.4.2 Caso Rashba más Dresselhaus

Al incluir la interacción de ambos tipos de acoplamiento espín-órbita, Rashba y Dresselhaus, aparecen nuevas e interesantes propiedades espectrales. En la Figura 5.3(a) se graficó la conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia para

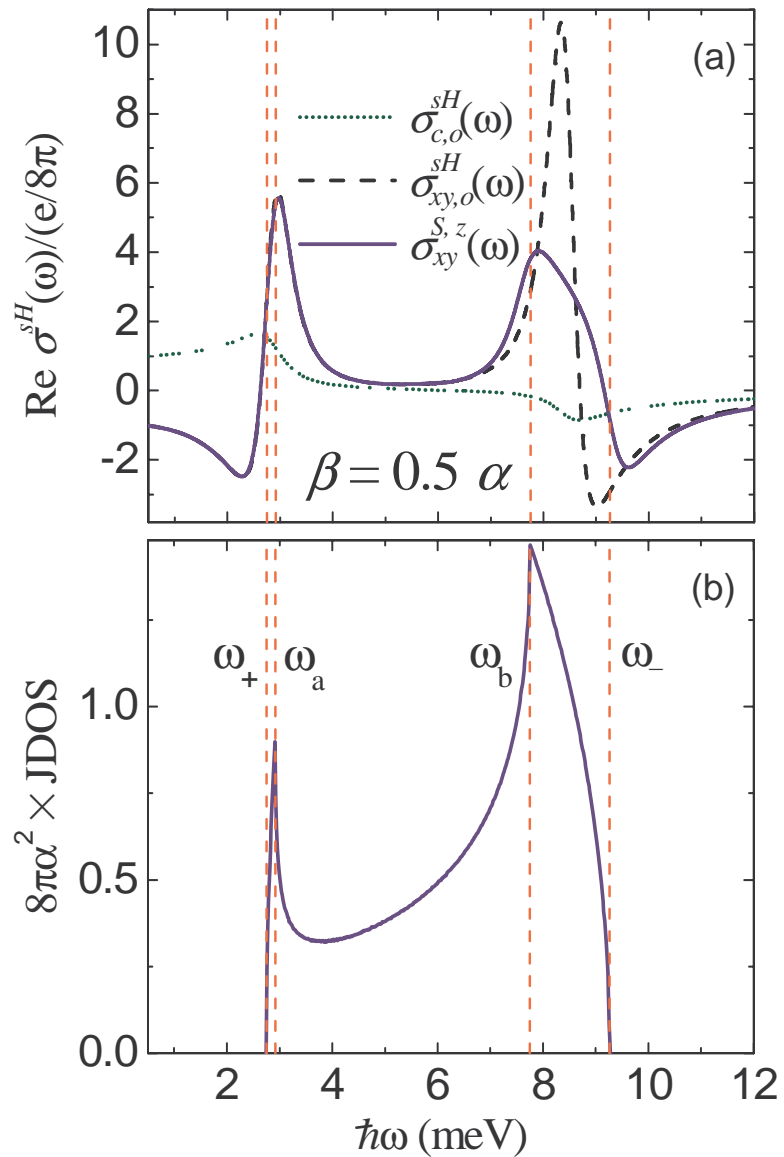


Figura 5.3: (a) Conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia para un GE2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$), empleando la definición convencional de corriente de espín (curva punteada), el operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S,z}$ en el límite $\varepsilon_{so} \ll \varepsilon_F$ (curva discontinua) y la integración exacta de la ecuación (5.4) (curva sólida), respectivamente. El valor de η se fijó tal que $\hbar\eta = 0.25$ meV y el resto de los parámetros son iguales a los considerados en la figura 5.1. (b) Gráfica de la correspondiente Densidad Conjunta de Estados (DCE). Existen cuatro frecuencias principales, dos definidas por las fronteras de absorción óptica, ω_- y ω_+ , y las otras dos corresponden a los picos en la DCE presentes a frecuencias ω_a y ω_b . Las últimas dos frecuencias surgen debido a la simetría de las bandas de conducción desdobladas al nivel de Fermi, en el espacio k . Las líneas discontinuas verticales se trazan como guías en las cuatro frecuencias mencionadas.

$\beta = 0.5\alpha$, con $\hbar\eta = 0.25$ meV y el resto de los parámetros idénticos a los utilizados en la figura 5.1. Se compara las curvas obtenidas por las fórmulas aproximadas (5.10) y (5.11) y la integración numérica de (5.7) y (5.8). Resulta evidente la notable diferencia entre el espectro óptico producido por la definición estándar y el producido por la definición conservada del operador de corriente de espín. Además de ello, el espectro se vuelve más amplio y altamente asimétrico en comparación con el caso $\beta = 0$ ó $\alpha = 0$. Tal y como se discutió en el trabajo publicado por Maytorena *et al.* [72], las principales características espectrales pueden entenderse debido a la anisotropía en el desdoblamiento de los estados de espín causado por la presencia simultánea de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus. En el límite de temperatura cero, la suma sobre estados en (5.1) se restringe a la región entre los contornos de Fermi $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$, para el cual $\varepsilon_-(k, \theta) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(k, \theta)$ (véase la Figura 5.2). Ciertas frecuencias distintivas pueden identificarse dada la anisotropía en el espacio k disponible para la respuesta óptica. Para ilustrar esto, considere la Densidad Conjunta de Estados (DCE) para las ramas desdobladas (Fig. 4.3b), la cual proporciona el número de transiciones directas que pueden ocurrir a la energía $\hbar\omega$. Estas transiciones involucran solamente estados con vectores de onda que satisfacen la ecuación $\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta) - \hbar\omega = 0$, la cual a una energía fotónica fija, define una curva $C_r(\omega)$ en el espacio k que describe una elipse rotada con semi-ejes de longitud $k_a(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta|$ y $k_b(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta|$ orientados a lo largo de los ejes principales (1,1) y (-1,1) respectivamente (Véase la figura 5.2). Por lo cual, para nuestro sistema, la DCE involucra estados sólo a lo largo de los arcos de la curva de resonancia $C_r(\omega)$ ubicados

dentro de la región mencionada $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$. Los picos observados en la DCE corresponden a energías de transición que involucran estados en la vecindad de los puntos de simetría $k_a(\omega) = k_F^-(\pi/4)$ y $k_b(\omega) = k_F^+(3\pi/4)$, para los cuales la energía de desdoblamiento de espín alcanza valores extremos. Estas ecuaciones determinan dos energías $\hbar\omega_a = 2k_F^-(\pi/4)|\alpha - \beta| = 2k_F|\alpha - \beta| + 2m^*(\alpha - \beta)^2/\hbar^2$ y $\hbar\omega_b = 2k_F^+(3\pi/4)|\alpha + \beta| = 2k_F|\alpha + \beta| - 2m^*(\alpha + \beta)^2/\hbar^2$. De manera similar, puede observarse la presencia de las fronteras de absorción a energías dadas por $\hbar\omega_{\pm} = 2k_F|\alpha \mp \beta| \mp 2m^*(\alpha \mp \beta)^2/\hbar^2$, correspondientes a las transiciones entre estados ubicados en los puntos $k_a(\omega) = k_F^+(\pi/4)$ y $k_b(\omega) = k_F^-(3\pi/4)$. Por claridad y guía visual, tales energías se indican en la Figura 5.3 como líneas discontinuas verticales. Como es de esperarse, la conductividad Hall de espín $\sigma_{xy}^{S,z}(\omega)$ también muestra estructura a las energías $\hbar\omega_{\pm}$, $\hbar\omega_a$ y $\hbar\omega_b$. El valor finito seleccionado para $\hbar\eta$ produce un ligero corrimiento de estas energías y suaviza el espectro en todo el rango.

Resulta evidente el hecho de que la nueva definición del operador de corriente de espín reportada por Shi *et al.* [80] produce un cambio significativo en la respuesta de un sistema como función de la frecuencia, comparada con la predicción del operador convencional de corriente de espín. Además de ello, como ocurre con el caso donde se presenta un solo tipo de acoplamiento (Rashba o Dresselhaus), la contribución de la torca dipolar (no mostrada en la Figura 5.3) resulta ser el término dominante en la conductividad Hall de espín. Nótese que el espectro en la Figura 5.3(a) muestra que la magnitud y la dirección de la corriente dinámica Hall de espín depende intensamente de la frecuencia y de las magnitudes de las constantes de acoplamiento α y β , lo

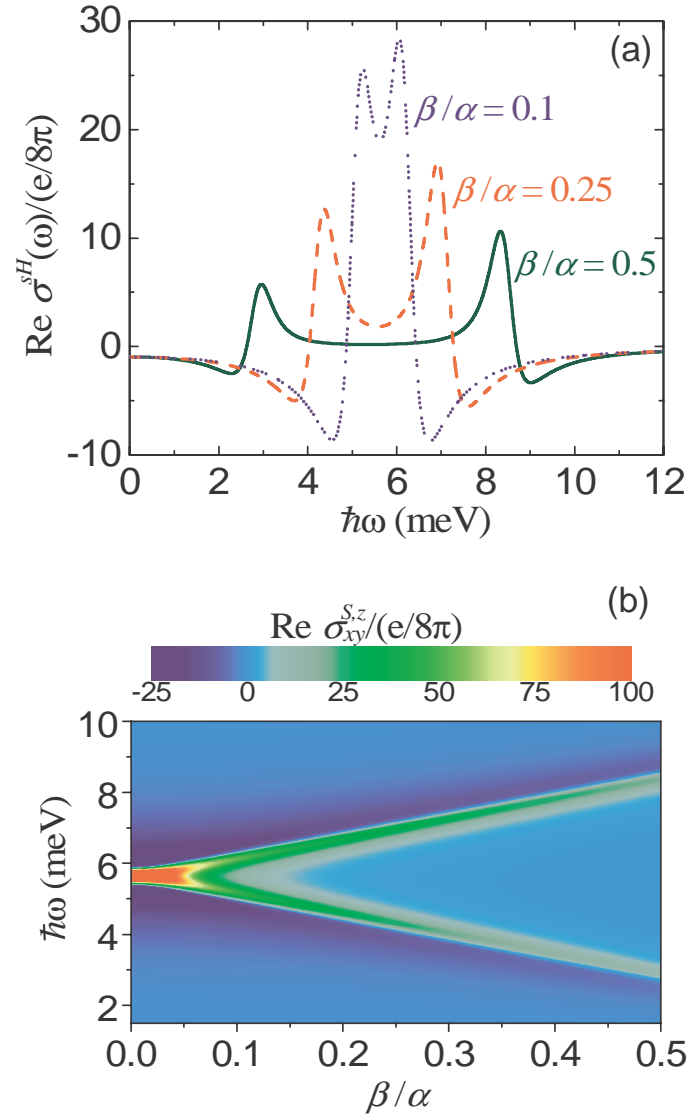


Figura 5.4: (a) Conductividad Hall de espín para $\beta/\alpha = 0.5, 0.25, 0.1$ (curvas sólida, discontinua y punteada respectivamente) utilizando la propuesta de operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S,z}$. Los parámetros utilizados son idénticos a los de la Figura 5.3. Nótese que los picos de resonancia tienden a separarse en energía a medida que la razón β/α se incrementa, mientras que su magnitud disminuye. (b) Mapa de contornos de la conductividad Hall de espín a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción β/α .

cual sugiere su control experimental vía compuertas de voltaje externo (que variarían la intensidad del efecto Rashba) y/o mediante el ajuste de la frecuencia del campo eléctrico.

Adicionalmente se exploró el efecto inducido al variar la proporción β/α en la conductividad Hall de espín (conservada) como función de la frecuencia de absorción. En la Figura 5.4(a) la respuesta espín Hall se muestra para los valores específicos $\beta/\alpha = 0.5, 0.25$ y 0.1 (el resto de los parámetros son los valores utilizados en la Figura 5.3). Nótese que la separación (en energía) de los picos característicos se vuelve mayor, y su intensidad disminuye, a medida que se incrementa la razón β/α . Tal efecto se enfatiza en el panel 4.4(b) donde el mapa de contornos de la conductividad Hall de espín se grafica como función de la variación continua de la proporción β/α , y ω . Tal comportamiento corresponde a la variación de las intensidades de transición ($\Delta\mathcal{E} = \hbar\omega_- - \hbar\omega_+$) como función de la variación de β [72]. De las ecuaciones (5.5) y (5.6) puede observarse que la conductividad Hall de espín se vuelve cero para el caso $\alpha = \pm\beta$.

En resumen, el estudio del SHE para un GE2D con acoplamiento Rashba y Dresselhaus muestra que el espectro óptico de la conductividad Hall de espín cambia substancialmente al utilizar un operador conservado de corriente de espín y que la contribución de torca dipolar en general domina sobre la parte convencional. Además se obtuvo que la magnitud y la dirección de la corriente Hall de espín son sensibles a la frecuencia de absorción y a la magnitud de las constantes de acoplamiento. Algunos de estos resultados también se verán presentes en el caso de huecos pesados,

manteniéndose importantes diferencias entre electrones y huecos, tal y como se verá en el siguiente capítulo.

Capítulo 6

Efecto Hall de espín en Huecos pesados

El primer trabajo sobre Efecto Hall de Espín (SHE) en los estados de valencia fue realizado por Murakami *et al.* [51] en el que estudiaron corrientes de espín de huecos tridimensionales en el bulto de un semiconductor generadas por acoplamiento espín-órbita intrínseco al material. A éste trabajo siguió el de Schliemann y Loss [53] en el que analizaron el transporte Hall de espín de huecos pesados confinados en un pozo cuántico en presencia sólo de acoplamiento Rashba y a frecuencia cero. Posteriormente, Wunderlich *et al.* [40] reportaron un estudio experimental sobre un gas bidimensional de huecos pesados (GH2D), confirmando la predicción del SHE intrínseco a través de técnicas ópticas.

Una de las ventajas de estudiar el SHE en los estados de valencia es que en el límite d.c. (*i.e.* frecuencia cero), el SHE no se cancela por efectos de desorden, a diferencia del caso de los estados de conducción. Sin embargo, el análisis del SHE en huecos resulta ser mucho más complicado respecto al de los electrones, debido a que los términos que describen el acoplamiento espín-órbita en huecos poseen mayor complejidad. Debido a la degeneración que existe entre las bandas de huecos pesados y huecos ligeros en el punto Γ , un estudio riguroso del transporte de espín en huecos debe considerar el Hamiltoniano de Luttinger, en el que ambos tipos de huecos se

encuentran acoplados. Sin embargo, en un pozo cuántico ambas bandas se desdoblán debido a la cuantización en dirección de crecimiento de la heteroestructura. Para un pozo cuántico lo suficientemente angosto (~ 10 nm) y para densidades y temperaturas no muy altas, sólo la banda de huecos pesados se encuentra significativamente ocupada, lo que permite un estudio independiente de dicha banda.

En el presente capítulo, de manera análoga al capítulo anterior, se utilizará la propuesta de definición del operador conservado de corriente de espín reportada por Shi *et al.* [80] para estudiar la conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia, para un GH2D sujeto a acoplamiento espín-órbita de ambos tipos, Rashba y Dresselhaus. Como se mencionó en el capítulo 2, existen dos propuestas en la literatura para el término de Dresselhaus de huecos pesados, establecidas por Bulaev y Loss [99] y Winkler [comunicación privada], siendo el primero una aproximación del segundo. Por su simplicidad, el presente estudio se enfocará en el término de Dresselhaus propuesto por Bulaev y Loss (2.10) y al final del presente capítulo se mostrarán los resultados obtenidos con la propuesta de Winkler para el término de Dresselhaus, ecuación (2.12). Similarmente al caso de los electrones, se mostrará que el espectro óptico de la conductividad Hall de espín se modifica notablemente cuando se aplica la definición conservada del operador de corriente de espín (para ambos Hamiltonianos de Dresselhaus), lo cual como se discutió en el capítulo anterior, obedece principalmente a una contribución significativa del término de torca de espín. También se observa que la magnitud y la dirección de la corriente dinámica de espín depende fuertemente de la frecuencia, además del valor relativo entre las

constantes de acoplamiento espín-órbita. A diferencia del caso de los electrones, la conductividad de espín de huecos pesados posee un valor finito cuando las intensidades de acoplamiento Rashba y Dresselhaus poseen la misma magnitud, esto dentro del Hamiltoniano propuesto por Bulaev y Loss.

6.1 Conductividad Hall de espín de huecos pesados

Considérese un sistema bidimensional de huecos pesados en presencia de acoplamiento espín-órbita de ambos tipos, Rashba y Dresselhaus. El Hamiltoniano H_0 de este sistema, está dado por la ecuación (2.18), sus correspondientes eigenestados y eigenvectores por las ecuaciones (2.19) y (2.21), y el número de onda de Fermi asociado a cada banda por la expresión (2.22). El subíndice “ hh ” en tales expresiones será omitido en el presente capítulo concerniente exclusivamente a huecos pesados. Supóngase que al tiempo $t_0 = 0$ inicia una perturbación que consiste en un campo eléctrico a.c., espacialmente homogéneo, de frecuencia ω . Dentro del formalismo de respuesta lineal, la conductividad de espín dependiente de la frecuencia que describe a un electrón con polarización de espín en dirección z moviéndose en dirección $\lambda = x, y$ como respuesta al campo eléctrico en dirección y está dada por la fórmula de Kubo

$$\sigma_{\lambda y}^{sz}(\omega) = \frac{e}{\hbar A \tilde{\omega}} \int_0^\infty e^{i\tilde{\omega}t} \sum_{\mathbf{k}, \mu} f(\varepsilon_\mu)_{T=0} \langle \psi_{\mathbf{k}, \mu}(\mathbf{r}) | [\mathcal{J}_\lambda^{sz}(t), v_y(0)] | \psi_{\mathbf{k}, \mu}(\mathbf{r}) \rangle dt, \quad (6.1)$$

donde $f(\varepsilon_\mu)_{T=0}$ es la función de distribución de Fermi (en el límite de cero temperatura) y $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$ (el parámetro fenomenológico η se describió en secciones previas). Se utilizará el operador conservado de corriente de espín reportado por Shi *et al.* [80] escrito en el esquema de interacción, $\mathcal{J}_\lambda^{sz}(t)$. El operador conservado de corriente de espín se define como $\hat{\mathcal{J}}_s = \frac{3\hbar}{2} \frac{d(\hat{r}\sigma_z)}{dt}$, donde el prefactor 3 es heredado del número cuántico de momento angular total de huecos pesados ($J = 3/2$) [106].

Con el objetivo de obtener la forma explícita del operador $\mathcal{J}_\lambda^{sz}(t)$, se utilizará la ecuación de movimiento de Heisenberg para obtener la derivada temporal del operador de desplazamiento de espín en dirección λ . Para el Hamiltoniano H_0 del sistema descrito anteriormente, se obtiene

$$\mathcal{J}_\lambda^{sz} = \frac{3\hbar}{2} \frac{p_\lambda}{m^*} \sigma_z + \frac{3}{2i} \{\hat{\lambda}, \sigma_+ \gamma_+ - \sigma_- \gamma_-\} \quad (6.2)$$

donde $\gamma_\pm = p_\mp^2 (\pm i\alpha p_\mp - \beta p_\pm) / \hbar^3$ y el símbolo $\{, \}$ denota un anticonmutador. En la ecuación (6.1), $v_y(0)$ es el operador de velocidad de un hueco pesado, el cual se puede obtener a través de la ecuación de movimiento de Heisenberg $\mathbf{v}(0) = \frac{i}{\hbar} [H_0, \mathbf{r}]$. Para el presente sistema se obtiene $v_y(0) = \frac{p_y}{m^*} + \sigma_+ \frac{d\gamma_+}{dp_y} + \sigma_- \frac{d\gamma_-}{dp_y}$, donde explícitamente $\frac{d\gamma_\pm}{dp_y} = p_\mp [(3\alpha \mp i\beta)p_\mp \pm 2i\beta p_\pm] / \hbar^3$.

Se puede demostrar, después de un cálculo relativamente simple pero extenso y tedioso, que el correspondiente valor esperado de la función de correlación “corriente de espín-corriente de carga” para huecos pesados en la fórmula de Kubo, $\langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle \equiv \mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t)$ toma la forma funcional (el cálculo es análogo al mostrado en el Apéndice A para electrones)

$$\mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t) = \frac{3i\mu\hbar k_x^2 k(\beta^2 - \alpha^2 - 2\Delta^2)}{m^*\Delta} \left[\cos\left(\frac{2\Delta k^3}{\hbar}t\right) - \frac{2k^3\Delta}{\hbar}t \operatorname{sen}\left(\frac{2k^3\Delta}{\hbar}t\right) \right] + 6i \frac{(k_x^2 - k_y^2)k^2}{\hbar} (2\alpha^2 + \Delta^2) \cos\left(\frac{2k^3\Delta}{\hbar}t\right) \quad (6.3)$$

donde $\Delta(\theta)$ se definió en la ecuación (2.20). Insertando este resultado en (6.1) y siguiendo un procedimiento similar al de las secciones 3.3 y 5.1, es posible descomponer la conductividad de espín en la suma de dos contribuciones dadas por

$$\sigma_{\lambda y}^{sz}(\omega) = \sigma_{\lambda y}^c(\omega) + \sigma_{\lambda y}^\tau(\omega) \quad (6.4)$$

de las cuales, la primera de ellas proviene de la contribución del operador convencional de corriente de espín y está dada por

$$\sigma_{\lambda y}^c(\omega) = -\frac{3e}{4\pi^2 m^*} \int_0^{2\pi} d\theta g_\lambda(\theta) \frac{\cos\theta}{\Delta} (\beta^2 - \alpha^2 - 2\Delta^2) \int_{k_{F,+}(\theta)}^{k_{F,-}(\theta)} dk \frac{k^4}{\left(\frac{2\Delta k^3}{\hbar}\right)^2 - \tilde{\omega}^2} \quad (6.5)$$

mientras que el segundo término de (6.4) resulta de la contribución a la torca de espín y está dado explícitamente por

$$\sigma_{\lambda y}^\tau(\omega) = \frac{6e}{\hbar^2 \pi^2 m^*} \int_0^{2\pi} d\theta g_\lambda(\theta) \cos\theta \Delta (\beta^2 - \alpha^2 - 2\Delta^2) \int_{k_{F,+}(\theta)}^{k_{F,-}(\theta)} dk \frac{k^{10}}{\left[\left(\frac{2\Delta k^3}{\hbar}\right)^2 - \tilde{\omega}^2\right]^2} \quad (6.6)$$

donde hemos definido $g_\lambda(\theta) = \delta_{\lambda x} \cos\theta + \delta_{\lambda y} \sin\theta$. Las integrales en k en las expresiones (6.5) y (6.6) pueden resolverse analíticamente, pero conducen a expresiones demasiado largas y complicadas, y no serán proporcionadas aquí. Se observa de las

mismas que, en presencia de ambos tipos de acoplamiento (Rashba y Dresselhaus), se genera una corriente de espín en dirección del campo eléctrico, tal y como se ha reportado para electrones [57]. Para el caso de un sistema en presencia sólo de un tipo de acoplamiento espín-órbita ($\beta = 0$ ó $\alpha = 0$), la conductividad longitudinal de espín se vuelve cero y la dependencia angular del integrando en las expresiones anteriores se reduce significativamente conduciendo a formas analíticas cerradas para $\sigma_{xy}^c(\omega)$ y $\sigma_{xy}^r(\omega)$ (tampoco proporcionadas aquí). Para el caso $\alpha \neq \beta$ las integrales en θ no se pueden efectuar analíticamente, por lo que debe implementarse un método de integración numérica. Sin embargo, resulta conveniente considerar en primera instancia el caso límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$, con $\varepsilon_{so} = (\sqrt{\alpha^2 + \beta^2})k_F^3$ y $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$, el cual es válido para GH2D's basadas en heteroestructuras semiconductoras III-V (e.g. $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \approx 0.14$ para *GaAs*), y para el cual se puede derivar una expresión analítica para la conductividad de espín dependiente de la frecuencia.

6.2 Expresiones analíticas en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$

Integrando y evaluando respecto a k las ecuaciones (6.5) y (6.6), haciendo luego una expansión en series de $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F$, truncándola a primer orden y posteriormente integrando respecto a θ se obtiene la siguiente expresión para la conductividad de espín,

$$\sigma_{\lambda y}^{sz,0}(\omega) \simeq \sigma_{\lambda y}^{c,0}(\omega) + \sigma_{\lambda y}^{r,0}(\omega), \quad (6.7)$$

donde las conductividades longitudinal y Hall de espín para la parte convencional

están dadas respectivamente por

$$\begin{aligned}\frac{\sigma_{xy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= \frac{1}{3} \left[2 + \frac{2\hbar^2\tilde{\omega}^2 + \prod_{\mu} \xi_{\mu}}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \right] \\ \frac{\sigma_{yy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= \frac{1}{3} \left[\frac{4(\alpha^2 + \beta^2)k_F^6 - \hbar^2\tilde{\omega}^2}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{1/2}} - 1 \right] \left[\frac{2\hbar^2\tilde{\omega}^2 + \prod_{\mu} \xi_{\mu}}{8\alpha\beta k_F^6} \right],\end{aligned}\tag{6.8}$$

mientras que las contribuciones a las conductividades Hall y longitudinal de espín debido a la torca de espín resultan ser

$$\begin{aligned}\frac{\sigma_{xy}^{\tau,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= -2 \frac{\sigma_{xy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} - \frac{2\hbar^2\tilde{\omega}^2}{3} \left[\frac{(2\hbar^2\tilde{\omega}^2 + \prod_{\mu} \xi_{\mu})[4(\alpha^2 + \beta^2)k_F^6 - \hbar^2\tilde{\omega}^2]}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{3/2}} \right. \\ &\quad \left. + \frac{2}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{1/2}} \right] \\ \frac{\sigma_{yy}^{\tau,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= -4 \frac{\sigma_{yy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} - \frac{4}{3} \left\{ \frac{(\beta^2 - \alpha^2)}{4\alpha\beta} \left[\frac{4(\alpha^2 + \beta^2)k_F^6 - \hbar^2\tilde{\omega}^2}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{1/2}} - 1 \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\hbar^2\tilde{\omega}^2(2\hbar^2\tilde{\omega}^2 + \prod_{\mu} \xi_{\mu})4\alpha\beta k_F^6}{\prod_{\mu} (\xi_{\mu}^2 - \hbar^2\tilde{\omega}^2)^{3/2}} \right\}\end{aligned}\tag{6.9}$$

con $\xi_{\mu} = 2(\alpha + \mu\beta)k_F^3$. Para un sistema en el que $\hbar\eta \ll \varepsilon_{SO}$, el límite estático para la conductividad total, tanto Hall como longitudinal son [107]

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \begin{cases} -\frac{9e}{8\pi} & \text{para } \alpha^2 > \beta^2, \\ -\frac{6e}{8\pi} & \text{para } \alpha^2 = \beta^2, \\ -\frac{3e}{8\pi} & \text{para } \alpha^2 < \beta^2. \end{cases}\tag{6.10}$$

y

$$\sigma_{yy}^{sz}(0) = \begin{cases} -\frac{3e}{8\pi} \frac{\beta}{\alpha} & \text{para } \alpha^2 > \beta^2, \\ 0 & \text{para } \alpha^2 = \beta^2, \\ \frac{3e}{8\pi} \frac{\alpha}{\beta} & \text{para } \alpha^2 < \beta^2. \end{cases} \quad (6.11)$$

Como puede observarse, la expresión (6.10) depende sólo de parámetros universales y corresponde a uno de los resultados importantes del presente proyecto [107]. A diferencia del caso de los electrones, las ecuaciones (6.10) y (6.11) predicen una conductividad Hall de espín d.c. finita incluso cuando las intensidades de los parámetros de acoplamiento espín-órbita α y β son iguales. Como se verá más adelante, la conductividad Hall de espín a.c. también es finita para el caso $\alpha = \pm\beta$.

6.3 Conexión entre las conductividades de espín y de carga

Tal y como se comentó en el capítulo 1 del presente escrito, uno de los retos actuales en Espintrónica consiste en lograr medir experimentalmente una corriente de espín. De existir una relación entre las conductividades de espín y las conductividades de carga, la medida de las primeras podría efectuarse de forma eléctrica, y eventualmente con ello se lograría evaluar experimentalmente una corriente de espín. Es por ello que en ésta sección nos abocaremos a encontrar dicha conexión entre ambos tipos de conductividades.

Para calcular la conductividad de carga de un GH2D como función de la frecuencia, emplearemos la fórmula de Kubo (3.18), así como el Hamiltoniano (2.18), los eigenestados (2.19) y eigenvectores (2.21). Siguiendo un procedimiento idéntico al de la sección 3.3 obtenemos el tensor de conductividad de carga dependiente de la frecuencia $\sigma_{\lambda y}^C(\omega) = \delta_{\lambda y} \sigma_D(\omega) + \sigma_{\lambda y}^{ch}$, donde $\sigma_D(\omega) = \frac{ine^2}{m^* \omega}$ es la conductividad de Drude y $\sigma_{\lambda y}^{ch}$ es la contribución debido a transiciones interbanda de espín, la cual se calcula como,

$$\frac{\sigma_{\lambda y}^{ch}(\omega)}{e^2/2\pi\hbar} = \frac{2i}{\hbar^3 \tilde{\omega} \pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{h_\lambda(\theta)(2\Delta^2 + \alpha^2 - \beta^2)^2}{\Delta} \times \int_{k_{F,+}(\theta)}^{k_{F,-}(\theta)} dk \frac{k^8}{\left(\frac{2\Delta k^3}{\hbar}\right)^2 - \tilde{\omega}^2} \quad (6.12)$$

donde $h_\lambda(\theta) = \delta_{\lambda x} \sin \theta \cos \theta - \delta_{\lambda y} \cos^2 \theta$. Aunque las integrales en k pueden resolverse analíticamente, las subsiguientes integrales en θ no se pueden efectuar de manera analítica. En el límite $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$ (el cual como ya se comentó es válido para heteroestructuras III-V) es posible obtener expresiones analíticas para $\sigma_{xy}^{ch}(\omega)$ y $\sigma_{yy}^{ch}(\omega)$, las cuales pueden relacionarse con las fórmulas (6.8) para $\sigma_{xy}^{c,0}(\omega)$ y $\sigma_{yy}^{c,0}(\omega)$ como,

$$\begin{aligned} \frac{\sigma_{xy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= \frac{4\tilde{\omega}\varepsilon_F}{3(2\tilde{\omega}^2 + \prod_\mu \xi_\mu)} \left[\frac{i\sigma_{yy}^{ch,0}(\omega)}{e^2/2\pi\hbar} - \frac{(3\alpha^2 + \beta^2)k_F^6}{\tilde{\omega}\varepsilon_F} \right] \\ \frac{\sigma_{yy}^{c,0}(\omega)}{9e/8\pi} &= \frac{4\tilde{\omega}\varepsilon_F}{3(2\tilde{\omega}^2 + \prod_\mu \xi_\mu)} \left[\frac{-i\sigma_{xy}^{ch,0}(\omega)}{e^2/2\pi\hbar} + \frac{2\alpha\beta k_F^6}{\tilde{\omega}\varepsilon_F} \right] \end{aligned} \quad (6.13)$$

De las ecuaciones (6.8), (6.9) y (6.13), el tensor de conductividad de espín de huecos pesados puede obtenerse experimentalmente a través de la medida de la conductividad eléctrica, dentro del régimen de frecuencia finita. Esto vuelve plausible la

valoración experimental de una corriente de espín de huecos pesados en presencia de interacción Rashba y/o Dresselhaus.

6.4 Discusión de resultados

6.4.1 Caso Rashba

Se analizará en primera instancia (y por simplicidad) la conductividad Hall de espín para el caso en el que se encuentra presente un sólo tipo de acoplamiento espín-órbita ($\alpha = 0$ ó $\beta = 0$). En la Figura 6.1 se muestra la parte real de la conductividad Hall de espín contra la frecuencia del campo eléctrico aplicado, utilizando las ecuaciones (6.5) y (6.6) integradas numéricamente. Para ésta figura (y las subsiguientes, a menos que se especifique lo contrario) se consideró un sistema basado en *GaAs*, en el que la masa efectiva de huecos pesados es $m^* = 0.51 m_o$ y la correspondiente energía de Fermi $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*} = 1.4$ meV, considerando una densidad superficial de huecos de $n = 3 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. A ésta densidad, el parámetro de acoplamiento Rashba calculado es $\alpha = 7.48 \times 10^{-23}$ eVcm³, el cual equivale a una energía de desdoblamiento de espín $\Delta_R = 2\alpha k_F^3 \simeq 0.38$ meV. El parámetro que describe la tasa de relajación de momento se ha escogido tal que $\hbar\eta = 0.035$ meV, valor que corresponde a una muestra de alta calidad con movilidad $\mu = e\tau/m^* \simeq 20$ m²/Vs y tiempo de relajación de $\tau \simeq 118$ ps. Como referencia, se ha graficado el resultado obtenido empleando sólo la definición convencional de corriente de espín (curva punteada en la Figura 6.1) dado por la ecuación (6.5).

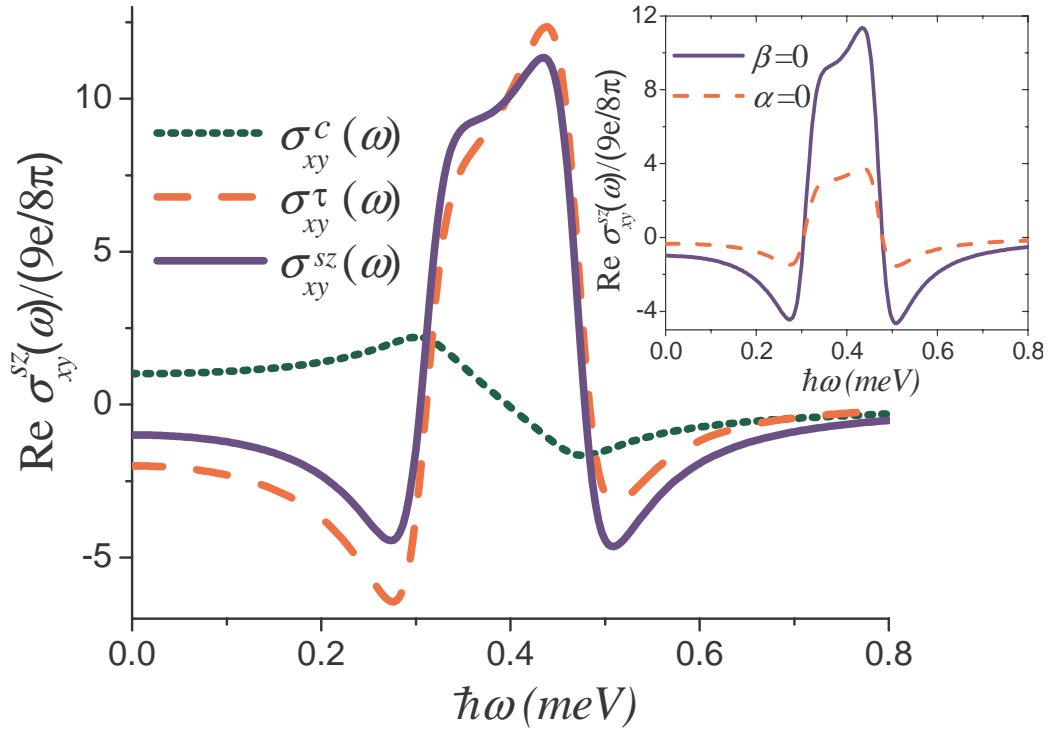


Figura 6.1: Parte real de la conductividad Hall de espín como función de la energía fotónica para un GH2D en presencia sólo de interacción espín-órbita Rashba ($\beta = 0$). La curva punteada se obtiene utilizando la definición convencional del operador de corriente de espín. La curva discontinua y la curva sólida son la contribución de la torca y la conductividad total de espín respectivamente, empleando el operador de corriente de espín conservado. Como inserción se muestra la comparación entre el caso $\beta = 0$ ($\alpha = 7.48 \times 10^{-23} \text{ eVcm}^3$) y el caso $\alpha = 0$ ($\beta = 7.48 \times 10^{-23} \text{ eVcm}^3$). Se observa que para este último, la intensidad del espectro de conductividad es menor al caso anterior cerca del pico central.

La conductividad Hall de espín $\sigma_{xy}^c(\omega)$ muestra frecuencias características a energías dadas por $\hbar\omega_+ \simeq 2\alpha k_{F,-}^3$ y $\hbar\omega_- \simeq 2\alpha k_{F,+}^3$, las cuales corresponden respectivamente a la energía fotónica mínima y máxima requeridas para inducir transiciones ópticas entre la ramas desdobladas $\mu = -1$ (inicial) y $\mu = +1$ (final) (Véase la figura 6.2). A bajas frecuencias se aproxima al valor universal $9e/8\pi$, y se vuelve cero a altas frecuencias. Debido al valor finito del parámetro de amortiguamiento η , el espectro posee una forma suavizada. Recuérdese que las correcciones de vértice no juegan un papel importante en el transporte de huecos, por lo que los cálculos utilizando la fórmula de Kubo sin incluir explícitamente las correcciones de vértice, producen el mismo resultado que la técnica diagramática completa [66, 67, 68].

En cuanto al efecto de la contribución de la torca dipolar en la conductividad Hall de espín se aprecia que el término de torca domina el perfil del espectro. Dicha contribución también posee frecuencias características (recorridas) en ω_{\pm} , siendo positiva para valores de ω entre ω_+ y ω_- , y negativa fuera de este rango. Por consiguiente, se observa un cambio substancial en todo el espectro. Como inserción se muestra la comparación entre el caso $\beta = 0$ ($\alpha = 7.48 \times 10^{-23}$) y el caso $\alpha = 0$ ($\beta = 7.48 \times 10^{-23}$). Se observa que para este último, la intensidad del espectro de conductividad es menor al caso anterior, cerca del pico central.

6.4.2 Caso anisotrópico

Al incluir la interacción de ambos tipos de acoplamiento espín-órbita, Rashba y Dresselhaus, aparecen nuevas e interesantes propiedades espectrales. En la Figura 6.3

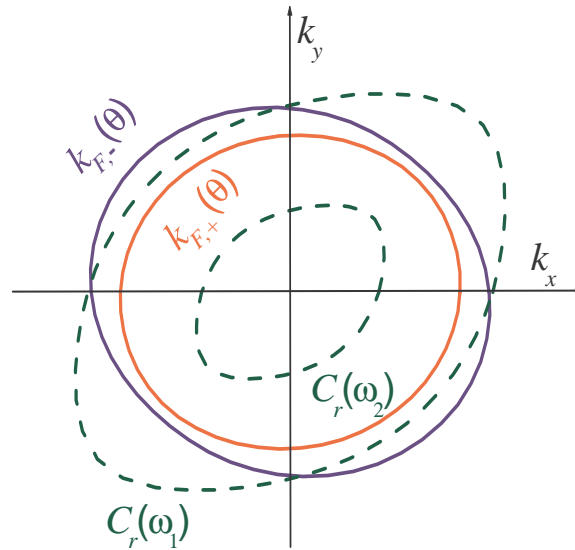


Figura 6.2: Esquema de la anisotropía angular del desdoblamiento de espín de la banda de valencia al nivel de Fermi en un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus para un sistema basado en *GaAs*. La curva punteada $C_r(\omega)$ resulta de la condición $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$, véase el texto para los detalles.

(a) y (b) se grafica la conductividad Hall y la conductividad longitudinal (respectivamente) de espín dependiente de la frecuencia para $\beta = 0.5\alpha$. También resulta evidente la notable diferencia entre el espectro óptico producido por la definición estándar y el producido por la definición conservada del operador de corriente de espín. Además de ello, el espectro se vuelve más amplio y altamente asimétrico en comparación con el caso $\beta = 0$ ó $\alpha = 0$. Tal y como se discutió en la sección anterior, las principales características espectrales pueden entenderse debido a la anisotropía en el desdoblamiento de los estados de espín causado por la presencia simultánea de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus. De manera análoga al caso de los electrones, en el límite de cero temperatura, la suma sobre estados en (6.1) se restringe a la región entre los contornos de Fermi $k_F^-(\theta) \leq k \leq k_F^+(\theta)$, para el cual $\varepsilon_-(k, \theta) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(k, \theta)$ (véase la Figura

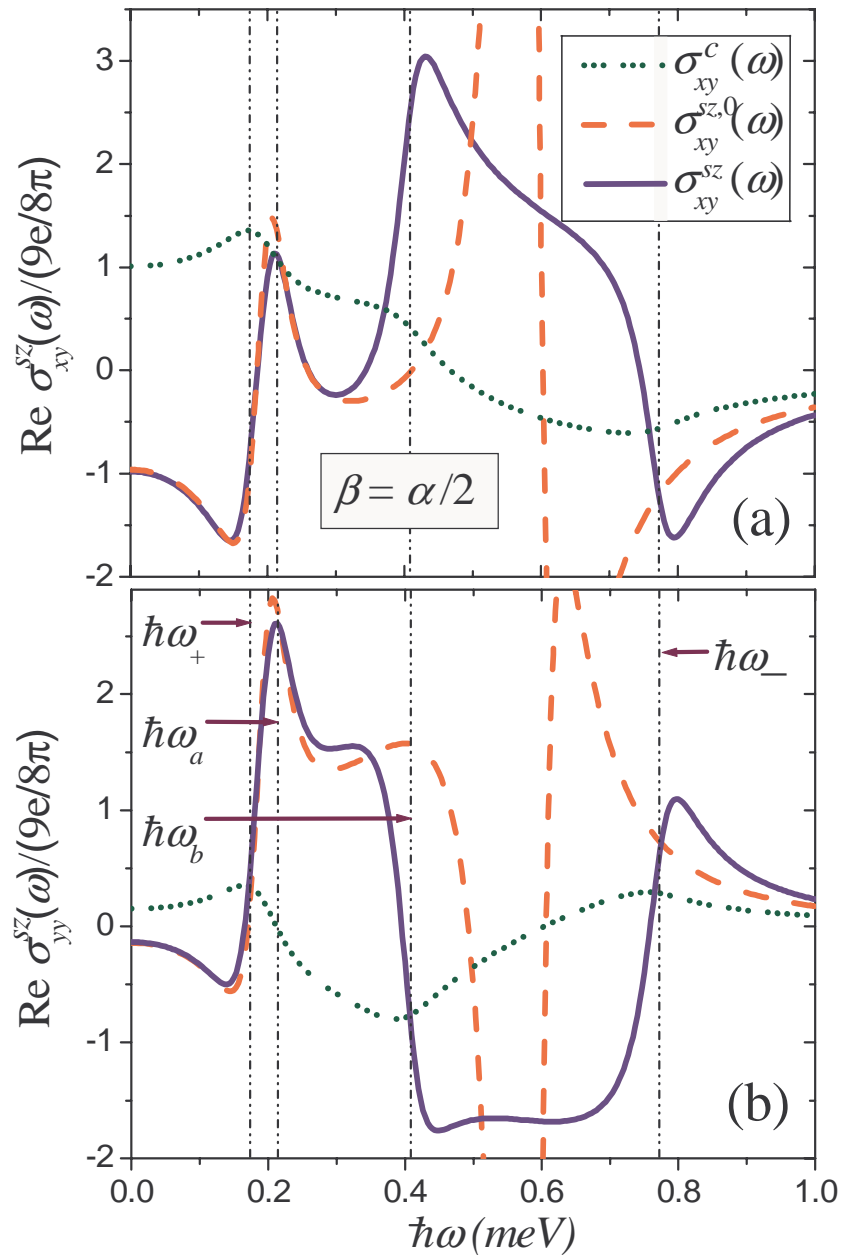


Figura 6.3: Conductividad (a) Hall y (b) longitudinal de espín dependiente de la frecuencia para un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$), empleando la definición convencional de corriente de espín (curva punteada), el operador conservado de corriente de espín $\mathcal{J}_{xy}^{S_z}$ en el límite $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$ (curva discontinua) y la integración exacta de la ecuación (5.4) (curva sólida), respectivamente. En la figura se muestran las cuatro frecuencias principales, dos definidas por las fronteras de absorción óptica, ω_- y ω_+ , y las otras dos, ω_a y ω_b , surgen debido a la simetría de las bandas de valencia desdobladas al nivel de Fermi, en el espacio k . Las líneas discontinuas verticales se ubican como guías en las cuatro frecuencias mencionadas. También se observa una buena concordancia entre las curvas sólida y discontinua para frecuencias menores a ω_b .

6.2), apareciendo ciertas frecuencias distintivas dada la anisotropía en el espacio k disponible para la respuesta óptica. El número de transiciones directas que pueden ocurrir a la energía $\hbar\omega$ involucran solamente estados con vectores de onda que satisfacen la ecuación $\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta) - \hbar\omega = 0$, la cual a una energía fotónica fija, define la curva $C_r(\omega)$ en el espacio k dada por la ecuación $[\tilde{k}_x^2/k_a^6(\omega) + \tilde{k}_y^2/k_b^6(\omega)](\tilde{k}_x^2 + \tilde{k}_y^2) = 1$, con semiejes de longitud $k_a^3(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta|$ y $k_b^3(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta|$ orientados a lo largo de los ejes principales (1,1) y (-1,1) respectivamente (Véase la figura 6.2). Los picos observados en la conductividad óptica corresponden a energías de transición que involucran estados en la vecindad de los puntos de simetría $k_a(\omega) = k_{F,-}(\pi/4)$ y $k_b(\omega) = k_{F,+}(3\pi/4)$. Estas ecuaciones determinan dos energías:

$$\begin{aligned}\hbar\omega_a &= 2|\alpha - \beta|k_{F,-}^3(\pi/4) = 2|\alpha - \beta|k_F^3\left(1 + \frac{m^*k_F}{\hbar^2}|\alpha - \beta|\right)^3 \\ \hbar\omega_b &= 2|\alpha + \beta|k_{F,+}^3(3\pi/4) = 2|\alpha + \beta|k_F^3\left(1 - \frac{m^*k_F}{\hbar^2}|\alpha + \beta|\right)^3.\end{aligned}\tag{6.14}$$

De manera similar, puede observarse la presencia de las fronteras de absorción a energías dadas por

$$\hbar\omega_{\pm} = 2|\alpha \mp \beta|k_F^3\left(1 \mp \frac{m^*k_F}{\hbar^2}|\alpha \mp \beta|\right)^3\tag{6.15}$$

correspondientes a las transiciones entre estados ubicados en los puntos $k_a(\omega) = k_{F,+}(\pi/4)$ y $k_b(\omega) = k_{F,-}(3\pi/4)$. Por claridad, tales energías se indican en la Figura 6.3 como líneas discontinuas verticales. También puede observarse una larga separación entre las frecuencias $\hbar\omega_b$ y $\hbar\omega_-$, lo cual es reflejo de una mayor separación entre las bandas de dispersión $\mu = +1$ y $\mu = -1$ en la dirección (-1,1), en comparación con

el caso de los electrones. El valor finito seleccionado para $\hbar\eta$ produce un corrimiento ligero de estas energías y suaviza el espectro en todo el rango. Además se observa una buena concordancia entre las fórmulas integradas numéricamente, y las expresiones analíticas obtenidas para el regimen $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$ a frecuencias menores a ω_b

Así pues, también para el caso de huecos pesados resulta evidente el hecho de que la nueva definición del operador de corriente de espín reportada por Shi *et al.* [80] produce un cambio significativo en la respuesta de un sistema como función de la frecuencia, comparada con la predicción del operador convencional de corriente de espín. Además de ello, como ocurre con el caso donde se presenta un solo tipo de acoplamiento (Rashba o Dresselhaus), la contribución de la torca dipolar resulta ser el término dominante en la conductividad Hall de espín de huecos pesados.

Adicionalmente se exploró el efecto inducido al variar la proporción α/β en la conductividad de espín (conservada) como función de la frecuencia de excitación. Particularmente en la Figura 6.4 (a) la respuesta Hall de espín se muestra para los valores específicos $\alpha/\beta = 0, 0.5, 1$ y $3/2$. Nótese que la separación (en energía) de las frecuencias características ω_b y ω_- se vuelve mayor a medida que se incrementa la razón α/β . También puede observarse que para el caso $\alpha = \beta$ las frecuencias características ω_+ y ω_a desaparecen, lo cual puede observarse de las ecuaciones (6.14) y (6.15). Esto se enfatiza en la figura 6.4 (b) donde se muestra un mapa de contornos de la conductividad Hall de espín a.c. como función de la frecuencia de excitación ω y la razón α/β . Para valores tales que $\beta > \alpha$, el pico en la frecuencia característica ω_a es casi imperceptible, aumentando su intensidad en el rango $\beta < \alpha$.

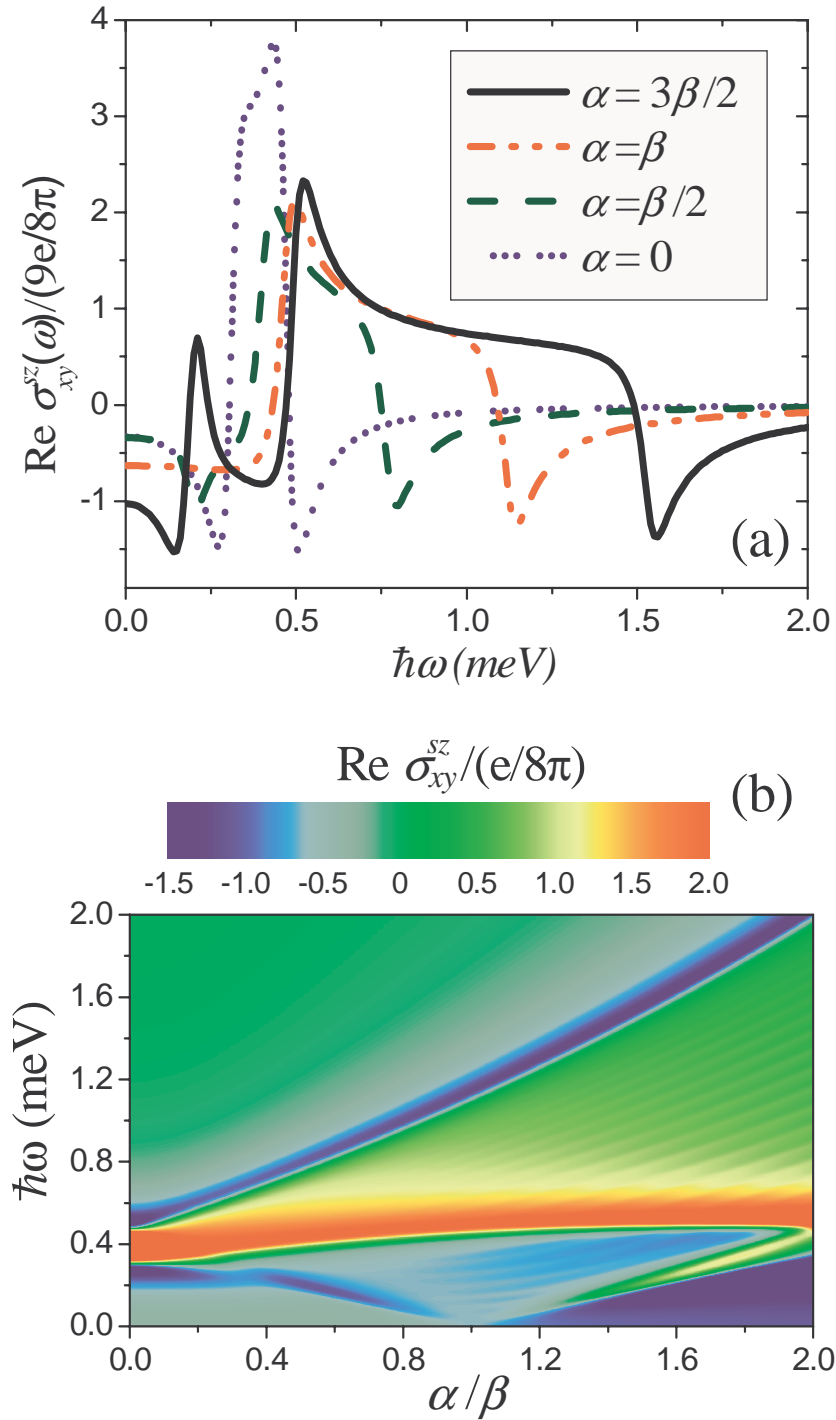


Figura 6.4: (a) Conductividad Hall de espín para $\alpha/\beta = 0, 0.5, 1, 3/2$ (curvas azul, verde, rojo y negro respectivamente) utilizando la propuesta de operador conservado de corriente de espín \mathcal{J}_{xy}^{sz} . Nótese que los picos característicos ω_b y ω_- tienden a separarse en energía a medida que la razón α/β se incrementa. (b) Mapa de contornos de la conductividad Hall de espín a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción α/β .

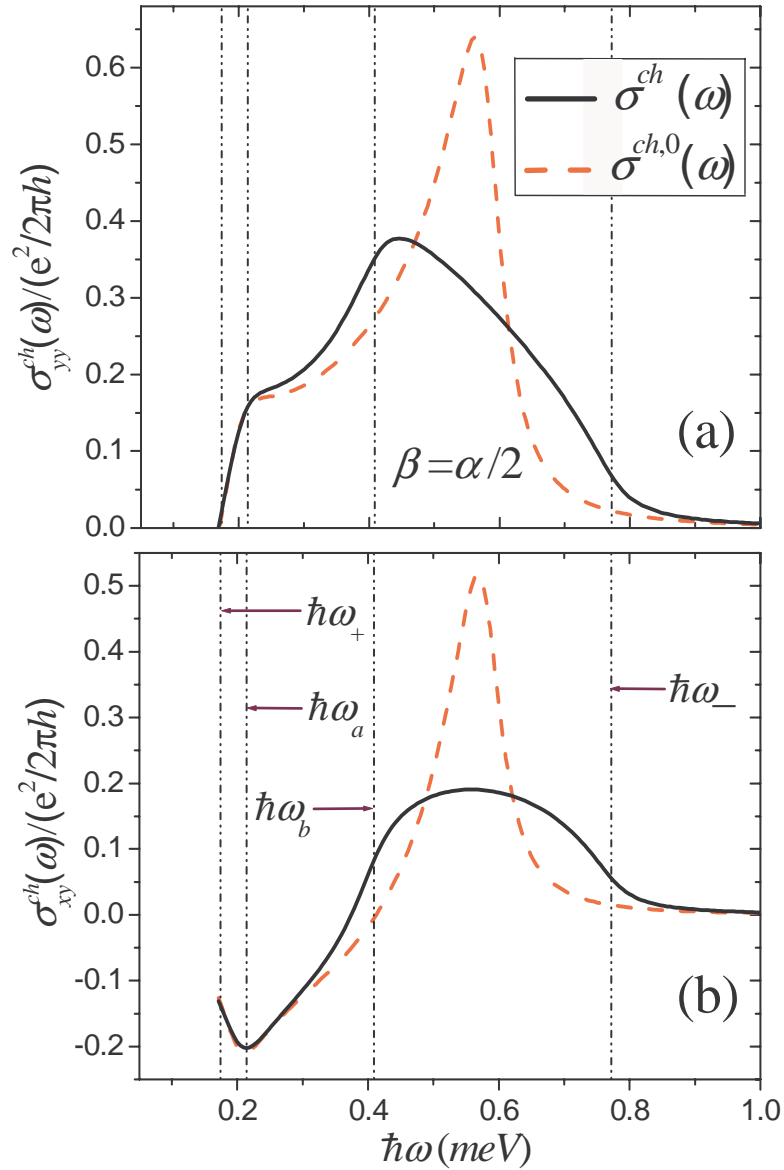


Figura 6.5: Conductividad (a) longitudinal y (b) Hall de carga dependiente de la frecuencia para un GH2D en presencia de interacción conjunta Rashba-Dresselhaus ($\beta = 0.5\alpha$). La curvas sólidas corresponden a la conductividad de carga obtenida utilizando la integración numérica de la ecuación(6.12) y las curvas discontinuas corresponden a las fórmulas analíticas (6.13) obtenidas en el límite $\varepsilon_{SO}/\varepsilon_F \ll 1$. En la figura se muestran las cuatro frecuencias principales, ω_+ , ω_a , ω_b y ω_- . Se observa una buena concordancia entre las curvas sólida y discontinua para frecuencias menores a ω_b .

En la Figura 6.5 (a) y (b) se graficó la conductividad longitudinal y Hall (respectivamente) de carga dependiente de la frecuencia para $\beta = 0.5\alpha$. Las curvas sólidas corresponden a la conductividad de carga obtenida utilizando la integración numérica de la ecuación (6.12) y las curvas discontinuas corresponden a las fórmulas analíticas (6.13) obtenidas en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$. En dicha figura también se muestran las cuatro frecuencias principales, ω_+ , ω_a , ω_b y ω_- . Se observa una buena concordancia entre las curvas sólida y discontinua para frecuencias menores a ω_b , y en este intervalo de frecuencias, la medida experimental del tensor de conductividad de carga nos permiten estimar la conductividad de espín a través de las fórmulas (6.8), (6.9) y (6.13).

Mas aún, las frecuencias características ω_+ , ω_a , ω_b y ω_- son, en principio, medibles experimentalmente a través del espectro de conductividad de carga. Una vez que se obtienen tales frecuencias, pueden ser utilizadas para estimar la intensidad de los parámetros de acoplamiento α y β mediante las expresiones,

$$\alpha\Theta(\alpha - \beta) + \beta\Theta(\beta - \alpha) = \frac{\hbar}{8k_F^3}(\omega_+ + \omega_a + \omega_b + \omega_-) \quad (6.16)$$

$$\beta\Theta(\alpha - \beta) + \alpha\Theta(\beta - \alpha) = \frac{\hbar^2}{6k_F m^*} \frac{(\omega_+ + \omega_-) - (\omega_a + \omega_b)}{(\omega_+ + \omega_-) + (\omega_a + \omega_b)} \quad (6.17)$$

Éstas expresiones se obtienen a partir de las ecuaciones (6.14) y (6.15) en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$. Claramente resulta necesario saber si $\alpha > \beta$ o viceversa para el GE2D en particular. Sin embargo, esta información puede ser obtenida a través de la ecuación (6.16). Como es sabido el parámetro α varía proporcionalmente a la densidad de

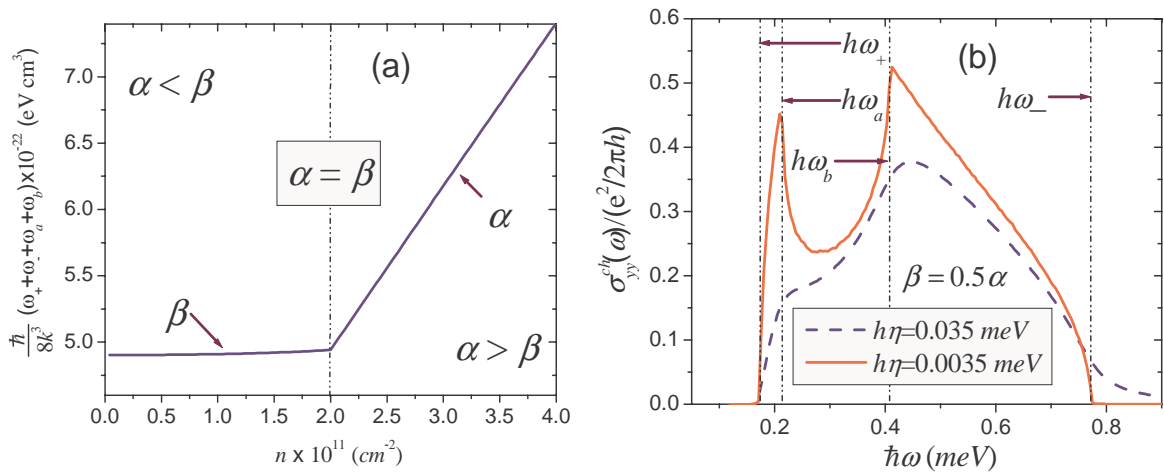


Figura 6.6: (a) Gráfica de $\frac{\hbar}{8k_F^3}(\omega_+ + \omega_a + \omega_b + \omega_-)$ como función de la densidad de huecos n . Puede observarse una variación lineal con la densidad cuando $\alpha > \beta$, mientras que en el caso opuesto ($\alpha < \beta$) prácticamente no existe tal variación. Lo anterior obedece a la dependencia en la densidad que posee el parámetro α , no así el parámetro β . Esta información puede ser útil para identificar cual de los dos acoplamiento domina. (b) Conductividad longitudinal de carga para valores diferentes del parámetro η . Puede observarse una variación del orden del 8% entre la posición de las frecuencias características, a medida que $\hbar\eta$ cambia de 0.035 meV a 0.0035 meV, lo cual hace confiable la estimación de los parámetros de acoplamiento espín-órbita a través de las frecuencias características.

huecos n (Véase el Capítulo 2), mientras que β permanece constante.

En la figura 6.6 (a) se graficó el término $\frac{\hbar}{8k_F^3}(\omega_+ + \omega_a + \omega_b + \omega_-)$ como función de la densidad de huecos n . Puede verse que para valores de n tales que $\alpha < \beta$, dicha gráfica muestra un comportamiento constante a medida que aumenta la densidad, lo cual indicaría experimentalmente que el parámetro de acoplamiento que se está midiendo es β . A su vez, en la región en la que $\alpha > \beta$ se observa una variación lineal del término $\frac{\hbar}{8k_F^3}(\omega_+ + \omega_a + \omega_b + \omega_-)$ respecto de n , lo cual indicaría experimentalmente que el parámetro de acoplamiento que se está midiendo es α . A modo de referencia se ubicó una línea vertical en punto en el que $\alpha = \beta$.

En la figura 6.6 (b) se estudió la variación de la posición de los picos característicos,

al variar el parámetro η de $\hbar\eta_1 = 0.035 \text{ meV}$ a $\hbar\eta_2 = 0.0035 \text{ meV}$. La variación relativa $(\omega_{+,-,a,b}^{\eta_1} - \omega_{+,-,a,b}^{\eta_2})/\omega_{+,-,a,b}^{\eta_1}$ es del orden del 8%, por lo que, aunque el valor de η recorre la posición de las frecuencias características, este corrimiento es mínimo, lo cual hace muy precisa la estimación de α y β mediante las fórmulas (6.16).

Por último en la figura 6.7 (a) se graficó la conductividad longitudinal de carga para los valores específicos $\alpha/\beta = 0.5, 1$ y $3/2$. Nótese que para valores tales que $\beta \geq \alpha$, la diferencia entre los picos característicos ω_+ y ω_b es casi imperceptible. Esto se enfatiza en la figura 6.7 (b) donde se muestra un mapa de contornos de la conductividad longitudinal de carga a.c. como función de la frecuencia de excitación ω y la razón α/β . Para valores tales que $\beta < \alpha$, el pico en ω_b es más notorio.

Debido a la forma complicada del término de acoplamiento de Dresselhaus propuesto por Winkler (ecn. (2.12)) el estudio de la conductividad de carga y de espín para un GH2D en presencia de acoplamiento espín-órbita Rashba y Dresselhaus resulta imposible de realizar de manera analítica. Por tal motivo, sólo puede desarrollarse un estudio numérico. En la figura 6.8 (a) y (b) se muestra la conductividad Hall de espín y la conductividad longitudinal de carga respectivamente, empleando el término (2.12), para un GH2D basado en *InAs*. En éstas gráficas se consideró una densidad de huecos de $n = 1.2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, con una correspondiente energía de Fermi de $\varepsilon_F = 0.7 \text{ meV}$. Al calcular los parámetros de acoplamiento espín-órbita mediante las expresiones (2.7) y (2.13), los valores numéricos obtenidos son: $\alpha = 1.06 \times 10^{-22} \text{ eVcm}^3$, $\beta_1 = 1.32 \times 10^{-10} \text{ eVcm}$, $\beta_2 = 1.66 \times 10^{-22} \text{ eVcm}^3$ y $\beta_3 = 2.05 \times 10^{-22} \text{ eVcm}^3$ (tablas 2.1 y 2.2).

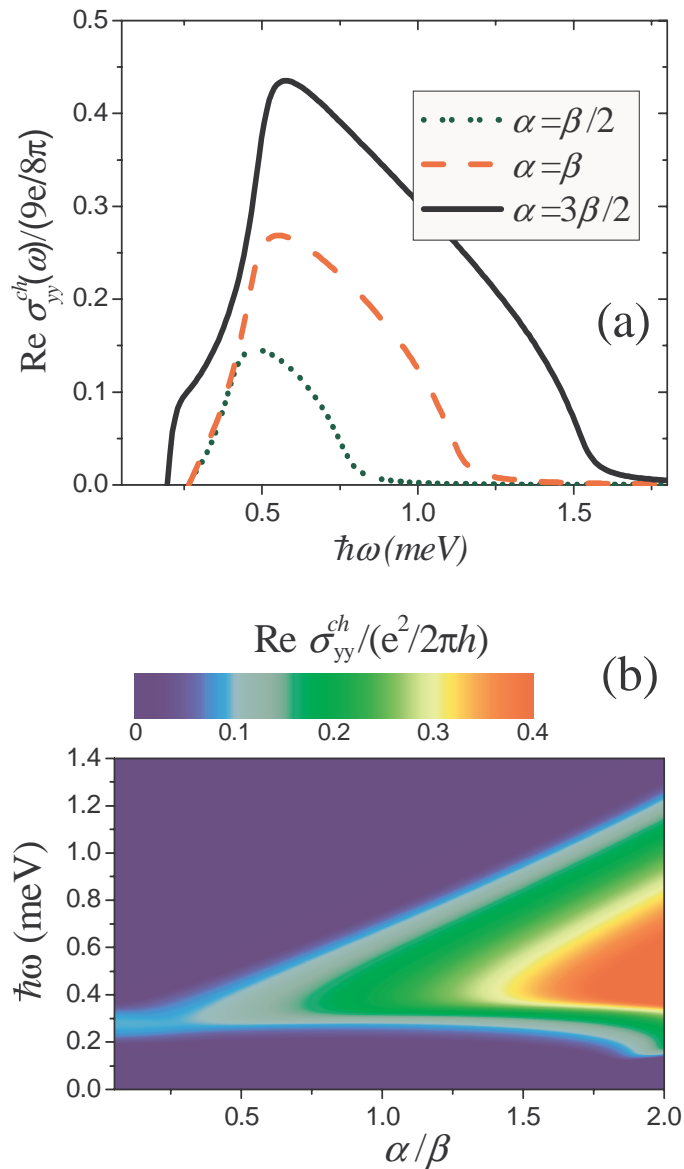


Figura 6.7: (a) Conductividad longitudinal de carga para $\alpha/\beta = 0.5, 1, 3/2$ (curvas verde, rojo y negro respectivamente). Los parámetros utilizados son idénticos a los de la Figura 6.3. Nótese que para valores tales que $\beta \geq \alpha$, la diferencia entre los picos característicos ω_+ y ω_b es casi imperceptible. (b) Mapa de contornos de la conductividad longitudinal de carga a.c., mostrando su comportamiento con una variación continua de la frecuencia ω y la proporción α/β .

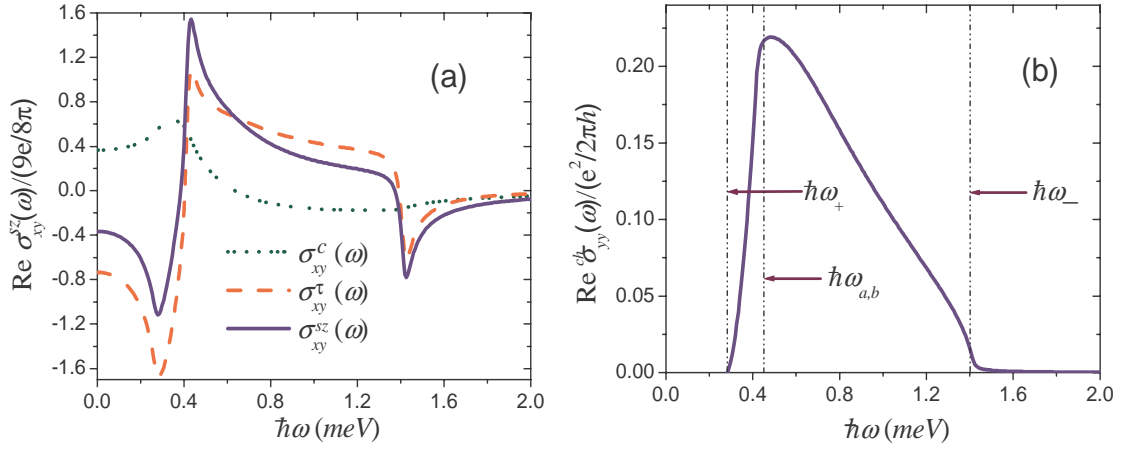


Figura 6.8: (a) Conductividad Hall de espín y (b) Conductividad longitudinal de carga, para un GH2D basado en *InAs*, en presencia de interacción conjunta Rashba y Dresselhaus, utilizando el término propuesto por Winkler, ecn. (2.12). Véase el texto para los parámetros utilizados.

Para la conductividad Hall de espín (figura 6.8 a) se observa una vez más que el operador conservado de corriente de espín modifica el espectro respecto al operador convencional. En ambas figuras (6.8 a y b) se observa la presencia de tres frecuencias características. Esto se puede explicar en términos del diagrama de desdoblamiento anisotrópico de las bandas de espín en el espacio k mediante la figura 6.9. Puede verse en dicha figura que existe una energía tal que la correspondiente curva $C_r(\omega)$ toca de manera simultánea los puntos $k_{F,-}(\pi/4)$ y $k_{F,+}(3\pi/4)$, los cuales dan lugar a las frecuencias ω_a y ω_b respectivamente, de modo tal que dichas frecuencias características se presentan, en el espectro óptico de conductividad, a la misma energía de excitación (señalada como $\omega_{a,b}$ en la figura 6.8 b). A causa de la complejidad del Hamiltoniano (2.12), resulta imposible estimar analíticamente la posición de las frecuencias características.

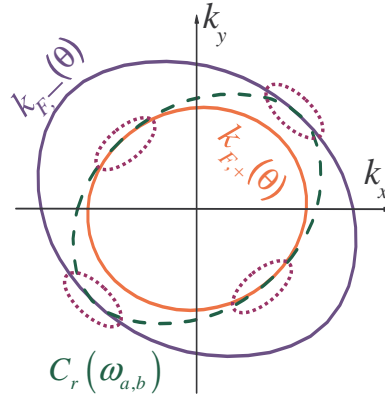


Figura 6.9: Diagrama del desdoblamiento anisotrópico de las bandas de espín en el espacio k a la energía de Fermi, considerando un sistema basado en $InAs$, para el Hamiltoniano conjunto Rashba más Dresselhaus, empleando el término de Dresselhaus propuesto por Winkler, ecn. (2.12). Nótese que a la frecuencia $\omega_{a,b}$, la curva C_r toca a la vez los puntos $k_{F,-}(\pi/4)$ y $k_{F,+}(3\pi/4)$, de modo tal que las frecuencias ω_a y ω_b se presentan, en el espectro óptico de conductividad, a la misma energía de excitación

En resumen, el estudio del SHE para un GH2D con acoplamiento Rashba y Dresselhaus muestra que, similarmente para el caso de los electrones, el espectro óptico de la conductividad Hall de espín cambia substancialmente al emplear el operador conservado de corriente de espín, y que la magnitud y la dirección de la corriente Hall de espín son sensibles a la frecuencia de excitación y a la intensidad de las constantes de acoplamiento. Además para el caso de huecos pesados fue posible establecer una conexión entre la conductividad de carga y la conductividad de espín (en el límite $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F \ll 1$, que en principio permitiría medir experimentalmente la corriente de espín de huecos pesados. También se obtuvo una expresión analítica mediante la cual se puede estimar experimentalmente las magnitudes de las constantes de acoplamiento espín-órbita a través de la medida de las frecuencias características del espectro óptico de la conductividad de carga.

Capítulo 7

Conclusiones

En el presente proyecto de tesis se realizó un estudio teórico de las propiedades de transporte de carga y espín en gases de electrones y huecos pesados confinados en hetero-estructuras semiconductoras. En particular se estudió el efecto Hall de espín para sistemas con fuerte interacción espín-órbita (Rashba y Dresselhaus). Se puso énfasis en las conductividades de carga y espín en presencia de un campo eléctrico a.c. dentro del régimen de respuesta lineal del formalismo de Kubo. El presente estudio contempló los efectos en las propiedades de transporte producidos al emplear una definición del operador de corriente de espín alternativa a la convencional, la cual satisface la ecuación de continuidad en sistemas con acoplamiento espín-órbita y que está dada como la derivada temporal del desplazamiento de espín, $\mathcal{J} = \frac{d}{dt}(\hat{\mathbf{r}}\hat{s}_z)$.

Para ambos tipos de portadores de carga (electrones y huecos), se hizo una deducción sistemática de las expresiones exactas de la conductividad Hall de espín como función de la frecuencia del campo eléctrico aplicado. Dichas expresiones quedan en términos de integrales radiales y angulares (en el espacio k), las cuales sólo es posible integrar de manera exacta numéricamente. Dado que la energía espín-órbita característica (ε_{so}) asociada a cada tipo de portador de carga es siempre mucho menor a la energía de Fermi (ε_F) para semiconductores típicos III-V con estructura cristalina

tipo zincblenda, una expansión de las expresiones exactas de la conductividad de espín en series de Taylor truncada a primer orden en $\varepsilon_{so}/\varepsilon_F$ da lugar a la obtención de fórmulas analíticas simples de gran utilidad que permiten estimar la conductividad de espín como función de la frecuencia de absorción. Las gráficas de las fórmulas de la conductividad de carga y espín presentan una buena concordancia con las correspondientes expresiones integradas numéricamente, y su sencillez se espera facilite el estudio experimental de transporte de carga y espín de este tipo de sistemas.

Se observó que de manera general, el espectro óptico de la conductividad Hall de espín cambia drásticamente cuando se emplea la definición conservada del operador de corriente de espín, debido primordialmente a las contribuciones de torca de espín a la corriente total de espín. Mediante estos resultados es posible predecir que la contribución de torca de espín a la corriente a.c. generalmente domina sobre la corriente de espín convencional en muestras típicas. Por otro lado, el espectro óptico de la conductividad Hall de espín tanto de electrones como de huecos pesados, presenta frecuencias características definidas por ciertas transiciones permitidas entre subbandas de espín. En presencia de un solo tipo de acoplamiento (ya sea Rashba o Dresselhaus), aparecen dos picos relacionados con la energía fotónica mínima y máxima requeridas para inducir transiciones ópticas entre dichas subbandas, dada la isotropía angular en el espacio k de la relación de dispersión correspondiente. Al incluir la interacción simultánea de ambos tipos de acoplamiento espín-órbita (Rashba y Dresselhaus), la anisotropía angular existente en la relación de dispersión tanto de electrones como de huecos pesados, da lugar a la aparición de cuatro frecuencias distintivas relacionadas

con transiciones intrabanda a lo largo de las direcciones (1,1) y (-1,1) en el espacio k , posiciones en las cuales los contornos de Fermi $k_{F,+}(\theta)$ y $k_{F,-}(\theta)$ presentan la menor y la mayor separación respectivamente. Para dichas frecuencias distintivas fue posible obtener expresiones analíticas, las cuales dependen del número de onda de Fermi, la masa efectiva del material y la magnitud de las constantes de acoplamiento. Mediante éstas expresiones se puede ubicar la posición de las frecuencias características en el espectro óptico de la conductividad y guiar los parámetros físicos a utilizar en un experimento dado.

De manera adicional se estudió la variación de la conductividad Hall de espín como función de las constantes de acoplamiento (Rashba y/o Dresselhaus), encontrando una fuerte correlación entre la magnitud y la dirección de la corriente Hall de espín dinámica, la frecuencia del campo aplicado y el valor relativo de las constantes de acoplamientos espín-órbita, tanto para electrones como para huecos pesados. Esto implica que tanto la frecuencia de excitación, como los parámetros de acoplamiento (de los cuales la constante de Rashba se puede manipular mediante voltajes externos) son variables físicas importantes que permiten la manipulación del efecto Hall de espín con miras a la construcción de dispositivos espintrónicos.

Particularmente para el caso de electrones fue posible extraer una expresión analítica simple que modela la conductividad Hall de espín en el límite d.c. como función del tiempo promedio de relajación entre colisiones con impurezas. En dicha expresión, de manera natural aparece el tiempo de relajación debido a interacciones espín-órbita

deducido por D'yakonov y Perel'. La importancia de tal expresión radica en el hecho de que permite caracterizar el grado de impurezas en un material, a través de la medición experimental de la conductividad Hall de espín d.c. a bajas temperaturas.

Por otro lado, para el caso de los huecos pesados también se obtuvo el espectro de la conductividad de carga, así como expresiones analíticas de la misma en el régimen $(\varepsilon_{so}/\varepsilon_F) \ll 1$. Dentro de éste régimen se logró relacionar la conductividad de carga con la conductividad de espín. Tal conexión sugiere la posibilidad de medir experimentalmente tanto las conductividades de espín como la corriente total de espín a.c. de huecos pesados por medios eléctricos. Además de ello, se obtuvo una expresión analítica mediante la cual se puede estimar experimentalmente las magnitudes de las constantes de acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus a través de la medida de las frecuencias características del espectro óptico de la conductividad de carga.

En general, se espera que estos resultados impulsen el estudio experimental del efecto Hall de espín en el régimen de frecuencia finita y explorar a qué nivel el operador conservado de corriente de espín provee de una descripción satisfactoria de la conductividad de espín en sistemas con acoplamiento espín-órbita. Los resultados presentados en el capítulo 5 han sido publicados en Physical Review B [Wong *et al.*, PRB **77**, 035304 (2008)], mientras que ya se tiene el borrador del artículo correspondiente a los resultados del capítulo 6. Por su parte, se espera también que el presente trabajo de tesis motive a otro tipo de estudios tales como la variación de la conductividad de espín como función del vector de onda, el estudio de la conductividad de

espín en el régimen de frecuencia finita en otros sistemas tales como el grafeno, y que eventualmente se logre el diseño y la construcción de dispositivos espintrónicos basados en el efecto Hall de espín que empleen los resultados aquí evidenciados.

Apéndice A

Funciones de Correlación corriente de espín-corriente de espín

(Véase la sección 3.3, 5.1, 6.1 y 6.3)

En esta sección se derivará el valor esperado de la función de correlación corriente de espín-corriente de carga para electrones (sección 5.1), $\langle \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) | [\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)] | \psi_{\mathbf{k},\mu}(\mathbf{r}) \rangle \equiv \mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t)$. El cálculo de dicha función de correlación para el caso de huecos pesados (sección 6.1), además de la respectiva función de correlación corriente de carga-corriente de carga (secciones 3.3 y 6.3) resulta análogo.

Primero, se escribe el operador de corriente de espín al tiempo t en el esquema de interacción, $\mathcal{J}_x^{S,z}(t) = e^{iH_0t/\hbar} \mathcal{J}_x^{S,z}(0) e^{-iH_0t/\hbar}$, donde H_0 está dado por (2.14) y $\mathcal{J}_x^{S,z}(0)$ por (5.2), es decir:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_x^{S,z}(t) &= e^{iH_0t/\hbar} \left[\frac{\hbar}{2m} \sigma_z p_x + \left\{ \hat{x}, \frac{\beta}{2\hbar} (\sigma_x p_y + \sigma_y p_x) - \frac{\alpha}{2\hbar} (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) \right\} \right] e^{-iH_0t/\hbar} \\ &= e^{iH_0t/\hbar} \frac{\hbar}{2m} \sigma_z p_x e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar} \left\{ \hat{x}, \frac{\beta}{2\hbar} (\sigma_x p_y + \sigma_y p_x) - \frac{\alpha}{2\hbar} (\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) \right\} e^{-iH_0t/\hbar} \\ &\equiv j_c(t) + j_\tau(t) \end{aligned}$$

(A.1)

donde $\{, \}$ denota el anticonmutador. Particularmente para $j_\tau(t)$ note que

$$\begin{aligned} j_\tau(t) &= \left\{ e^{iH_0t/\hbar} \hat{x} e^{-iH_0t/\hbar}, \frac{\beta}{2\hbar} (e^{iH_0t/\hbar} \sigma_x e^{-iH_0t/\hbar} p_y + e^{iH_0t/\hbar} \sigma_y e^{-iH_0t/\hbar} p_x) \right. \\ &\quad \left. - \frac{\alpha}{2\hbar} (e^{iH_0t/\hbar} \sigma_x e^{-iH_0t/\hbar} p_x + e^{iH_0t/\hbar} \sigma_y e^{-iH_0t/\hbar} p_y) \right\} \\ &= \left\{ \hat{x}(t), \frac{\beta}{2\hbar} [\sigma_x(t) p_y + \sigma_y(t) p_x] - \frac{\alpha}{2\hbar} [\sigma_x(t) p_x + \sigma_y(t) p_y] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

donde se ha utilizado el hecho de que $[p_x, H_0] = 0$ y similarmente para p_y . La forma explícita de los operadores $x(t)$, $\sigma_x(t)$ y $\sigma_y(t)$, se puede obtener a través de la identidad

$$e^{xA} B e^{-xA} = B(0) + \frac{x}{1!} [A, B] + \frac{x^2}{2!} [A, [A, B]] + \frac{x^3}{3!} [A, [A, [A, B]]] + \dots \quad (\text{A.3})$$

donde A y B son operadores y x es un escalar. Utilizando las relaciones de conmutación,

$$[H_0, x] = -i\hbar \left(\frac{p_x}{m^*} + \frac{\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x}{\hbar} \right) \quad (\text{A.4})$$

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\sigma_k \quad (\text{con } i, j, k = x, y, z) \quad (\text{A.5})$$

$$[H_0, \sigma_z] = 2i \left(\sigma_x \frac{\alpha p_x - \beta p_y}{\hbar} - \sigma_y \frac{\beta p_x - \alpha p_y}{\hbar} \right) \quad (\text{A.6})$$

$$[H_0, [H_0, \sigma_z]] = 4 \frac{\Delta^2 p^2}{\hbar^2} \sigma_z \quad (\text{A.7})$$

después de largas manipulaciones algebraicas, se obtiene para $x(t)$, $\sigma_x(t)$ y $\sigma_y(t)$,

$$\begin{aligned}
x(t) &= x + \frac{(\alpha^2 - \beta^2)p_y}{2\hbar^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2it}{\hbar}\right)^{2n} \frac{(\Delta^2 p^2 / \hbar^2)^{n-1}}{(2n)!} \left[i\sigma_z - \mathcal{K} \frac{2it/\hbar}{2n+1} \right] \\
&\quad + t \left(\frac{p_x}{m^*} + \frac{\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x}{\hbar} \right) \\
\sigma_x(t) &= \sigma_x - \frac{(\alpha p_x - \beta p_y)}{\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2it}{\hbar}\right)^{2n-1} \frac{(\Delta^2 p^2 / \hbar^2)^{n-1}}{(2n-1)!} \left[i\sigma_z - \mathcal{K} \frac{2it/\hbar}{2n} \right] \\
\sigma_y(t) &= \sigma_y + \frac{(\beta p_x - \alpha p_y)}{\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{2it}{\hbar}\right)^{2n-1} \frac{(\Delta^2 p^2 / \hbar^2)^{n-1}}{(2n-1)!} \left[i\sigma_z - \mathcal{K} \frac{2it/\hbar}{2n} \right]
\end{aligned} \tag{A.8}$$

con $\mathcal{K} = \alpha(\sigma_x p_x + \sigma_y p_y) - \beta(\sigma_x p_y + \sigma_y p_x)$. Al evaluar las sumatorias correspondientes, las expresiones anteriores se pueden finalmente escribir como,

$$\begin{aligned}
x(t) &= x(0) + t \left(\frac{p_x}{m} + \frac{\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x}{\hbar} \right) + \frac{\hbar}{2\Delta^2 p^2} (\beta^2 - \alpha^2) p_y \sigma_z \left[\cos\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) - 1 \right] \\
&\quad - \frac{\hbar}{2\Delta^3 p^3} (\beta^2 - \alpha^2) p_y \left[\frac{2t\Delta p}{\hbar^2} - \sin\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) \right] \mathcal{K}, \\
\sigma_x(t) &= \sigma_x(0) + \frac{(\alpha p_x - \beta p_y)}{\Delta p} \sigma_z \sin\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) - \frac{(\alpha p_x - \beta p_y)}{\Delta^2 p^2} \left[\cos\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) - 1 \right] \mathcal{K}, \\
\sigma_y(t) &= \sigma_y(0) - \frac{(\beta p_x - \alpha p_y)}{\Delta p} \sigma_z \sin\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) - \frac{(\beta p_x - \alpha p_y)}{\Delta^2 p^2} \left[\cos\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2} t\right) - 1 \right] \mathcal{K}
\end{aligned} \tag{A.9}$$

en las cuales $\boldsymbol{\sigma}$ y \mathbf{p} están escritos en el esquema de Schrödinger. Las expresiones anteriores son necesarias en el cálculo del conmutador $[\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)]$ el cual da como resultado

$$\begin{aligned}
[\mathcal{J}_x^{S,z}(t), v_y(0)] &= \frac{(\alpha\sigma_x + \beta\sigma_y)}{2m^*} e^{iHt/\hbar} \sigma_z p_x e^{-iHt/\hbar} \\
&\quad - e^{iHt/\hbar} \sigma_z p_x e^{-iHt/\hbar} \frac{(\alpha\sigma_x + \beta\sigma_y)}{2m^*} + i\{x(0), \mathcal{L}\} + \frac{2itp_x}{m^*} \mathcal{L} \quad (\text{A.10})
\end{aligned}$$

con $\mathcal{L} = \frac{\Delta p}{\hbar^2}(\alpha\sigma_y - \beta\sigma_x) \sin\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2}t\right) + \frac{\sigma_z}{\hbar^2} \mathcal{P} \cos\left(\frac{2\Delta p}{\hbar^2}t\right)$ y $\mathcal{P} = 2\alpha\beta p_x - (\alpha^2 + \beta^2)p_y$.

Al calcular el valor de expectación de (A.10) utilizando (2.16) obtenemos finalmente

$$\mathcal{F}_\mu(\mathbf{k}, t) = i\mu \frac{\hbar k_x^2 (\beta^2 - \alpha^2)}{m^* k \Delta(\theta)} \left[\cos\left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}t\right) - \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar} t \sin\left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}t\right) \right] \quad (\text{A.11})$$

tal y como se definió en la ecuación (5.3).

Referencias

- [1] Das Sarma S. 2001, *Spintronics*. American Scientist, **89**:516.
- [2] Semiconductor Industry Association. 2003, *International Technology Roadmap for Semiconductors*. <http://www.itrs.net>
- [3] Prinz G. A. 1998, *Magnetoelectronics*. Science **282**:1660.
- [4] Awschalom D. D., Flatté M. E. & Samarth N. 2002, *Spintronics*. Scientific American Latinoamericana, Agosto:58.
- [5] Kikkawa J. M., Smorchkova I. P., Samarth N. & Awschalom D. D. 1997, *Room-temperature spin memory in two-dimensional electron gases*. Science **277**:1284.
- [6] Awschalom D. D. & Kikkawa J. M. 1999, *Electron Spin and Optical Coherence in Semiconductors*. Physics Today **52**:33.
- [7] Lou X., Adelman C., Crooker S. A., Garlid E. S., Zhang J., Madhukar K. S., Flexner S. D., Palmström C. J. & Crowell P. A. 2007, *Electrical detection of spin transport in lateral ferromagnet-semiconductor devices*. Nature Phys. **3**:197.

- [8] Wolf S. A., Awschalom D. D., Buhrman R. A., Daughton J. M., Von Molnr S., Roukes M. L., Chtchelkanova A. Y., & Treger D. M. 2001, *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future*. Science **294**:1448.
- [9] Baibich M. N., Broto J. M., Fert A., Nguyen van Dau F., Petroff F., Eitenne P., Creuzet A., Friederich A. & Chazeles J. 1988, *Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattice*. Phys. Rev. Lett. **61**:2472.
- [10] Binasch G., Grünberg P., Saurenbach F. & Zinn W. 1989, *Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange*. Phys.Rev. B **39**:4828.
- [11] Chappert C., Fert A. & Van Dau F. N. 2007, *The emergence of spin electronics in data storage*. Nature Materials **6**:813.
- [12] Fert A. & Campbell I. 1976, *Electrical resistivity of ferromagnetic nickel and iron based alloys*. J. Phys. F **6**:849.
- [13] Datta S. & Das B. 1990, *Electronic analog of the electro-optic modulator*. Appl. Phys. Lett. **56**:665.
- [14] Mireles F. & Kirczenow G. 2001, *Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*. Phys. Rev. B **64**:24426.
- [15] Dresselhaus G. 1955, *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*. Phys. Rev. **100**:580.

- [16] Bychkov Y. A. & Rashba E. I. 1984, *Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers*. J. Phys. C **17**:6039.
- [17] Schliemann J., Egues J.C., & Loss D. 2003, *Nonballistic spin-field-effect transistor*. Phys. Rev. Lett **90**:146801.
- [18] Pala M.G., Governale M., König J., Zülicke U. & Iannaccone G. 2004, *Two-dimensional hole precession in all-semiconductor spin field effect transistor*. Phys. Rev. B **69**:045304.
- [19] Flatté M. E., Yu Z. G., Johnston-Halperin E. & Awschalom, D. D. 2003, *Theory of semiconductor magnetic bipolar transistors*. Appl. Phys. Lett. **82**:4740.
- [20] Awschalom D. D. & Flatté M. E. 2007, *Challenges for semiconductor spintronics*. Nature Physics **3**:153.
- [21] Jullière M. 1975, *Tunneling between ferromagnetic films*. Phys. Lett. A **54**:225.
- [22] Slonczewski J. 1996, *Current-driven excitation of magnetic multilayers*. J. Magn. Magn. Mater. **159**:L1.
- [23] Berger L. 1996, *Emission of spin waves by a magnetic multilayer traversed by a current*. Phys. Rev. B **54**:9353.
- [24] Yamanouchi M., Chiba D., Matsukura F. & Ohno, H. 2004, *Current-induced domain-wall switching in a ferromagnetic semiconductor structure*. Nature **428**:539.

- [25] Ohno H., Chiba D., Matsukura F., Omiya T., Abe E., Dietl T., Ohno Y. & Ohtani K. 2000, *Electric-field control of ferromagnetism*. Nature **408**:944.
- [26] Chiba D., Yamanouchi M., Matsukura F. & Ohno H. 2003, *Electrical manipulation of magnetization reversal in a ferromagnetic semiconductor*. Science **301**:943.
- [27] Beschoten B., Crowell P. A., Malajovich I. & Awschalom D. D. 1999, *Magnetic circular dichroism studies of carrier-induced ferromagnetism in $Ga_{1-x}Mn_xAs$* . Phys. Rev. Lett. **83**:3073.
- [28] Kikkawa J. M. & Awschalom, D. D. 1998, *Resonant spin amplification in n-type GaAs*. Phys. Rev. Lett. **80**:4313.
- [29] Lau W. H. & Flatté M. E. 2002, *Tunability of electron spin coherence in III-V quantum wells*. J. Appl. Phys. **91**:8682.
- [30] Hu C. M., J. Nitta, Jensen A., Hansen J. B., & Takayanagi H. 2001, *Spin-polarized transport in a two-dimensional electron gas with interdigital-ferromagnetic contacts*. Phys, Rev. B **63**:125333.
- [31] Hai P. N., Sakata Y., Yokoyama M., Ohya S. & Tanaka M. 2008, *Spin-valve effect by ballistic transport in ferromagnetic metal (MnAs)/semiconductor (GaAs) hybrid heterostructures*. Phys. Rev. B **77**:214435.

- [32] Schmidt G., Ferrand D. & Molenkamp L. W. 2000, *Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor*. Phys. Rev. B **62**:R4790.
- [33] Ohno H., Shen A., Matsukura F., Oiwa A., Endo A., Katsumoto S. & Iye Y. 1996, *(Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs*. Appl. Phys. Lett. **69**:363.
- [34] Fiederling R., Keim M., Reuscher G., Ossau W., Schmidt G., Waag A. & Molenkamp L. W. 1999, *Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode*. Nature **402**:787.
- [35] Ohno Y., Young D. K., Beschoten B., Matsukura F., Ohno H. & Awschalom D. D. 1999, *Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure*. Nature **402**:790.
- [36] Dietl T., Ohno H., Matsukura F., Cibert J. & Ferrand D. 2000, *Zener Model Description of Ferromagnetism in Zinc-Blende Magnetic Semiconductors*. Science, **287**:1019
- [37] Kato Y. K., Myers R. C., Gossard A. C. & Awschalom D. D. 2004, *Coherent spin manipulation without magnetic fields in strained semiconductors*. Nature **427**:50.
- [38] Koga T., Sekine Y. & Nitta J. 2006, *Experimental realization of a ballistic spin interferometer based on the Rashba effect using a nanolithographically defined square loop array*. Phys. Rev. B **74**:041302.

- [39] Kato Y. K., Myers R. C., Gossard A. C. & Awschalom, D. D. 2004, *Observation of the spin Hall effect in semiconductors*. Science **306**:1910.
- [40] Wunderlich J., Kaestner B., Sinova J. & Jungwirth T. 2005, *Experimental observation of the spin-hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system*. Phys. Rev. Lett. **94**:047204.
- [41] Valenzuela S. O. & Tinkham M. 2006, *Direct electronic measurement of the spin Hall Effect*. Nature (London) **442**:176.
- [42] Stern N. P., Ghosh S., Xiang G., Zhu M., Samarth N. & Awschalom D. D. 2006, *Current-induced polarization and the spin Hall effect at room temperature*. Phys. Rev. Lett. **97**:126603.
- [43] Hankiewicz E. M., Vignale G. & Flatté M. E. 2006, *Spin-Hall effect in a [110] GaAs quantum well*. Phys. Rev. Lett. **97**:266601.
- [44] Chien C.L. & Westgate C.R. 1980, *The Hall Effect and Its Applications*. Plenum, New York. 550 pp.
- [45] D'yakonov M. I. & Perel' V. I. 1971, *Possibility of orienting electron spins with current*. JETP Lett. 13:657.
- [46] Hirsch J. E. 1999, *Spin Hall Effect*. Phys. Rev. Lett. **83**:1834.

- [47] Ganichev S. D., Ivchenko E. L., Belkov V. V., Tarasenko S. A., Sollinger M., Weiss D., Wegscheider W. & Prettl W. 2002, *Spin-galvanic effect*. Nature **417**:153.
- [48] Saitoh E., Ueda M., Miyajima H. & Tataru G. 2006, *Conversion of spin current into charge current at room temperature: Inverse spin-Hall effect*. Appl. Phys. Lett. **88**:182509.
- [49] Seki T., Hasegawa Y., Mitani S., Takahashi S., Imamura H., Maekawa S., Nitta J. & Takanashi K. 2008, *Giant spin Hall effect in perpendicularly spin-polarized FePt/Au devices*. Nature Materials **7**:125.
- [50] Guo G.-Y., Maekawa S. & Nagaosa N. 2009, *Enhanced Spin Hall Effect by Resonant Skew Scattering in the Orbital-Dependent Kondo Effect*. Phys. Rev. Lett. **102**:036401.
- [51] Murakami S., Nagaosa N., & Zhang S. C. 2003, *Dissipationless Quantum Spin Current at Room Temperature*. Science **301**:1348.
- [52] Sinova J., Culcer D., Niu Q., Sinitsyn N. A., Jungwirth T., & MacDonald A. H. 2004, *Universal Intrinsic Spin Hall Effect*. Phys. Rev. Lett. **92**:126603.
- [53] Schliemann J. & Loss D. 2005, *Spin-Hall transport of heavy holes in III-V semiconductor quantum wells*. Phys. Rev. B **71**:085308.
- [54] Sinitsyn N. A., Hill J. E., Min H., Sinova J, & MacDonald A. H. 2006, *Charge and Spin Hall Conductivity in Metallic Graphene*. Phys. Rev. Lett. **97**:106804.

- [55] Sinova J., Murakami S., Shen S.-Q., & Choi M.-S. 2006, *Spin-Hall effect: Back to the beginning at a higher level*. Solid State Commun. **138**:214.
- [56] Sih V., Lau W. H., Myers R. C., Horowitz V. R., Gossard A. C. & Awschalom D. D. 2006, *Generating spin currents in semiconductors with the spin Hall effect*. Phys. Rev. Lett. **97**:096605.
- [57] Sinitsyn N. A., Hankiewicz E. M., Teizer W. & Sinova J. 2004, *Spin Hall and spin-diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling*. Phys. Rev B **70**:081312(R).
- [58] Schliemann J. & Loss D. 2004, *Dissipation effects in spin-Hall transport of electrons and holes*. Phys. Rev. B **69**:165315.
- [59] Raimondi R. & Schwab P. 2005, *Spin-Hall effect in a disordered two-dimensional electron system*. Phys. Rev. B **71**:033311.
- [60] Inoue J. I., Bauer G. E. W., & Molenkamp L. W. 2004, *Suppression of the persistent spin Hall current by defect scattering*. Phys. Rev. B **70**:041303(R).
- [61] Mishchenko E. G., Shytov A. V., & Halperin B. I. 2004, *Spin Current and Polarization in Impure Two-Dimensional Electron Systems with Spin-Orbit Coupling*. Phys. Rev. Lett. **93**:226602.
- [62] Dimitrova O. V. 2005, *Spin-Hall conductivity in a two-dimensional Rashba electron gas*. Phys. Rev. B **71**:245327.

- [63] Khaetskii A. 2006, *Nonexistence of Intrinsic Spin Currents*. Phys. Rev. Lett. **96**:056602.
- [64] Inoue J. I., Kato T., Ishikawa Y., Itoh H., Bauer G. E. W. & Molenkamp L. W. 2006, *Vertex Corrections to the Anomalous Hall Effect in Spin-Polarized Two-Dimensional Electron Gases with a Rashba Spin-Orbit Interaction*. Phys. Rev. Lett. **97**:046604.
- [65] Wang P., Li Y.-Q. & Zhao X. 2007, *Nonvanishing spin Hall currents in the presence of magnetic impurities*. Phys. Rev. B **75**:075326.
- [66] Bernevig B. A. & Zhang S.-C. 2005, *Intrinsic Spin Hall Effect in the Two-Dimensional Hole Gas*. Phys. Rev. Lett. **95**:016801.
- [67] Khaetskii A. 2006, *Intrinsic spin current for an arbitrary Hamiltonian and scattering potential*. Phys. Rev. B **73**:115323.
- [68] Murakami S. 2004, *Absence of vertex correction for the spin Hall effect in p-type Semiconductors*. Phys. Rev. B **69**:241202(R).
- [69] Chalaev O. & Loss D. 2005, *Spin-Hall conductivity due to Rashba spin-orbit interaction in disordered systems*. Phys. Rev. B **71**:245318.
- [70] Grimaldi C., Cappelluti E., & Marsiglio F. 2006, *Spin-Hall Conductivity in Electron-Phonon Coupled Systems*. Phys. Rev. Lett. **97**:066601.

- [71] Wang C. M., Liu S. Y., & Lei X. L. 2006, *Rashba spin-orbit-coupled two-dimensional electron gas under an intense terahertz field: Theoretical calculations*. Phys. Rev. B **73**: 035333.
- [72] Maytorena J. A., López-Bastidas C. & Mireles F. 2006, *Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems*. Phys. Rev. B **74**:235313.
- [73] Yuan D. W., Xu W., Zeng Z. & Lu F. 2005, *Optical spectrum of a spin-split two-dimensional electron gas*. Phys. Rev. B **72**:033320.
- [74] Yang C. H., Xu W., Zeng Z., Lu F., & Zhang C. 2006, *Optical spectrum of a two-dimensional hole gas in the presence of spin-orbit interaction*. Phys. Rev. B **74**:075321.
- [75] Rashba E. I. 2005, *Spin Dynamics and Spin Transport*. J. Supercond. **18**:137.
- [76] Murakami S., Nagaosa N. & Zhang S. C. 2004, *$SU(2)$ non-Abelian holonomy and dissipationless spin current in semiconductors*. Phys. Rev. B **69**:235206.
- [77] Rashba E. I. 2004, *Spin currents, spin populations, and dielectric function of noncentrosymmetric semiconductors*. Phys. Rev. B **70**:161201(R).
- [78] Culcer D., Sinova J., Sinitsyn N. A., Jungwirth T., MacDonald A. H. & Niu Q. 2004, *Semiclassical Spin Transport in Spin-Orbit-Coupled Bands*. Phys. Rev. Lett. **93**:046602.
- [79] www.ph.utexas.edu/~jrshi/spincurrent.pdf

- [80] Shi J., Zhang P., Xiao D., & Niu Q. 2006, *Proper Definition of Spin Current in Spin-Orbit Coupled Systems*. Phys. Rev. Lett. **96**:076604.
- [81] Sun Q.-F. & Xie X. C. 2005, *Definition of the spin current: The angular spin current and its physical consequences*. Phys. Rev. B **72**:245305.
- [82] Jin P.-Q., Li Y.-Q. & Zhang F. C. 2006, *$SU(2) \times U(1)$ unified theory for charge, orbit and spin currents*. J. Phys. A **39**:7115.
- [83] Shen R., Chen Y., Wang Z. D. & Xing D. Y. 2006, *Conservation of spin currents in spin-orbit-coupled systems*. Phys. Rev. B **74**:125313.
- [84] Chen T.-W., Huang C. M. & Guo G. Y. 2006, *Conserved spin and orbital angular momentum Hall current in a two-dimensional electron system with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling*. Phys. Rev. B **73**:235309.
- [85] Li Y. & Tao R. 2007, *Current in a spin-orbit-coupling system*. Phys. Rev. B **75**:075319.
- [86] Yang H.-T. & Liu C. 2007, *Description of spin transport and precession in spin-orbit coupling systems and general equation of continuity*. Phys. Rev. B **75**:085314.
- [87] Shankar R. 1994, *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum. Segunda edición. New York, 676 pp.

- [88] Winkler R. 2003, *SpinOrbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer-Verlag. Primera edición Vol. 191. Berlin, 228 pp.
- [89] Davies J. H. 1998, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge University Press. Primera edición. Cambridge, 438 pp.
- [90] Lassnig R. 1985, *k · p theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures*. Phys. Rev. B **31**:8076;
Efros Al. L. & Rosen M. 1998. *Quantum size level structure of narrow-gap semiconductor nanocrystals: Effect of band coupling*. Phys. Rev. B **58**:7120.
- [91] de Andrada e Silva E. A., LaRocca G.C. & Bassani F. 1994, *Spin-split subbands and magneto-oscillations in III-V asymmetric heterostructures*. Phys. Rev. B **50**:8523
- [92] Chen G. L., Han J., Huang T. T., Datta S. & Janes D. B. 1993, *Observation of the interfacial-field-induced weak antilocalization in InAs quantum structures*. Phys. Rev. B **47**:4084.
- [93] Engels G., Lange J., Schäpers Th. & H. Lüth. 1997, *Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped $In_xGa_{1-x}As/InP$ quantum wells for $B \rightarrow 0$* . Phys. Rev. B **55**:R1958.
- [94] Nitta J., Akazaki T. & Takayanagi H. 1997, *Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ Heterostructure*. Phys. Rev. Lett. **78**:1335.

- [95] Heida J. P., van Wees B. J., Kuipers J. J. & Klapwijk T. M. 1998, *Spin-orbit interaction in a two-dimensional electron gas in a InAs/AlSb quantum well with gate-controlled electron density*. Phys. Rev. B **57**:11911; Schpers Th., Engels G., Lange J., Klocke Th., Hollfelder M. & Lth H. 1998, *Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped $In_xGa_{1-x}As/InP$ quantum wells for $B \rightarrow 0$* . J. Appl. Phys. **83**:4324; Hu C. M., Nitta J., Akazaki T., Takayanagi H., Osaka J., Pfeffer P. & Zawadzki W. 1999, *Zero-field spin splitting in an inverted $In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As$ heterostructure: Band nonparabolicity influence and the subband dependence*. Phys. Rev. B **60**:7736.
- [96] Gerchikov L.G. & Subashiev A. V. 1992, *Spin splitting of size-quantization subbands in asymmetric heterostructures*. Sov. Phys. Semicond. **26**:73.
- [97] Winkler R., Noh H., Tutuc E. & Shayegan M. 2002, *Anomalous Rashba spin splitting in two-dimensional hole systems*. Phys Rev. B **65**:155303.
- [98] Liu C.-X., Zhou B., Shen S.-Q., & Zhu B.-F. 2008, *Current-induced spin polarization in a two-dimensional hole gas*. Phys Rev. B **77**:125345.
- [99] Bulaev D. V. & Loss D. 2005, *Spin Relaxation and Decoherence of Holes in Quantum Dots*. Phys. Rev. Lett. **95**:076805.
- [100] Bruus H. & Flensberg K. 2004, *Many-body Quantum theory in Condensed Matter Physics*. Oxford University Press. Primera edición. New York, 435 pp.

- [101] Wong A., Maytorena J. A. , López-Bastidas C & Mireles F. 2008, *Spin-torque contribution to the ac spin Hall conductivity*. Phys. Rev. B **77**:035304.
- [102] Erlingsson S. I., Schliemann J. & Loss D. 2005, *Spin susceptibilities, spin densities, and their connection to spin currents*. Phys. Rev. B **71**:035319.
- [103] López-Bastidas C., Maytorena J. A., & Mireles F. 2007, *Interplay of the Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling in the optical spin susceptibility of 2D electron systems*. Phys. Status Solidi C **4**:4229.
- [104] Dyakonov M. I. & Perel V. I. 1971, *Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors*. Sov. Phys. Solid State **13**:3023.
- [105] Liu J.-T. & Chang K. 2008, *Proposal for the direct optical detection of pure spin currents in semiconductors*. Phys. Rev. B **78**:113304.
- [106] Zhang P., Wang Z., Shi J., Xiao D. & Niu Q. 2008, *Theory of conserved spin current and its application to a two-dimensional hole gas*. Phys. Rev. B **77**:075304.
- [107] Wong A. & Mireles F. 2009, artículo en preparación.