



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA



LICENCIATURA EN NANOTECNOLOGÍA  
NANOESTRUCTURAS

ESTUDIO DE LA CONDUCTIVIDAD HALL DE ESPÍN  
EN GASES BIDIMENSIONALES DE ELECTRONES  
CON INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE  
LICENCIADA EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:  
ERÉNDIRA SANTANA SUÁREZ

**DIRECTOR DE TESIS**  
DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA

ENSENADA, BAJA CALIFORNIA, ABRIL 2019



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

---

**Eréndira Santana Suárez**

# Resumen

Se realizó un estudio teórico de la conductividad Hall de espín para gases bidimensionales de electrones con interacción espín-órbita. En particular, se estudió los efectos de la interacción espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus (incluyendo su término cúbico) en la conductividad Hall de espín utilizando el formalismo de Kubo en respuesta lineal. Para el caso Rashba y Dresselhaus lineal logramos reproducir expresiones analíticas para la conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia  $\omega$  y en el límite de  $\omega \rightarrow 0$  que coinciden con las reportadas en la literatura. Se verifica que, en ausencia de interacción electrón-electrón y dispersiones por impurezas, en el límite estático ( $\omega \rightarrow 0$ ) la conductividad Hall para el caso Rashba finito en ausencia de Dresselhaus es  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi}$  y que para frecuencias altas el valor de la conductividad Hall de espín tiende a cero. El resultado es idéntico en ausencia de Rashba y Dresselhaus finito. Se verifica que para el límite estático ( $\omega \rightarrow 0$ ) la conductividad Hall de espín para la interacción conjunta Rashba y Dresselhaus lineal es  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} \frac{(\alpha^2 - \beta^2)}{|\alpha^2 - \beta^2|}$  donde  $\alpha$  y  $\beta$  son los parámetros del acoplamiento espín-órbita Rashba y Dresselhaus lineal, respectivamente. Asimismo, para frecuencias altas el valor de la conductividad Hall de espín tiende a cero. Para el caso de la interacción conjunta del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus lineal y cúbico no es posible llegar a una expresión analítica exacta para la conductividad Hall de espín por lo que las integrales se resuelven numéricamente. Sin embargo, para el límite estático ( $\omega \rightarrow 0$ ) se logró obtener una expresión analítica aproximada para la conductividad Hall de espín  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} [1 - \mathcal{X}_\gamma(1 - s_{RD})]$ , donde  $\mathcal{X}_\gamma = \frac{2\alpha\beta}{2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2}$ ,  $k_F$  es el momento asociado a la energía de Fermi y  $s_{RD} = \pm 1$  (con  $s_{RD} = +1$  para  $\alpha > \beta$  y  $s_{RD} = -1$  para  $\alpha < \beta = -1$ ) en el límite  $\beta\gamma k_F^2 \rightarrow 0$  y  $\gamma^2 k_F^4 \rightarrow 0$ , donde  $\gamma$  describe la intensidad de acoplamiento del término cúbico. Al igual que el caso conjunto Rashba y Dresselhaus lineal, el caso  $\alpha > \beta$  (con  $\gamma$  finita) la conductividad Hall tiende a la conductividad universal para frecuencias bajas mientras que para  $\alpha < \beta$  (y  $\gamma$  finita) la conductividad Hall tiende al negativo de la conductividad universal. En ambos casos tiende a cero para frecuencias altas. Al analizar el espectro óptico de la conductividad Hall de espín encontramos que el término cúbico de Dresselhaus ensancha los espectros para transiciones ópticas permitidas.

*Para Rocío, Miguel, Aideé y Angélica.*

# Agradecimientos

No creo que existan en el mundo palabras suficientes para expresar lo agradecida que estoy con mi familia, por inspirarme, apoyarme y por su amor incondicional.

Quiero agradecer a mi madre, Rocío, por darme absolutamente todo lo necesario para estar aquí hoy, por su esfuerzo constante, sus palabras de aliento y de manera muy especial, por enseñarme qué es lo más importante en la vida.

A mi padre, Miguel, por su esfuerzo, por su dedicación y por mostrar siempre su apoyo e interés en mis proyectos. Gracias por sembrar en mí la semilla de la curiosidad y cultivar mi deseo por entender.

A mi hermana Aideé por siempre estar, por ser un ejemplo de esfuerzo, tenacidad y perseverancia, por su compañía a la distancia y por la felicidad que le inyectó a mi vida durante este proyecto.

A mi hermana Angélica, por ser un constante recordatorio de lo importante que es trabajar para dejar un mundo mejor. Por su cariño, por compartir conmigo sus anécdotas y por inspirarme a crecer como persona.

Me gustaría agradecer de forma muy especial al Dr. Francisco Mireles Higuera, por darme la oportunidad de realizar este trabajo de tesis bajo su dirección, por todo lo que me enseñó, por su paciencia y comprensión durante la realización de este trabajo y por los comentarios hechos a éste. Especialmente, me gustaría agradecer por los consejos y por permitirme aprender un poco de lo que le apasiona.

A la Dra. Laura Viana Castrillón y a los Drs. Manuel Herrera Zaldivar, Ramón Carrillo Bastos y José Valenzuela Benavides por aceptar ser parte del jurado, por tomarse el tiempo de leer este trabajo y por sus comentarios oportunos.

A Alejandro, por mostrarme lo maravillosa y fascinante que es la Física, por ayudarme a entender temas que se me dificultaban, por creer en mí siempre y por estar conmigo incluso en

los días grises. Gracias por inspirarme y ayudarme a crecer como persona y por ser mi familia en Ensenada.

A mis compañeros de la Licenciatura. Especialmente, a Mariela, por las palabras de aliento, la compañía y por siempre escuchar; a Rubí, por las pláticas interesantes en las que me contagiaba sus ganas de comerse el mundo; a Keila, por siempre darse tiempo de escucharme, ayudarme y cuidarme; a Laura, por las sonrisas compartidas y por su cálida compañía; a Ricardo, por inspirarme a ser una mejor estudiante; a Óscar, por enseñarme la importancia de tener algo que te apasione en la vida; a Diana y Sergio, por las risas y por procurarme cuando más lo necesité; y a Marina y Mariana por su compañía.

Finalmente, agradezco de manera muy especial a la Universidad Nacional Autónoma de México. Por darme un lugar en sus aulas, por permitirme encontrar lo que me apasiona en la vida y por la enorme cantidad de oportunidades. Gracias por permitirme experimentar la maravillosa sensación de ser universitaria .

# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>II</b>
<b>Dedicatoria</b>	<b>II</b>
<b>Agradecimientos</b>	<b>III</b>
<b>Índice general</b>	<b>VI</b>
<b>Índice de Figuras</b>	<b>x</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Antecedentes: noción de espín . . . . .	1
1.2. Origen de la Espintrónica . . . . .	3
1.3. Corriente de carga y de espín . . . . .	8
1.4. Efecto Hall con espines . . . . .	9
<b>2. Acoplamiento espín-órbita</b>	<b>16</b>
2.1. Acoplamiento espín-órbita: primeros indicios . . . . .	16
2.2. Acoplamiento espín-órbita atómico . . . . .	16
2.3. Acoplamiento espín-órbita en semiconductores . . . . .	20
2.3.1. Acoplamiento espín-órbita de Rashba . . . . .	20
2.3.2. Acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus . . . . .	24
2.3.3. Interacción conjunta de Rashba y Dresselhaus . . . . .	25
2.3.4. Interacción conjunta Rashba y Dresselhaus (lineal y cúbico) . . . . .	27
<b>3. Formalismo de Kubo</b>	<b>30</b>
3.1. Introducción . . . . .	30
3.2. Fórmula general de Kubo . . . . .	30
3.3. Conductividad de carga . . . . .	34
3.3.1. Conductividad de carga: interacción conjunta Rashba y Dresselhaus lineal	38
<b>4. Efecto Hall de espín para electrones</b>	<b>40</b>
4.1. Fórmula de Kubo para la conductividad Hall de espín . . . . .	40

4.2.	Conductividad Hall de espín para el efecto Rashba . . . . .	41
4.2.1.	Discusión de resultados . . . . .	44
4.3.	Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus lineal . . . . .	46
4.3.1.	Discusión de resultados . . . . .	51
4.4.	Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus (3D) . . . . .	53
4.4.1.	Discusión de resultados para InAs . . . . .	57
4.4.2.	Discusión de resultados para AlAs . . . . .	65
<b>5.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>68</b>
<b>6.</b>	<b>Bibliografía</b>	<b>70</b>
<b>A.</b>	<b>Límites de integración</b>	<b>73</b>
<b>B.</b>	<b>Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus cúbico</b>	<b>75</b>
<b>C.</b>	<b>Ancho efectivo del pozo de potencial</b>	<b>79</b>

# Índice de figuras

1.1.	Experimento de Stern-Gerlach. Un haz de átomos de plata neutrales provenientes de un horno pasa por un campo magnético no homogéneo hasta llegar a una placa que graba la forma del haz. El patrón obtenido demuestra la cuantización espacial y, a la vez, el desdoblamiento del patrón en dos componentes, lo que resultó clave para confirmar la existencia del espín en el electrón. [2] . . . . .	2
1.2.	Fenómeno de magnetorresistencia gigante (GMR). El sistema está compuesto de dos capas de un material ferromagnético (naranja) que están separadas por una capa de un material no magnético de menor espesor (azul). a) La magnetización del sistema es paralela, por lo que sólo serán dispersados los electrones con orientación de espín <i>down</i> , mientras que los electrones con orientación de espín <i>up</i> podrán transitar sin ser dispersados, provocando que la resistencia eléctrica disminuya y el foco reciba suficiente corriente eléctrica para encenderse. b) La magnetización del sistema es antiparalela, debido a la dispersión de electrones de conducción, posteriormente los electrones con cualquier orientación de espín serán fuertemente dispersados, por lo que la resistencia eléctrica es mayor y el foco de la figura no se enciende. . . . .	4
1.3.	Esquema del diseño de un <i>spinFET</i> que generalmente está compuesto de una fuente (material ferromagnético), un canal semiconductor y un colector (material ferromagnético). Una corriente eléctrica es inyectada en la fuente, donde los espines adquieren la misma orientación y fluyen a través de canal semiconductor. Los electrones están confinados en un gas bidimensional donde precesan hasta llegar al colector. Si al llegar al colector la orientación de espín es a) la misma que la dirección de magnetización, la corriente de salida aumenta; b) si la magnetización es opuesta, la corriente de salida disminuye. [12] . . . . .	6
1.4.	a) <i>Bits</i> en un sistema clásico, en el que los estados de la partícula pueden tomar valores de 0 ó 1. b) En un sistema cuántico, la partícula tiene superposición coherente, por lo que simultáneamente puede tener valor de 1 y 0. c) Dos partículas cuánticas correlacionadas pueden existir en cuatro estados debido a la superposición coherente de estados y a la correlación entre partículas. [14] . . . . .	8

1.5.	Comparación de la corriente a) eléctrica y la b) de espín. a) La corriente eléctrica se define como un conjunto de electrones que se mueven en la misma dirección, sin importar la orientación de espín que tengan los electrones del flujo. b) La corriente de espín se basa en la orientación de espín. Una corriente pura de espín con orientación <i>up</i> es equivalente a una corriente pura de espín con orientación <i>down</i> en dirección opuesta. [20] . . . . .	9
1.6.	Efecto Hall para portadores de carga negativos. Por fuerza de Lorentz los electrones ( $q=-e$ ) se acumulan en la parte superior de la barra Hall, por lo que la parte inferior de la barra tiene una carga positiva. La diferencia de carga en los extremos de la barra genera una diferencia de potencial conocida como voltaje Hall. [21] . . . . .	10
1.7.	Esquema ilustrativo del efecto Hall anómalo (AHE, por sus siglas en inglés). En este efecto, la barra Hall es de un material ferromagnético, el cual, por su polarización espontánea ( $M$ ) provoca que los electrones de la corriente $I$ se desvíen a diferentes extremos de la barra, según el portador de carga [23] . . . . .	11
1.8.	a) Esquema ilustrativo del efecto Hall cuántico entero (QH). b) Para campos magnéticos fuertes, el valor de la resistencia eléctrica se cuantiza. [23, 24] . . . . .	11
1.9.	Esquema ilustrativo del efecto Hall de espín (SHE): un sistema bidimensional con interacción espín-órbita es atravesado por una corriente eléctrica. Debido a que el acoplamiento espín-órbita genera un campo magnético efectivo, los electrones se desvíen a los extremos del sistema de acuerdo a su orientación de espín. [23] . . . . .	12
1.10.	Observaciones más representativas del efecto Hall de espín realizada por Kato; <i>et al.</i> a) Imágenes bidimensionales de densidad de espín y reflectividad. b) Demostración experimental del efecto Hall de espín mediante microscopía de rotación Kerr. [26] . . . . .	13
1.11.	Experimento de observación Hall de espín para un gas bidimensional de huecos realizado por Sinova, <i>et al.</i> A) Microscopía electrónica de barrido del dispositivo. b) Polarización detectada para un LED y corrientes opuestas. c) Polarización detectada para una corriente fija al usar LED 1 y LED 2. [27] . . . . .	14
2.1.	Modelo semiclásico del acoplamiento espín-órbita. a) En el modelo de Bohr el electrón gira alrededor del núcleo. b) Desde el marco de referencia del electrón, es el núcleo quien gira alrededor de él induciendo un campo magnético efectivo $\mathbf{B}_{ef}$ en dirección al plano normal de la órbita. . . . .	17
2.2.	Polarización de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba para la banda correspondiente a a) $\mathcal{E}_+$ y b) $\mathcal{E}_-$ . . . . .	22

2.3.	Acoplamiento espín-órbita debido al efecto Rashba. a) Dispersión de energía para una partícula libre en un 2DEG. [32] b) Desdoblamiento de la dispersión de energía para un 2DEG con RSOC para la banda $\mathcal{E}_+$ (verde) y $\mathcal{E}_-$ (rojo). [32] c) Espectro de energía para un sistema con RSOC. [32] d) Contornos de Fermi para un sistema con RSOC para la banda $\mathcal{E}_+$ (naranja) y $\mathcal{E}_-$ (azul). . . . .	23
2.4.	Polarización de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus para la banda correspondiente a a) $\mathcal{E}_+$ y b) $\mathcal{E}_-$ . . . . .	25
2.5.	a) Espectro de energía y b) contornos de Fermi para la banda $\mathcal{E}_+$ (azul) y $\mathcal{E}_-$ (naranja) para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus. . . . .	26
2.6.	Polarización de espín para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal a) para la banda $\mathcal{E}_+$ ( $\alpha = \beta$ ), b) para la banda $\mathcal{E}_-$ ( $\alpha = \beta$ ), c) para la banda $\mathcal{E}_+$ ( $\alpha = 0.7, \beta = 0.4$ ) y d) para la banda $\mathcal{E}_+$ ( $\alpha = 0.4, \beta = 0.7$ ) . . . . .	27
2.7.	Polarización de espín para la banda $\mathcal{E}_+$ ( $\alpha = 0.2, \beta = 0.3$ y $\gamma = 0.3$ (unidades adimensionales)) . . . . .	28
3.1.	Conductividad de carga para diferentes valores de $\beta$ y $\alpha$ fijo y $\mathbf{E} = E_y \hat{\mathbf{y}}$ . . . . .	39
4.1.	Curvas para la parte a) real y b) imaginaria de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción espín órbita tipo Rashba. En líneas discontinuas se muestran las energías asociadas a las frecuencias $\omega_+$ y $\omega_-$ . Estas energías representan los límites (mínimo y máximo) energéticos para que una transición óptica sea posible. La energía $\hbar\omega_+$ y $\hbar\omega_-$ corresponde a 5.31 meV y 6.05 meV, respectivamente (ver Figura 4.2). . . . .	45
4.2.	Esquema de transiciones energéticas interbanda de la banda $\mathcal{E}_-$ a la banda $\mathcal{E}_+$ . [18] . . . . .	46
4.3.	Gráficas para la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus lineal para $\beta = 0.50\alpha$ (línea sólida naranja), $\beta = 0.25\alpha$ (línea sólida azul) y $\beta = 0$ (línea sólida amarilla) . . . . .	51
4.4.	Gráficas para la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal para $\beta = 0.25\alpha$ (a y b) y $\beta = 0.50\alpha$ (c y d). En todos los casos $\hbar\omega_+$ se muestra en línea discontinua azul, $\hbar\omega_a$ en línea discontinua gris, $\hbar\omega_b$ en línea punteada gris y $\hbar\omega_-$ en línea punteada azul. . . . .	53

---

4.5.	Gráficas para las aproximaciones de la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus para $\gamma = 0$ (a y b), $\gamma = \gamma_0$ (c y d) y el caso $\beta = \alpha$ con $\gamma = \gamma_0$ (e y f). En todos los espectros, la aproximación mostrada en la ec. (4.83) se muestra en rojo y la mostrada en la ec. (4.85) (las más precisa) en amarillo. En todos los casos las energías importantes ( $\hbar\omega_+$ , $\hbar\omega_-$ , $\hbar\omega_a$ y $\hbar\omega_b$ ) se muestran en líneas punteadas grises. . . . .	59
4.6.	Gráficas para las aproximaciones de la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus cúbico para $\gamma = 0$ (a y b), $\gamma = \gamma_0$ (c y d) y el caso $\alpha = 4\alpha_0$ con $\gamma = \gamma_0$ (e y f). En todos los espectros la aproximación mostrada en la ec. (4.83) se muestra en rojo y la mostrada en la ec. (4.85) (las más precisa) en amarillo. En todos los casos las energías importantes ( $\hbar\omega_+$ , $\hbar\omega_-$ , $\hbar\omega_a$ y $\hbar\omega_b$ ) se muestran en líneas punteadas grises. . . . .	61
4.7.	Gráficas de la parte a) real y b) imaginaria de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus cúbico. Se muestran los espectros para $\gamma = \gamma_0$ (azul), $\gamma = 4\gamma_0$ (naranja), $\gamma = 7\gamma_0$ (verde) y $\gamma = 10\gamma_0$ (rojo). Las curvas se obtuvieron para $\beta = 0.25\alpha$ (a y b), $\beta = 4\alpha$ (c y d). Los espectros obtenidos utilizando la aproximación mostrada en la ec. (4.85) se muestran en línea sólida, mientras que el espectro obtenido usando la aproximación de la ec. (4.83) se muestra en línea discontinua . . . . .	63
4.8.	Espectro de la parte real de la conductividad Hall de espín para el semiconductor AlAs para a) $\alpha_0 = 4.30 \times 10^{-14}$ eVm, $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$ eVm y $\gamma = 0$ , b) $\alpha_0 = 4.30 \times 10^{-14}$ eVm, $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$ eVm y $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$ eVm <sup>3</sup> , c) $\alpha = \beta$ , $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$ eVm y $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$ eVm <sup>3</sup> y d) $\alpha = 0$ , $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$ eVm y $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$ eVm <sup>3</sup> . . . . .	66
A.1.	Esquema de la dispersión de energía del caso Rashba. [18] . . . . .	74

# Capítulo 1

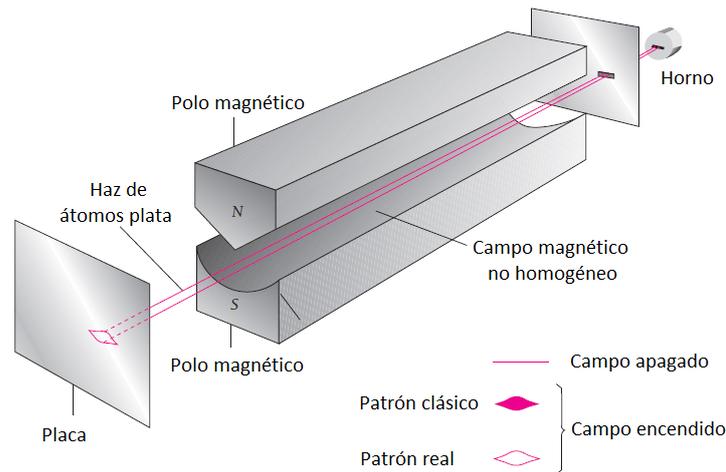
## Introducción

### 1.1. Antecedentes: noción de espín

Las partículas fundamentales como el electrón están caracterizadas por tener una masa, carga eléctrica y una propiedad magnética conocida como *espín*. Esta última propiedad describe su momento magnético intrínseco. La noción de que el electrón posee un espín es atribuida por excelencia a Otto Stern y Walter Gerlach (1921); por su descubrimiento experimental de la cuantización espacial; paradójicamente el objetivo original del experimento en realidad no estaba relacionado con encontrar el espín del electrón. La verdadera intención del experimento de Stern-Gerlach era dilucidar sobre la cuantización espacial asociada al momento angular orbital de los electrones atómicos. De acuerdo con la teoría cuántica desarrollada por Bohr, las componentes espaciales del momento angular y por tanto su momento magnético asociado, únicamente podían tomar valores discretos, por lo que su vector estaría restringido a un número limitado de posibilidades. Para un electrón orbitando en su estado base se tendrían sólo dos valores para el momento magnético:  $\pm \frac{\hbar}{2}$ , donde  $\hbar$  corresponde a la constante reducida de Planck y el valor  $\pm$  corresponde a las dos posibilidades del momento orbital del electrón alrededor del núcleo atómico, ya sea en dirección de las manecillas del reloj o en dirección contraria a ésta. Stern y Gerlach pretendían probar la cuantización espacial usando el hecho de que un electrón orbitante al núcleo atómico daría lugar a un momento magnético, el cual sería proporcional al momento angular orbital del electrón. En principio, medir el momento magnético de un átomo con un número impar de electrones les permitiría comprobar la teoría de Bohr. [2, 3]

El experimento de Stern-Gerlach consistió en dirigir un haz de átomos de plata ( $\text{Ag}^{47}$ ) neutrales (provenientes de un horno a alta temperatura  $\sim 1000^\circ \text{C}$ ) hacia una placa en la que se depositaba la forma del haz colimado de átomos. Entre el horno y la placa, se le hizo atravesar al haz un campo magnético no homogéneo (Figura 1.1). Suponiendo que los átomos de plata tienen un momento magnético no nulo, el campo ejercería una torca en el dipolo magnético, tal que el vector de momento magnético precesara en dirección del campo. Más importante aún

es el hecho de que el campo magnético al no ser uniforme haría que los átomos experimenten una fuerza perpendicular a la dirección del haz. Stern y Gerlach esperaban que los vectores del momento magnético dipolar estuvieran orientados aleatoriamente (debido a los efectos térmicos del horno) en el espacio y se comportaran como momentos magnéticos clásicos, por lo que esperaban observar una línea en la pantalla a lo largo de la dirección del campo magnético; sin embargo, lo que observaron fue que los átomos de plata llegaban a la pantalla en dos puntos, lo que aparentemente confirmaba la teoría discreta de Bohr. [2, 3]



**Figura 1.1:** Experimento de Stern-Gerlach. Un haz de átomos de plata neutrales provenientes de un horno pasa por un campo magnético no homogéneo hasta llegar a una placa que graba la forma del haz. El patrón obtenido demuestra la cuantización espacial y, a la vez, el desdoblamiento del patrón en dos componentes, lo que resultó clave para confirmar la existencia del espín en el electrón. [2]

El error en la interpretación de Stern y Gerlach fue asumir que la plata tenía un momento angular no nulo por su configuración electrónica ( $\text{Ag}^{47}$ ). En realidad, el momento angular de la plata es nulo ( $\text{Ag}^{47} = [\text{Kr}]4d^{10}5s^1$ , en notación moderna), pero existe un momento magnético inherente al electrón (espín) que produce el patrón observado en la placa. El experimento de Stern-Gerlach es de gran importancia ya que es la prueba experimental de la cuantización espacial y, sin saberlo, Stern y Gerlach demostraron la presencia de un momento angular intrínseco (espín), cuya existencia sería propuesta cuatro años más tarde (1925) por Samuel Goudsmit y George Uhlenbeck aunque con el modelo equivocado. [2, 3]

El primer intento por describir el espín del electrón fue hecho por Samuel Goudsmit y George Uhlenbeck en 1925. Ellos propusieron que cada electrón tenía un momento angular intrínseco, llamado espín, cuya magnitud era la misma para todos los electrones y tenía asociado un momento magnético ( $\pm \frac{\hbar}{2}$ ). Su propuesta de espín, consistía en considerar al electrón como una esfera cargada girando en su propio eje. De acuerdo con Goudsmit y Uhlenbeck, la

rotación de la esfera generaría un momento angular y, debido a la carga del electrón, existiría un momento magnético. La existencia del ente propuesto por Goudsmit y Uhlenbeck explicaba adecuadamente algunos efectos atómicos que hasta ese momento no habían sido explicados de forma correcta; sin embargo, al calcular la velocidad a la que debía girar el electrón, se encontró que ésta debía ser mucho más grande que la velocidad de la luz, lo que invalidaba la posibilidad de que su modelo del espín fuera correcto. [2]

A pesar de que la propuesta de Goudsmit y Uhlenbeck era equivocada, la idea de la existencia del espín intrínseco del electrón era correcta. En 1929, el físico británico Paul Adrien Maurice Dirac utilizó las teorías de la mecánica cuántica y las teorías de la relatividad especial de Einstein en forma conjunta para crear una nueva mecánica: la mecánica cuántica relativista. La nueva mecánica tuvo grandes implicaciones, entre las que se encuentran la existencia de la antimateria y la explicación de la naturaleza del espín del electrón. Dirac encontró que una partícula con la masa y la carga del electrón debía poseer un momento angular intrínseco y un momento magnético dado por  $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m}$ , con  $\mu_B$  el momento magnético de Bohr, tal y como lo habían propuesto Goudsmit y Uhlenbeck 4 años atrás. [2]

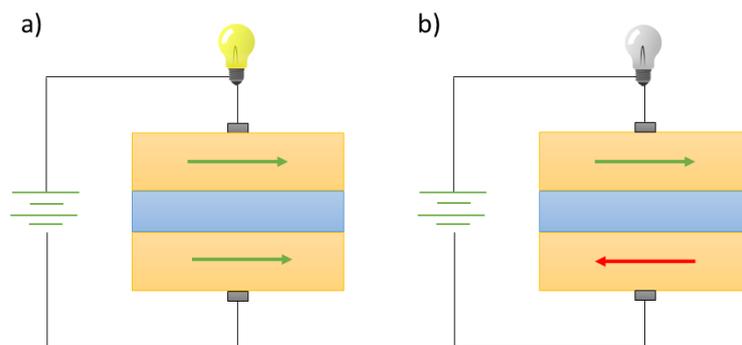
El espín está relacionado directamente con muchos fenómenos físicos, entre los que se encuentra el magnetismo en átomos y materiales, un efecto no trivial que resulta del acoplamiento de los espines electrónicos, el principio de exclusión de Pauli y la naturaleza mecánico-cuántica de los electrones. En particular, si los momentos magnéticos de los átomos de un material están alineados paralelamente con los de los átomos vecinos, se dice que el material es ferromagnético. Esto implica que, a bajas temperaturas, estos materiales tienen una magnetización finita sin estar bajo la presencia de un campo magnético externo. [4]

## 1.2. Origen de la Espintrónica

A finales de los 80s del siglo pasado, se estudió las propiedades de transporte electrónico en películas de hierro (material ferromagnético) separadas por una película delgada de cromo (material no ferromagnético) bajo la presencia de un campo magnético, observándose un cambio significativo en la resistencia eléctrica de la muestra. Este fenómeno fue llamado magnetorresistencia gigante (GMR, por sus siglas en inglés) y su descubrimiento (1988) fue realizado de forma simultánea e independiente por dos grupos de trabajo: Peter Grünberg y colaboradores (Centro de Investigación de Jülich, Alemania) [5] y Albert Fert y su equipo (Universidad de Paris-Sud y Thomson CSF, Francia) [6]. Las observaciones de Grünberg se realizaron en una estructura hecha de una película delgada ( $\sim 1$  nm) de cromo (Cr) que se encontraba entre dos películas de hierro (Fe) de mayor espesor. Para este experimento el cambio en la resistencia

eléctrica en presencia de un campo magnético fue alrededor de 10 %. Por su parte, Fert y su grupo de colaboradores observaron un mayor cambio en la resistencia eléctrica (cerca de 50 %). Su muestra consistía en 60 películas de Fe y Cr alternadas. [7, 1]

En términos de magnetización, la GMR puede ser explicada a través de la probabilidad de dispersión de electrones de conducción en la interfase de la capa ferromagnética. La dispersión depende de la orientación del espín, que le llamaremos *up* o *down*. Se considera que un electrón con orientación de espín *up* en película de cromo puede penetrar una película de hierro sin sufrir dispersión, siempre y cuando la película de hierro esté magnetizada en la misma dirección del espín (en este caso *up*). Ahora bien, si un electrón con orientación de espín *down* quisiera penetrar la película de hierro con magnetización en dirección de orientación de espín *up*, el electrón sería dispersado. Estos es, en su travesía los electrones experimentan una barrera de potencial que depende del espín que posea (*up* o *down*) y de la orientación de la magnetización de las películas de hierro. Cuando la magnetización de las películas de hierro es antiparalela, tanto los electrones con espín *up* como los electrones con espín *down* encontrarán una capa de hierro que esté magnetizada en dirección opuesta, por lo que la probabilidad de dispersión se dará para las dos orientaciones de espín. Por el contrario, si la magnetización de las películas de hierro es paralela (supongamos en dirección *up*), sólo los espines con orientación *down* son dispersados, mientras que los espines con orientación *up* pueden moverse largas distancias sin ser dispersados. Debido a que el camino libre promedio de los espines con orientación *up* es largo, la resistencia total es más pequeña en sistemas con magnetización paralela que en sistemas con magnetización antiparalela. (Figura 1.2). [8, 1]



**Figura 1.2:** Fenómeno de magnetorresistencia gigante (GMR). El sistema está compuesto de dos capas de un material ferromagnético (naranja) que están separadas por una capa de un material no magnético de menor espesor (azul). a) La magnetización del sistema es paralela, por lo que sólo serán dispersados los electrones con orientación de espín *down*, mientras que los electrones con orientación de espín *up* podrán transitar sin ser dispersados, provocando que la resistencia eléctrica disminuya y el foco reciba suficiente corriente eléctrica para encenderse. b) La magnetización del sistema es antiparalela, debido a la dispersión de electrones de conducción, posteriormente los electrones con cualquier orientación de espín serán fuertemente dispersados, por lo que la resistencia eléctrica es mayor y el foco de la figura no se enciende.

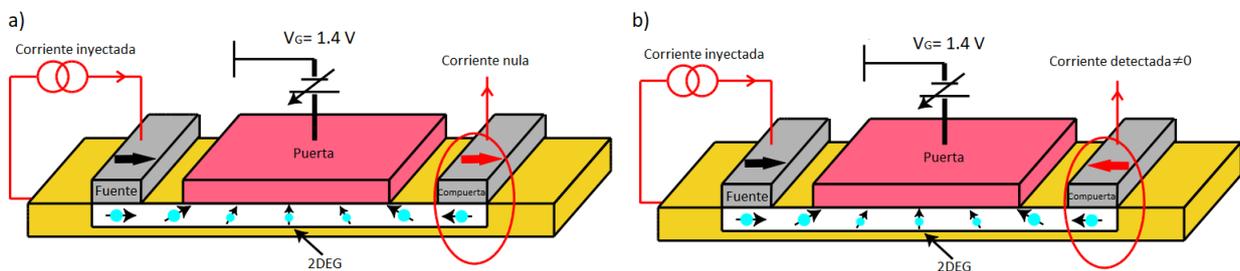
Una de las aplicaciones más importantes de la GMR fue crear una punta magnética que permitiera que las unidades de disco magnético disminuyeran su tamaño y, a la vez, fueran capaces de almacenar una orden de magnitud más información que antes. Dicho trabajo de investigación fue realizado por Stuart Parkin y sus colegas poco después del descubrimiento del efecto GMR. Parkin también mostró que la técnica de “sputtering” es más rápida que la epitaxia de haz molecular para producir dispositivos que utilicen GMR. [7]

Una estructura basada en GMR con múltiples aplicaciones es la válvula de espín, la cual fue propuesta por primera vez en 1994 por el corporativo estadounidense IBM. La válvula de espín está compuesta por dos capas de material ferromagnético separadas por una capa delgada de un metal no magnético. En la válvula de espín, una de las capas ferromagnéticas se “fija” (generalmente utilizando una capa de material antiferromagnético) a la capa no magnética, por lo que su magnetización cambia poco ante la presencia de campos magnéticos moderados. Por su parte, la capa magnética que no se ha “fijado” es denominada “libre” y cambia su magnetización incluso en presencia de campos magnéticos bajos. Anteriormente se explicó el fenómeno de GMR, la resistencia del sistema cambia dependiendo de si la orientación de la magnetización es paralela o antiparalela; para la válvula de espín, el cambio en la resistencia suele ser del 5 % al 10 %. La válvula de espín es utilizada en diferentes aplicaciones, entre las que se encuentran los sensores de campo magnético, las “cabezas” lectoras de discos duros, las memorias de acceso aleatorio magnetorresistivas, entre otros. [13]

En el caso específico de las “cabezas” lectoras de discos duros, el momento magnético de la capa “fija” no cambia, debido a que ha sido fijado por la capa de material antiferromagnético. Por su parte, el momento magnético de la capa “libre” se mueve como consecuencia de las señales magnéticas. Cuando se pasa un campo magnético por debajo de la “cabeza” lectora la dirección del momento magnético de la capa “libre” cambia respecto a la dirección de la capa “fija”, por lo que la resistencia eléctrica del sistema cambia (debido al fenómeno de GMR). [13]

La GMR representa el inicio de un nuevo tipo de tecnología: la Espintrónica. La Espintrónica (término acuñado por Steven A. Wolf en 1996) es la rama de la electrónica que propone manipular y controlar el espín en vez de (o en conjunto con) la carga del electrón, para lograr sensar, almacenar, procesar y transferir información por medio de dispositivos espintrónicos que sean de menor tamaño, operen con mayor rapidez y consuman menos energía que los dispositivos convencionales. [7, 9]

Un ejemplo prometedor de un dispositivo espintrónico basado en materiales semiconductores, en vez de metales como la estructura GMR, es la propuesta teórica hecha por Datta y Das [10] en 1989. En su trabajo, introdujeron un nuevo concepto para un dispositivo semiconductor que actualmente es conocido como transistor de efecto de campo espintrónico (*spinFET* o SFET por sus siglas en inglés). El diseño genérico del *spinFET* se muestra en la Figura 1.3. Como se puede observar, el dispositivo consiste en una heteroestructura de material semiconductor que une dos electrodos de material ferromagnético. En el material ferromagnético (fuente) es inyectado un conjunto de electrones. Debido a la naturaleza del electrodo, los espines adquieren la misma orientación y fluyen a través de un canal semiconductor, donde un campo eléctrico es aplicado de forma perpendicular por un voltaje de puerta ( $V_G$ ). Como consecuencia de la presencia del campo eléctrico ocurre la precesión de espín, es decir, los electrones cambian de orientación: si estaban en una orientación *up* pasarán a *down* y así sucesivamente. La precesión de espín es determinada por la magnitud del campo eléctrico y la longitud del canal, y es gobernada por el efecto espín-órbita del que se hablará más adelante. Finalmente, los espines llegan al segundo electrodo ferromagnético (colector) donde son detectados. Si la dirección de magnetización del colector es la misma que la orientación de espín, la corriente eléctrica de salida es mayor  $I_{det}$  y se dice que el estado es *encendido*. Por el contrario, si la dirección de magnetización del colector es opuesta a la orientación de espín, la corriente de salida es menor (idealmente la corriente de salida sería nula) y el estado es *apagado*. [11-12]



**Figura 1.3:** Esquema del diseño de un *spinFET* que generalmente está compuesto de una fuente (material ferromagnético), un canal semiconductor y un colector (material ferromagnético). Una corriente eléctrica es inyectada en la fuente, donde los espines adquieren la misma orientación y fluyen a través de canal semiconductor. Los electrones están confinados en un gas bidimensional donde precesan hasta llegar al colector. Si al llegar al colector la orientación de espín es a) la misma que la dirección de magnetización, la corriente de salida aumenta; b) si la magnetización es opuesta, la corriente de salida disminuye. [12]

Por su dirección de magnetización, existen dos tipos de *spinFET*: el paralelo (P-ST, por sus siglas en inglés), donde la magnetización de la fuente y el colector es en la misma dirección (Figura 1.3a); y, el antiparalelo (AP-ST, por sus siglas en inglés) donde la magnetización de la fuente es opuesta a la del colector (Figura 1.3b). Supongamos que el canal del material no magnético está diseñado para que cuando  $V_G = 0$  los espines del electrón precesen una fase de  $2\pi$ ; sin embargo, para un  $V_G \neq 0$  la fase de precesión cambia. El cambio en la fase de

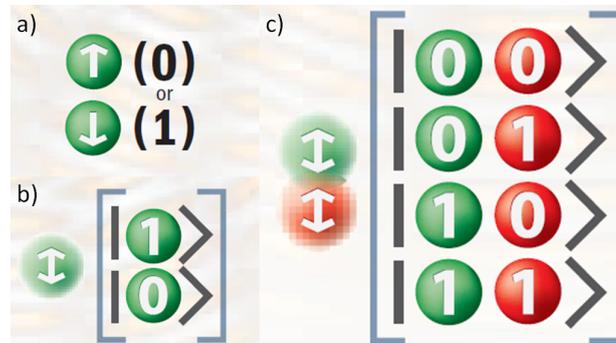
precesión depende del material, por lo que suponemos que el material no magnético de la Figura 1.3, requiere  $V_G \neq 0$  para que la fase de precesión cambie de  $2\pi$  a  $\pi$  para recorrer una distancia  $L$ . Como se puede ver en la Figura 1.3, debido a la fase de precesión y a la magnetización del colector, el P-ST se encuentra en modo *encendido* (Figura 1.3a), mientras que AP-ST se encuentra en modo *apagado* (Figura 1.3b). [12]

Un área prometedora relacionada altamente con la espintrónica es la computación cuántica. Esta área utiliza el hecho de que los sistemas cuánticos tienen propiedades diferentes a las de los sistemas clásicos, como la dualidad onda-partícula. De forma análoga a la computación tradicional que utiliza código binario (*bits*, que pueden tener valores de 0 ó 1, ver Figura 1.4a) para codificar información digital, la computación cuántica pretende utilizar el espín del electrón (*up* o *down*) como *bit*, al que por pertenecer a este tipo de computación se le denomina *qubit* (*bit* cuántico). [14, 15]

Como se había mencionado, el espín del electrón tiene dos estados asociados: *up* y *down*. Debido a que el espín es regido por la mecánica cuántica, existe una probabilidad de que el sistema esté en un estado o en otro al mismo tiempo. Debido a esto, el sistema se escribe en términos de *superposición coherente* de los estados. En particular, para los electrones aislados, la probabilidad de tener espín *up* es igual que la probabilidad de tener espín *down*. La *superposición coherente* implicaría en términos de *bits* tener dos valores simultáneamente (Figura 1.4b). De la misma forma, si los espines de dos partículas interfieren entre sí, el sistema podrá tener cuatro valores de forma simultánea (Figura 1.4c), a la vez, tres partículas correlacionadas pueden codificar ocho valores, por lo que un número  $N$  de partículas puede contener  $2^N$  *bits* de información. Debido a que la cantidad de información codificada en los *qubits* es mucho mayor que la de los *bits*, la computación cuántica permite que se pueda procesar una gran cantidad de información en paralelo y, además permite que sea posible realizar otros tipos de computación. [14, 15]

Como se argumentó en los párrafos anteriores, la Espintrónica es un área con mucho potencial y sus dispositivos son de gran interés, específicamente para futuras aplicaciones en el área de almacenamiento de información, sensores magnéticos y computación cuántica. Para lograr que los dispositivos espintrónicos potenciales se conviertan en dispositivos que puedan ser utilizados día a día es necesario superar algunos retos, entre los que se encuentran: mejorar el transporte de carga (que a su vez es de espín) en el interior de los chips, mejorar la pureza de los materiales para que las propiedades magneto-ópticas de éstos sean mejores, lograr que propiedades ferromagnéticas sean alcanzadas en materiales cuyo dopaje es bajo a altas temperaturas, por ejemplo en semiconductores dopados débilmente con impurezas magnéticas

(DMS). Se espera, que utilizando los grados de libertad del espín en las heteroestructuras semiconductoras y en nuevos materiales como grafeno, siliceno y dicalcogenuros de materiales de transición (TMD'S, por sus siglas en inglés) se puedan hacer grandes avances en Espintrónica, cuya meta es desarrollar nuevos dispositivos y métodos para la comunicación y revolucionar así la electrónica. [16, 17]



**Figura 1.4:** a) *Bits* en un sistema clásico, en el que los estados de la partícula pueden tomar valores de 0 ó 1. b) En un sistema cuántico, la partícula tiene superposición coherente, por lo que simultáneamente puede tener valor de 1 y 0. c) Dos partículas cuánticas correlacionadas pueden existir en cuatro estados debido a la superposición coherente de estados y a la correlación entre partículas. [14]

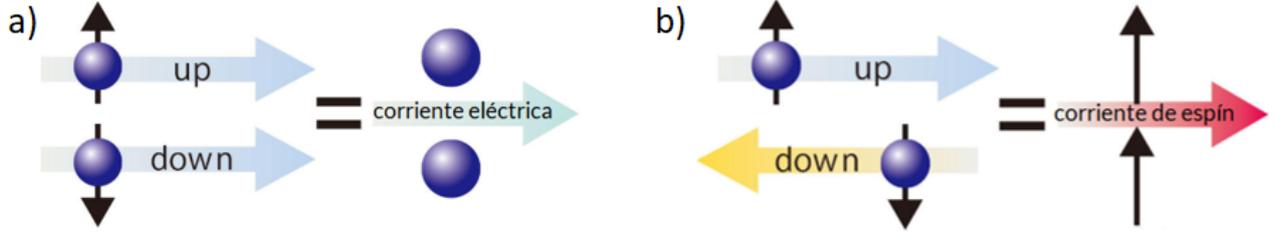
### 1.3. Corriente de carga y de espín

En la electrónica convencional siempre se había ignorado el espín del electrón. Un efecto de que surge al analizar la orientación de espín de los electrones que fluyen en una corriente eléctrica es la corriente de espín. En la electrónica convencional, se denomina corriente eléctrica al movimiento de electrones en una misma dirección (Figura 1.5a). De forma similar, se puede definir la corriente de espín como un flujo de magnetización, esto es, una diferencia entre un flujo de electrones con orientación de espín *up* y un flujo con orientación de espín *down* (Figura 1.52). Hasta ahora, se ha hablado de corriente de espín como algo que acompaña a la corriente eléctrica; sin embargo, si se piensa que una corriente eléctrica, cuyos espines tienen orientación *up*, se mueve en dirección opuesta a una corriente de eléctrica con orientación de espín *down*, la corriente eléctrica desaparece y es posible tener corriente de espín sin su contraparte eléctrica. A este fenómeno se le conoce como corriente de espín pura (ver Figura 1.5). [18, 19]

Formalmente, la densidad de corriente de carga eléctrica ( $\mathbf{J}_e$ ), es decir, la corriente que pasa a través del área de la sección transversal, se define como:

$$\mathbf{J}_e = e\mathbf{v}, \quad (1.1)$$

donde  $e$  es la carga del electrón y  $\mathbf{v}$  la velocidad de los portadores de carga. Por analogía, en



**Figura 1.5:** Comparación de la corriente a) eléctrica y la b) de espín. a) La corriente eléctrica se define como un conjunto de electrones que se mueven en la misma dirección, sin importar la orientación de espín que tengan los electrones del flujo. b) La corriente de espín se basa en la orientación de espín. Una corriente pura de espín con orientación *up* es equivalente a una corriente pura de espín con orientación *down* en dirección opuesta. [20]

Espintrónica, se puede definir de un operador de corriente de espín, el cual está definido como:

$$\hat{\mathbf{J}}_s = \hat{s}_z \hat{\mathbf{v}} = \begin{pmatrix} \hat{\mathbf{J}}_{s\uparrow} \\ \hat{\mathbf{J}}_{s\downarrow} \end{pmatrix} \quad (1.2)$$

donde  $\hat{s}_z$  es la componente  $z$  del espín y  $\hat{\mathbf{v}}$  es el operador de velocidad. Al sustituir  $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$ , con  $\hbar$  como la constante de Plack entre  $2\pi$  y  $\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$  la matriz de Pauli, se obtiene que las componentes del operador de espín son:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_{s\uparrow} &= \frac{\hbar}{2} \hat{\mathbf{v}}_{\uparrow}, \\ \hat{\mathbf{J}}_{s\downarrow} &= -\frac{\hbar}{2} \hat{\mathbf{v}}_{\downarrow} \end{aligned} \quad (1.3)$$

Usando las ecuaciones anteriores, se puede obtener que la corriente de espín se expresa como:

$$\mathbf{I}_s = \langle \hat{\mathbf{J}}_{s\uparrow} + \hat{\mathbf{J}}_{s\downarrow} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\mathbf{v}}_{\uparrow} \rangle - \frac{\hbar}{2} \langle \hat{\mathbf{v}}_{\downarrow} \rangle \quad (1.4)$$

La noción de corriente de espín será fundamental en Espintrónica y en esta tesis, en particular en el análogo del efecto Hall clásico, denominado efecto Hall de espín, el cual será descrito a detalle enseguida.

## 1.4. Efecto Hall con espines

Antes de explicar la naturaleza del efecto Hall de espín es importante revisar su contraparte clásica y sus variantes semiclásicas y cuánticas. El efecto Hall clásico (CHE, por sus siglas en

inglés) describe cómo actúa la fuerza sobre la carga que se mueve en un conductor cuando un campo magnético es aplicado. Este efecto fue descubierto por Edwin Hall en 1879 quien estudiaba el comportamiento de la corriente en una lámina delgada de material conductor bajo la influencia de un campo magnético perpendicular a la corriente. El efecto Hall consiste en la desviación de portadores de carga en los extremos opuestos de una barra de ancho  $w$  y espesor  $t$  denominada barra Hall. La barra Hall es atravesada por una densidad de corriente eléctrica  $\mathbf{J} = J_x \hat{\mathbf{x}}$  y un campo magnético externo  $\mathbf{B} = B_y \hat{\mathbf{y}}$  perpendicular al plano de la barra (Figura 1.6). Las cargas se mueven en la barra a una velocidad  $\mathbf{v}_d = v_d \hat{\mathbf{x}}$ . Como consecuencia de la presencia del campo magnético externo, existe una fuerza de Lorentz en la barra, la cual se puede escribir como:

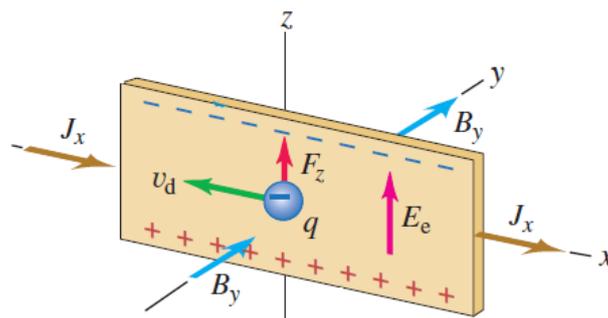
$$\mathbf{F}_m = q \mathbf{v}_d \times \mathbf{B} = q v_d B_y \hat{\mathbf{z}}, \quad (1.5)$$

y provoca que exista una desviación de la carga hacia el borde superior de la barra. [21]

Considerando que los portadores sean electrones ( $q = -e$ ), una carga negativa se acumulará en la parte superior de la barra y por tanto, la carga positiva se acumulará en la parte inferior de ésta (Figura 1.6). El campo electrostático  $\mathbf{E}_e$ , generado por la acumulación de diferentes portadores de carga en extremos opuestos de la barra Hall genera una fuerza:

$$\mathbf{F}_e = -e \mathbf{E}_e, \quad (1.6)$$

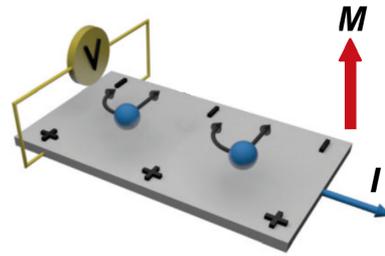
donde  $e$  es la carga del electrón. El proceso de acumulación de carga será continuo hasta que la fuerza electrostática sea de igual magnitud pero de sentido opuesto que la fuerza magnética  $\mathbf{F}_m$ . El campo electrostático genera una diferencia de potencial entre el borde superior e inferior de la barra Hall. Esta diferencia de potencial se llama voltaje Hall  $V_H$ . [21]



**Figura 1.6:** Efecto Hall para portadores de carga negativos. Por fuerza de Lorentz los electrones ( $q=-e$ ) se acumulan en la parte superior de la barra Hall, por lo que la parte inferior de la barra tiene una carga positiva. La diferencia de carga en los extremos de la barra genera una diferencia de potencial conocida como voltaje Hall. [21]

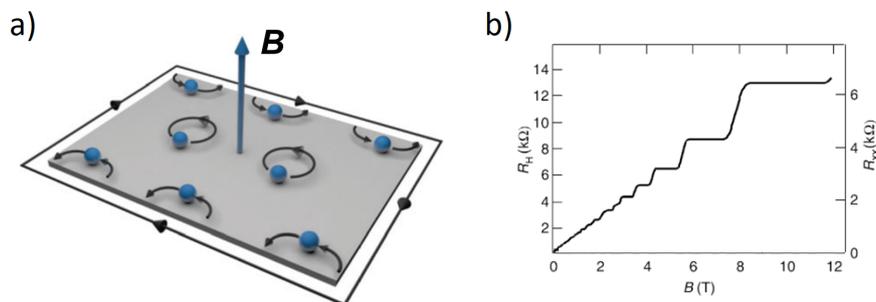
En materiales ferromagnéticos se presenta una variante del efecto Hall, el cual se denomina efecto Hall anómalo. En este efecto, una barra de material ferromagnético es atravesada por

una corriente eléctrica  $I$ . En este efecto no es necesario un campo magnético externo, ya que como se mencionó anteriormente, el material ferromagnético tiene una polarización magnetización espontánea. La polarización espontánea provoca que los portadores en una barra Hall se desvíen a un extremo de la barra Hall o al otro, dependiendo de si el portador de carga es positivo o negativo, como consecuencia de la fuerza de Lorentz. Al igual que en el efecto Hall clásico, en el efecto Hall anómalo existe un voltaje Hall debido al campo eléctrico generado por las cargas negativas separadas de las positivas (Figura 1.7). [21, 18]



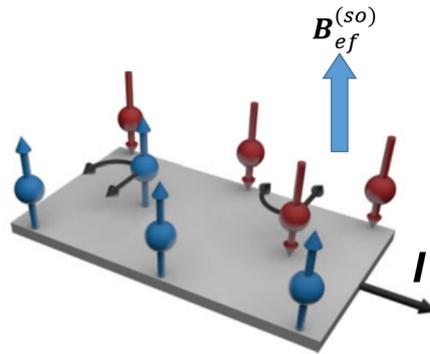
**Figura 1.7:** Esquema ilustrativo del efecto Hall anómalo (AHE, por sus siglas en inglés). En este efecto, la barra Hall es de un material ferromagnético, el cual, por su polarización espontánea ( $M$ ) provoca que los electrones de la corriente  $I$  se desvíen a diferentes extremos de la barra, según el portador de carga [23]

Otra variante del efecto Hall es el efecto Hall cuántico entero, el cual fue mostrado experimentalmente en 1980 por Von Klitzing. Este efecto se presenta en sistemas bidimensionales por los que atraviesa una corriente eléctrica  $I$  y existe un campo magnético externo fuerte  $\mathbf{B}$  (típicamente de decenas de Teslas) en dirección perpendicular a la corriente. En el efecto Hall cuántico entero, la resistencia sólo toma valores discretos (está cuantizada, ver Figura 1.8b), los cuales están dados por dos constantes fundamentales: la constante de Planck  $h$  y la carga del electrón. [24] La representación esquemática del efecto Hall cuántico se muestra en la Figura 1.8.



**Figura 1.8:** a) Esquema ilustrativo del efecto Hall cuántico entero (QH). b) Para campos magnéticos fuertes, el valor de la resistencia eléctrica se cuantiza. [23, 24]

Finalmente, el efecto Hall de espín (SHE, por sus siglas en inglés) fue predicho de forma teórica por D'yakonov y Perel en 1971. En 1999 Hirsch introdujo el término *Efecto Hall de espín* para referirse a este fenómeno, ya que, de forma general, este fenómeno es similar al efecto Hall clásico. En el efecto Hall de espín, una corriente eléctrica atraviesa un sistema bidimensional con fuerte interacción espín-órbita, que será descrito en detalle más adelante. Debido a que el acoplamiento espín-órbita genera un campo magnético efectivo, el efecto Hall de espín no requiere la presencia de un campo magnético externo y los electrones son desviados a los bordes laterales del material de acuerdo a la orientación del espín de cada electrón (Figura 1.9). [25]



**Figura 1.9:** Esquema ilustrativo del efecto Hall de espín (SHE): un sistema bidimensional con interacción espín-órbita es atravesado por una corriente eléctrica. Debido a que el acoplamiento espín-órbita genera un campo magnético efectivo, los electrones se desvían a los extremos del sistema de acuerdo a su orientación de espín. [23]

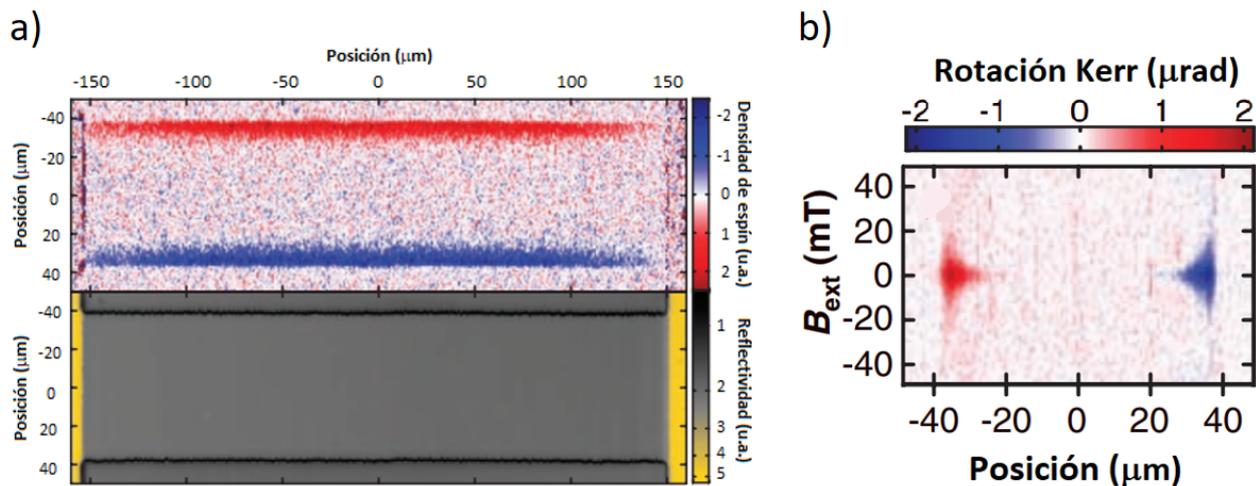
Al comparar el efecto Hall de espín con el efecto Hall clásico se presentan dos principales diferencias. Primero, en el SHE se obtiene una polarización de espín, mientras que en el CHE se obtiene una polarización de carga. Por otra parte, en el CHE se requiere que exista un campo magnético  $\mathbf{B}$  perpendicular al plano de la barra Hall. Por su parte, el SHE no requiere de un campo magnético externo, ya que utiliza el campo magnético efectivo del acoplamiento espín-órbita. Es importante notar que, en el CHE existe un voltaje Hall; sin embargo, en el SHE no hay una diferencia de potencial a los extremos de la barra, ya que por cada electrón con espín *up* existe otro con espín *down* y por tanto el voltaje Hall  $V_H = 0$  en este caso.

Las primera observaciones experimentales del efecto Hall de espín provienen de mediciones de polarización de espín espacialmente resueltas usando microscopía de rotación Kerr en los bordes de una muestra tipo *n* de arsenuro de galio (GaAs); y la segunda, de la polarización de la radiación de recombinación de huecos utilizando una estructura de diodo emisor de luz (LED, por sus siglas en inglés). [21]

El primer experimento fue realizado en el Centro de Espintrónica y Computación Cuántica

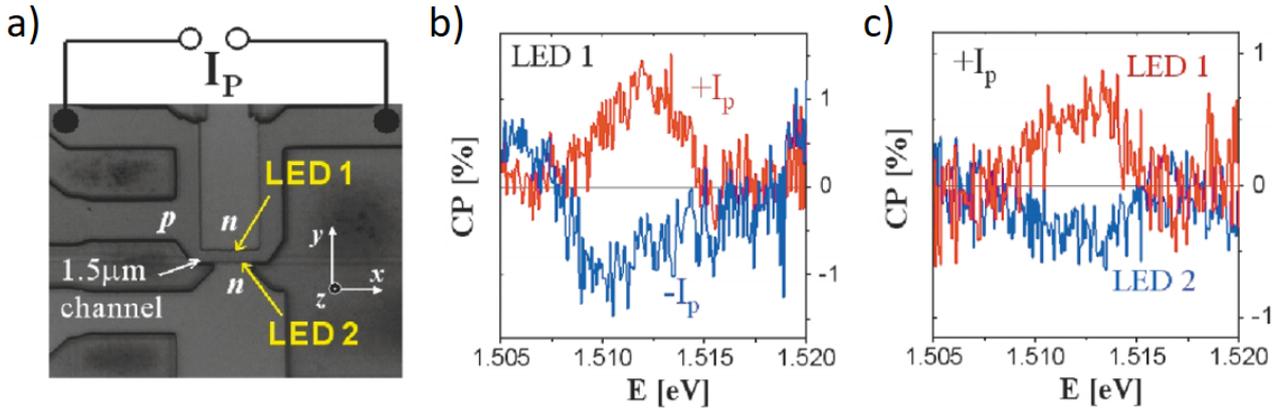
de la Universidad de California, en Santa Barbara por Kato, Myers, Gossard y Awschalom en 2004 [26]. Se utilizaron una serie de películas de  $n$ -GaAs crecidas en la dirección (001) usando la técnica de epitaxia de haz molecular. El dopaje fue realizado con silicio (Si), con una densidad electrónica  $n_e = 3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$ , para lograr un mayor tiempo de vida de espín. La rotación estática de Kerr muestra la polarización de espín en la muestra. Un haz de luz láser linealmente polarizado, pasa a través de un lente objetivo con el propósito de enfocar el haz a un haz de luz linealmente polarizado que incide de forma normal a la muestra. El haz reflejado no tiene la misma polarización del haz incidente, debido a que la polarización rota de forma proporcional a la magnetización a lo largo de la dirección de propagación del láser. [21, 26]

Entre las observaciones más representativas se encuentra una acumulación de espín en los bordes (Figura 1.10a). La polarización en cada borde es opuesta y disminuye conforme aumenta la distancia al borde. Del lado izquierdo de la imagen se observa una imagen de densidad de espín, mientras que en el derecho se muestra una imagen de reflectividad. La rápida disminución de la acumulación de espín debido al aumento en la distancia al borde de la muestra, se puede apreciar en la Figura 1.10b.[21, 26]



**Figura 1.10:** Observaciones más representativas del efecto Hall de espín realizada por Kato; *et al.* a) Imágenes bidimensionales de densidad de espín y reflectividad. b) Demostración experimental del efecto Hall de espín mediante microscopía de rotación Kerr. [26]

Por su parte, el segundo experimento fue realizado por Wunderlich, Kaestner, Sinova y Jungwirth en 2004 [27]. Su experimento consiste en la observación del efecto Hall de espín en un gas bidimensional de huecos de GaAs con dopaje tipo p. El dispositivo de medición estaba compuesto por diodos emisores de luz de unión tipo  $p$ - $n$ , lo cuales fueron compuestos en heteroestructuras, crecidas mediante la técnica de epitaxia de haz molecular, de (Al, Ga)As/GaAs. La Figura 1.11a muestra una imagen obtenida mediante microscopía electrónica de barrido del



**Figura 1.11:** Experimento de observación Hall de espín para un gas bidimensional de huecos realizado por Sinova, *et al.* A) Microscopía electrónica de barrido del dispositivo. b) Polarización detectada para un LED y corrientes opuestas. c) Polarización detectada para una corriente fija al usar LED 1 y LED 2. [27]

dispositivo. Los contactos identificados como LED 1 y LED 2 miden la electroluminiscencia en bordes opuestos del canal  $p$  del gas por donde pasa la corriente  $I_p$ . [21, 27]

Uno de los experimentos realizados consistió en la medición de la polarización circular (CP, por sus siglas en inglés) con el LED 1 para orientaciones de corriente opuestas. Se puede observar en la Figura 1.11b la presencia del efecto Hall de espín, ya que cuando la corriente es invertida, el que era un máximo para la polarización circular es ahora un mínimo. Finalmente, para corroborar la presencia del efecto Hall de espín, se comparó la polarización circular obtenida en el experimento anterior con un nuevo experimento, en el que la corriente se fijó y un LED fue activado. La señal opuesta obtenida por cada LED confirma la presencia del efecto Hall de espín (Figura 1.11c). [21, 27]

El efecto Hall de espín que se describió anteriormente, es conocido como efecto Hall de espín intrínseco, ya que su origen no se debe a impurezas del sistema. Como se había mencionado, es consecuencia del acoplamiento espín-órbita que se presenta en los semiconductores. [18] A grandes rasgos, el efecto Rashba y el efecto Dresselhaus (de los que se hablará posteriormente) son los principales generadores de acoplamiento espín-órbita en semiconductores. El acoplamiento espín-órbita de Rashba es lineal (en términos del momento de los electrones); por su parte, el efecto Dresselhaus tiene contribuciones lineales y cúbicas en el momento.

A pesar de la contribución cúbica de Dresselhaus, los estudios sobre acoplamiento espín-órbita en semiconductores se habían centrado mayormente en la contribución de Rashba y Dresselhaus lineal, ya que cuando ambos efectos se presentan simultáneamente en un sistema,

existe una variedad de interesantes efectos como el transporte balístico de espines sin pérdida de polarización (Schliemann PRL, et; al). [28]

Otra razón por la que la contribución cúbica de Dresselhaus no es típicamente considerada es que, generalmente, su valor es menor que la de la contribución lineal. Recientemente [28], se ha propuesto que es importante conocer la contribución cúbica de Dresselhaus a los eigenvalores y eigenvectores del sistema para poder identificar cual es su papel en en las cantidades y fenómenos físicos estudiados, como el transporte de espines y cómo la contribución cúbica de Dresselhaus modifica el espectro de absorción. [28]

El objetivo de este trabajo se centra precisamente en realizar un estudio teórico de la conductividad Hall de espín para gases bidimensionales de electrones con interacción espín-órbita. En primera instancia se busca reproducir las ya conocidas expresiones de conductividad Hall para el acoplamiento espín-órbita de Rashba (o Dresselhaus lineal) y para la interacción conjunta del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus lineal. También, se pretende estudiar el papel de la conductividad Hall de espín que incluya la contribución cúbica de Dresselhaus. Para el estudio de la conductividad Hall de espín, se usará el formalismo de Kubo, modelo cuántico estadístico que se basa en la teoría de respuesta lineal.

Como se detallará más adelante, el cálculo de la conductividad Hall de espín, a través del formalismo de Kubo, requiere utilizar un operador de corriente de espín (ecuación 1.2). En este trabajo, por simplicidad, se utilizará la definición convencional del operador de corriente de espín, por lo que los resultados obtenidos no consideran la contribución de la torca de espín que se obtiene del operador conservado de espín también estudiado en la literatura. Cabe mencionar que los resultados obtenidos para el operador convencional de torca de espín, coinciden con las expresiones obtenidas para el operador conservado en el límite cuando la frecuencia es cero.

# Capítulo 2

## Acoplamiento espín-órbita

### 2.1. Acoplamiento espín-órbita: primeros indicios

La mecánica cuántica no relativista explica de manera satisfactoria muchas de las propiedades del átomo de hidrógeno; sin embargo, antes de la consideración del espín del electrón, existían fenómenos que no podían ser explicados. Uno de los fenómenos para los que la teoría obtenía predicciones imprecisas es el hecho de que en muchos casos, lo que estaba previsto para ser sólo una línea espectral, en realidad, son dos líneas espectrales muy cercanas. Un claro ejemplo de la estructura fina es la primera línea la serie de Balmer del hidrógeno: la teoría predecía la existencia de una línea espectral para una longitud de onda de 656.3 nm; se encontró que, en realidad, son dos líneas separadas 0.14 nm. Otro fenómeno que la teoría no predecía correctamente era la presencia de patrones anómalos de Zeeman. La teoría predecía que, la línea espectral de un átomo se desdoblaría en tres componentes en la presencia de un campo magnético; a pesar de esto, en los espectros de algunos elementos se observaban más de tres componentes. [2]

En la actualidad, se sabe que la estructura fina y el efecto Zeeman anómalo son consecuencia de la interacción magnética existente entre el espín y el momento angular orbital del electrón. Esta interacción se conoce como acoplamiento espín-órbita, y se discutirá a detalle a continuación. [2]

### 2.2. Acoplamiento espín-órbita atómico

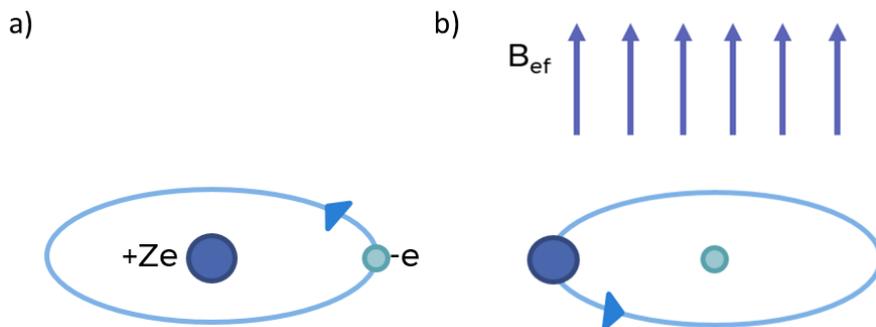
El acoplamiento espín-órbita, también llamado interacción espín-órbita es un efecto inherente a la teoría cuántica relativista; sin embargo, se puede llegar a un Hamiltoniano de espín-órbita utilizando argumentos electrodinámicos relativistas, tal y como se hará en esta sección. [29]

En la ecuación de Schrödinger no está presente el espín; sin embargo, éste puede ser incluido dentro de un marco de referencia no relativista, tal y como lo hizo Pauli en 1927. La idea central de este enfoque es utilizar dos Hamiltonianos no relativistas, uno para los electrones con espín *up* y otro para los electrones con espín *down*. Estos Hamiltonianos pueden ser acoplados si se considera la interacción del espín con el campo magnético  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  que es percibido por la partícula (en este caso el electrón) en un átomo. Haciendo lo anterior se llega a la ecuación de Pauli, que formalmente se expresa como

$$\frac{1}{2m_0} (-i\hbar\nabla - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2 \Psi(\mathbf{r}, t) - \hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \quad (2.1)$$

donde  $q = |e|$ ,  $m_0$  la masa en reposo del electrón,  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  es el potencial vectorial tal que  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ,  $\Psi(\mathbf{r}, t)$  son las funciones de onda,  $\hat{\boldsymbol{\mu}}$  es el momento magnético y  $U(\mathbf{r})$  es la energía potencial coulombiana,  $U = qV$ , donde  $V$  es el potencial electrostático. [29]

Para conocer las consecuencias del término del campo magnético es útil examinar el caso de un electrón atómico. Se desea conocer cuál es el campo magnético que experimenta el electrón y esto se puede hacer al estudiar el marco de referencia del electrón. Desde este marco de referencia, es el núcleo del átomo quien gira alrededor del electrón (y no el electrón alrededor del núcleo) tal y como se muestra en la Figura 2.1.



**Figura 2.1:** Modelo semiclásico del acoplamiento espín-órbita. a) En el modelo de Bohr el electrón gira alrededor del núcleo. b) Desde el marco de referencia del electrón, es el núcleo quien gira alrededor de él induciendo un campo magnético efectivo  $\mathbf{B}_{ef}$  en dirección al plano normal de la órbita.

Como se puede observar, alrededor del electrón gira un núcleo cargado, lo cual puede ser tratado como una espira cargada que genera una corriente eléctrica  $I$ . La corriente eléctrica que experimenta el electrón, a su vez está asociada a un campo eléctrico  $\mathbf{E} = -\nabla V(\mathbf{r})$ . Además de experimentar un campo eléctrico, el electrón percibe un campo magnético debido a la corriente

en movimiento. De acuerdo a relatividad especial, la expresión para dicho campo magnético es

$$\mathbf{B} = \frac{-\mathbf{v} \times \mathbf{E}}{c^2 \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (2.2)$$

donde  $\mathbf{v}$  es la velocidad del núcleo girando alrededor del electrón y  $c$  es la velocidad de la luz.

Es importante recordar que el electrón tiene un espín asociado, por lo que existe una energía potencial de orientación del espín con el campo magnético. Esta energía de orientación es lo que representa el término del campo magnético  $(-\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B})$  en la ecuación de Pauli; sin embargo, está en términos del marco de referencia del núcleo, mientras que la ec. (2.2) está en el marco de referencia del electrón. Debido a esto, es necesario regresar al marco de referencia del núcleo. Si se nombra  $\hat{H}_1$  al término del campo magnético de la ecuación de Pauli y se introduce la expresión para el momento magnético del electrón se tiene que:

$$\hat{H}_1 = -\hat{\boldsymbol{\mu}} \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{m_0} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = \frac{g\mu_B}{\hbar} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} \quad (2.3)$$

donde el factor giromagnético es  $g \approx 2$  para electrones,  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr y  $\hat{\mathbf{S}}$  es el operador de espín. Cuando se transforma la ec. (2.3) del marco de referencia del electrón al del núcleo, se introduce un factor de 2, que es una corrección que se debe a que el electrón está rotando (precesión de Thomas). En el marco de referencia del núcleo con  $v \ll c$ ,

$$\hat{H}_1 = \frac{e}{2m_0} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{B} = -\frac{e}{2m_0 c^2} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{E} \quad (2.4)$$

Por practicidad, se desea expresar la ec. (2.4) en términos de operadores de momento angular, por lo que es importante recordar que la fuerza es

$$\mathbf{F} = -\frac{q dV(\mathbf{r})}{dr} \hat{\mathbf{r}} \quad (2.5)$$

y considerar que el potencial atómico para un electrón tiene simetría esférica, por lo que la ec. (2.4) se puede escribir como

$$\hat{H}_1 = \frac{-1}{2m_0 c^2} \hat{\mathbf{S}} \cdot \mathbf{v} \times \mathbf{E} = \frac{1}{2m_0 c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{r}) \quad (2.6)$$

que al considerar que el momento angular es  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$  y al sustituir el vector de momento

angular por el operador del momento angular mecánico cuántico, se obtiene que

$$\hat{H}_1 = \frac{-1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (2.7)$$

Note que esta ecuación, es una consecuencia directa de la teoría especial de la relatividad y de la existencia del espín del electrón. [29] Es importante notar que las expresiones obtenidas (ec. (2.7)) dependen del operador de espín, que a su vez depende de las matrices de Pauli ( $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ ), por lo que representa la presencia de espín. Además, depende de un gradiente de potencial, por lo que se puede intuir que los electrones están restringidos en un potencial no simétrico. La expresión obtenida también depende del momento angular que a su vez depende del operador de momento  $\hat{\mathbf{p}}$ .

En el campo de la física atómica, el acoplamiento espín-órbita se puede expresar mediante el Hamiltoniano derivado de la ecuación de Dirac en el límite ( $v \ll c$ )

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) = \mu_B \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_{ef}(\hat{\mathbf{p}}), \quad (2.8)$$

con  $\boldsymbol{\sigma}$  el vector de las matrices de Pauli y  $V(\mathbf{r})$  el potencial coulombiano del núcleo atómico [30]. Como se puede observar en la ec. (2.8), para que exista acoplamiento espín-órbita es necesario que haya espín, que el electrón esté en movimiento y que el potencial no sea simétrico espacialmente, tal y como se mencionó al analizar la expresión obtenida con argumentos electrodinámicos relativistas. En el Hamiltoniano obtenido para el acoplamiento espín-órbita el término del campo magnético se ha escrito como  $\mathbf{B}_{ef}$ , debido a que el campo magnético que experimenta el electrón no es un campo magnético externo real, si no un campo magnético efectivo.

Resulta que la contribución del acoplamiento espín-órbita para un átomo típicamente es muy pequeña; sin embargo, la magnitud del efecto aumenta en órdenes de magnitud en algunos sistemas de cristales. El efecto del acoplamiento espín-órbita en sólidos cristalinos tiene un efecto profundo en la energía de estructura de bandas. Cuando el sólido cristalino es un semiconductor no centro-simétrico (e.g. con estructura zinc blenda o wurtzita), el acoplamiento espín-órbita produce un desdoblamiento de la banda de valencia. El acoplamiento espín-órbita en semiconductores es el que será analizado en este trabajo [30, 31].

## 2.3. Acoplamiento espín-órbita en semiconductores

Como se mencionó, en este trabajo se discutirá la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción espín-órbita, en específico, para heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad. Dichas estructuras se realizan utilizando elementos de la tabla periódica de los grupos III, IV y V a través de un proceso de modulación de densidad de dopaje a lo largo de la dirección de crecimiento. El ejemplo más sencillo de estas heteroestructuras son los gases bidimensionales de electrones (2DEG, por sus siglas en inglés). [32]

En sólidos, el acoplamiento espín-órbita depende de la asimetría del cristal, ya que esto dicta su naturaleza. Existen dos asimetrías principales: la asimetría de inversión estructural (relacionada con acoplamiento espín-órbita de Rashba) y la asimetría de inversión en bulto (relacionada con acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus). [32]

### 2.3.1. Acoplamiento espín-órbita de Rashba

En una estructura semiconductor cuántica, la degeneración de espín se puede deber a la asimetría de inversión de estructura (SIA, por sus siglas en inglés) del potencial de confinamiento  $V(\mathbf{r})$ . Uno de los acoplamientos espín-órbita debido al SIA es el acoplamiento espín-órbita de Rashba. [32]

El acoplamiento espín-órbita de Rashba (RSOC, por sus siglas en inglés), se origina de la SIA a lo largo de la dirección de crecimiento de la heteroestructura semiconductor que se encuentra en un 2DEG. Dado que existe una asimetría en el pozo cuántico bidimensional que confina a los electrones, por lo tanto existe un gradiente de potencial ( $-\nabla V(\mathbf{r}) = \mathbf{E}$ ). El campo eléctrico, se acopla al espín de los electrones del 2DEG, dicho acoplamiento se puede expresar con el Hamiltoniano de Rashba ( $H_R$ ):

$$\hat{H}_R \propto (\mathbf{E} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (2.9)$$

Al considerar que el campo eléctrico está en la dirección de crecimiento del pozo cuántico, el campo eléctrico se puede escribir como:

$$\mathbf{E} = E_z \hat{\mathbf{z}}, \quad (2.10)$$

por lo que se puede reescribir el Hamiltoniano como:

$$\hat{H}_R = \frac{\alpha}{\hbar} (\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{z}} = \frac{\alpha}{\hbar} (\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x), \quad (2.11)$$

donde  $\alpha$  es el coeficiente de Rashba, el cual depende del material y del campo eléctrico efectivo en la interfase que crea el 2DEG. El Hamiltoniano total se puede escribir como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_y - \hat{\sigma}_y\hat{p}_x), \quad (2.12)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva del electrón. Al obtener sus eigenvalores se encuentra que

$$\mathcal{E}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha k = \frac{1}{2m^*}[\hbar^2(k \pm k_{SO})^2 - \Delta_{SO}] \quad (2.13)$$

donde  $k$  es el módulo del momento del electrón tal que  $k = |\hat{\mathbf{k}}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ,  $k_{SO}$  es el acoplamiento constante del acoplamiento Rashba que se puede escribir como:

$$k_{SO} = \frac{\alpha m^*}{\hbar^2}, \quad (2.14)$$

y  $\Delta_{SO}$  es:

$$\Delta_{SO} = \left(\frac{\alpha m^*}{\hbar^2}\right)^2 \quad (2.15)$$

En muchos casos, el último término de la ec. (2.13) es omitido, ya que está en términos de  $\alpha$  a segundo orden. [32] Considerando que

$$\theta = \arctan\left(\frac{k_y}{k_x}\right), \quad (2.16)$$

es el ángulo polar ente el vector de momento y la dirección  $k_x$ , y que el eigenvalor debe tener la forma de una onda plana ya que únicamente se propaga en el plano  $x - y$ , se puede obtener que los eigenvectores son:

$$\Psi_{\pm}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\hat{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \frac{k}{k_y + ik_x} \end{pmatrix} = \frac{e^{i\hat{\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp i e^{i\theta} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

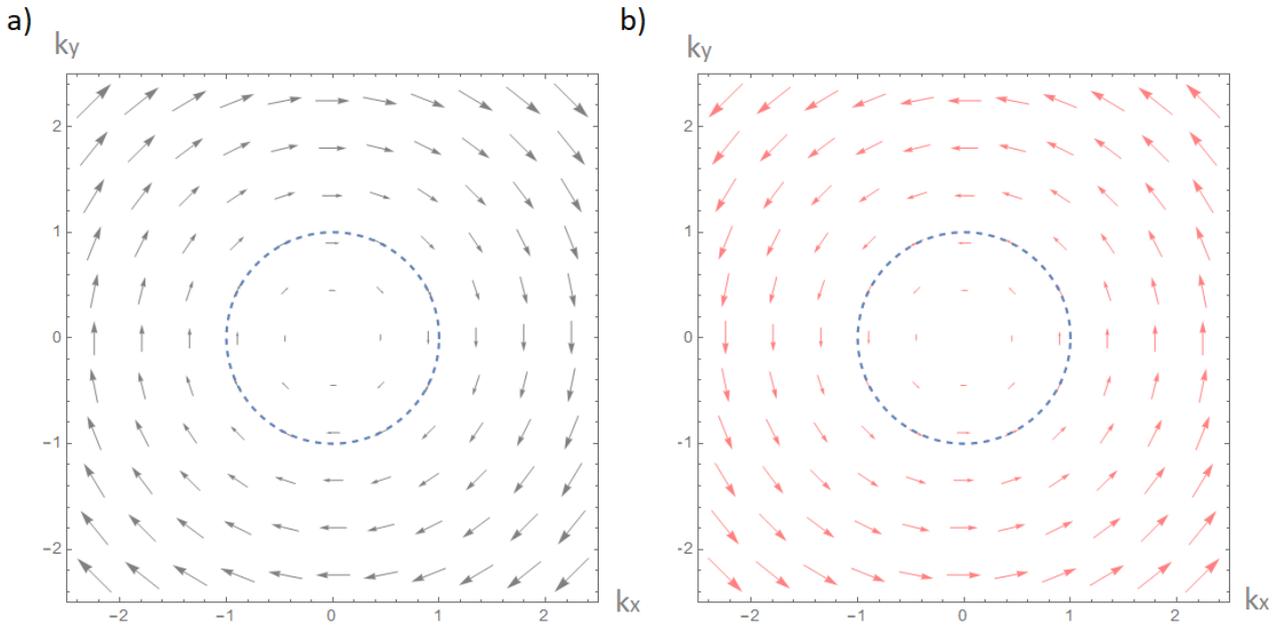
Usando los eigenvectores se puede obtener la polarización de espín (también llamada orientación de espín), la cual está definida como

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_{\pm} = \begin{pmatrix} \langle \hat{S}_x \rangle_{\pm} \\ \langle \hat{S}_y \rangle_{\pm} \\ \langle \hat{S}_z \rangle_{\pm} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} \langle \hat{\sigma}_x \rangle_{\pm} \\ \langle \hat{\sigma}_y \rangle_{\pm} \\ \langle \hat{\sigma}_z \rangle_{\pm} \end{pmatrix}, \quad (2.18)$$

donde  $\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle$  es el valor de expectación del operador de espín. El subíndice  $\pm$  señala qué eigenvector fue utilizado para obtener el valor de expectación. Para el efecto Rashba, la polarización de espín es:

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_{\pm} = \mp \frac{\hbar}{2} (\cos\theta \hat{\mathbf{x}} + \sin\theta \hat{\mathbf{y}}) \quad (2.19)$$

Las gráficas de la polarización de espín para sistemas con efecto Rashba se muestran en la Figura 2.2. Se puede observar que la polarización de espín correspondiente a  $\mathcal{E}_+$  es opuesta a la obtenida para  $\mathcal{E}_-$ . Es importante notar que la orientación de espín es siempre perpendicular a la dirección de movimiento.



**Figura 2.2:** Polarización de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba para la banda correspondiente a a)  $\mathcal{E}_+$  y b)  $\mathcal{E}_-$ .

Como consecuencia del efecto Rashba existe un desdoblamiento de la dispersión de energía. En la Figura 2.3a se muestra la dispersión de energía para una partícula libre en un 2DEG. Por otra parte, en la Figura 2.3b se muestra la dispersión de energía para la degeneración de espín cuando existe efecto Rashba, se puede observar que el desdoblamiento se presenta para la banda  $\mathcal{E}_+$  y para la banda  $\mathcal{E}_-$ . En la Figura 2.3c se muestra el espectro de energía para un sistema con acoplamiento espín-órbita Rashba (RSOC, por sus siglas en inglés).

La expresión de la velocidad semiclassical de las partículas en un 2DEG es:

$$\mathbf{v}_{\pm}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{E}_{\pm}(\mathbf{k})}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^*} \pm \alpha \mathbf{k} = \frac{\hbar}{m^*} \mathbf{k} (1 \pm \hbar k_{SO}) \quad (2.20)$$

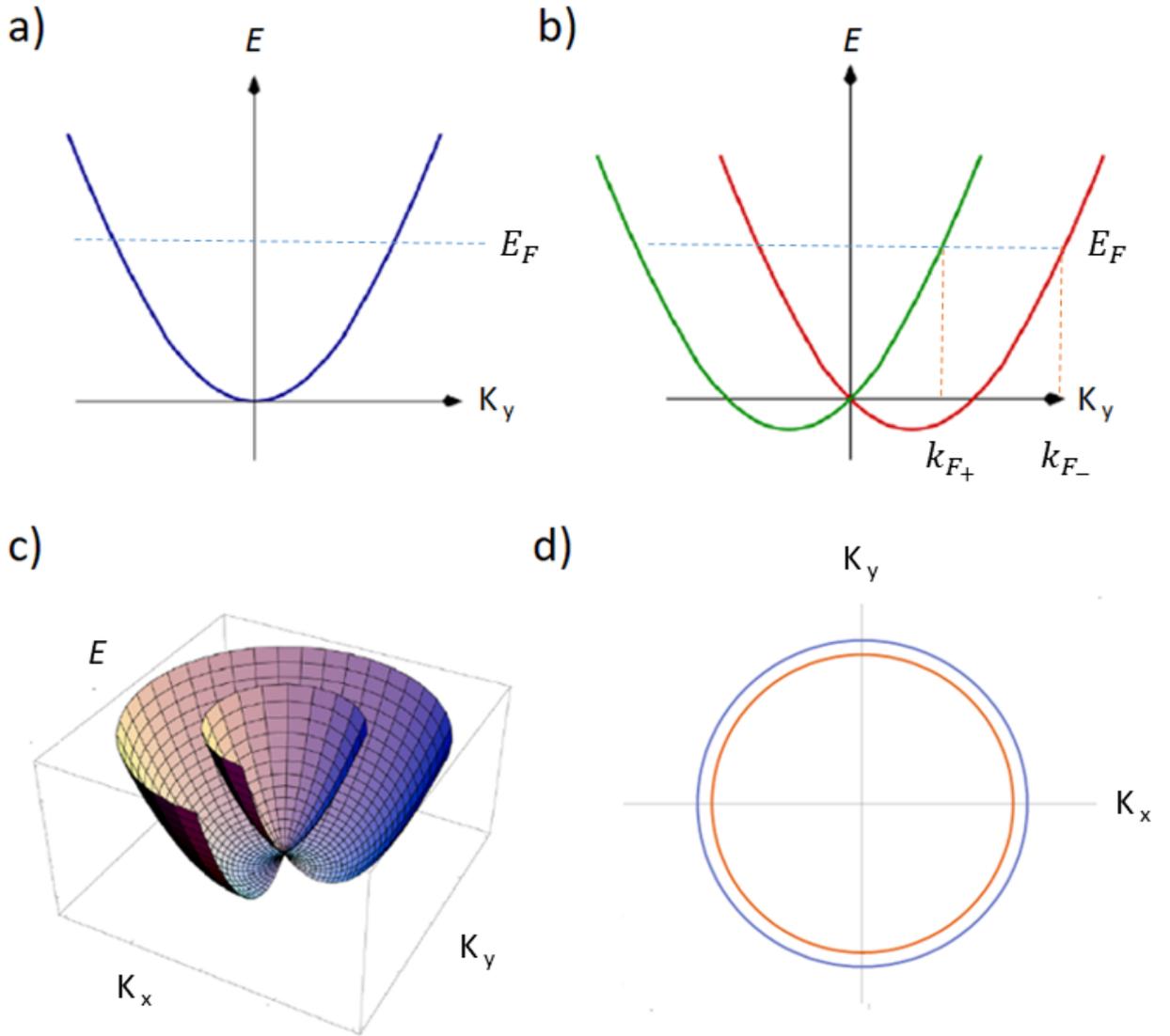
Recordando que el operador de velocidad en mecánica cuántica está dado por:

$$\hat{\mathbf{v}} = \dot{\mathbf{r}} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{i}{\hbar} [H, \mathbf{r}], \quad (2.21)$$

se puede obtener que los elementos de matriz están dados por la expresión:

$$\langle \Psi_{\pm}(\mathbf{k}) | \hat{\mathbf{r}} | \Psi_{\pm}(\mathbf{k}') \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \mathbf{v}_{\pm}(\hat{\mathbf{k}}), \quad (2.22)$$

lo cual, muestra que las velocidades  $\mathbf{v}_{\pm}$  son los elementos diagonales del operador de velocidad.



**Figura 2.3:** Acoplamiento espín-órbita debido al efecto Rashba. a) Dispersión de energía para una partícula libre en un 2DEG. [32] b) Desdoblamiento de la dispersión de energía para un 2DEG con RSOC para la banda  $\mathcal{E}_+$  (verde) y  $\mathcal{E}_-$  (rojo). [32] c) Espectro de energía para un sistema con RSOC. [32] d) Contornos de Fermi para un sistema con RSOC para la banda  $\mathcal{E}_+$  (naranja) y  $\mathcal{E}_-$  (azul).

Los contornos de Fermi, relacionados con la polarización de espín, están descritos por la siguiente expresión:

$$k_{F\pm}(\mathcal{E}_F) = \mp \frac{\alpha m^*}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{\alpha m^*}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m^*}{\hbar^2}\mathcal{E}_F}, \quad (2.23)$$

donde el  $\mp$  corresponde a las dos dispersiones que surgen del RSOC.

### 2.3.2. Acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus

Debido al término de acoplamiento de Pauli (ec. (2.8)) teóricamente se esperaba que existiera una consecuencia en los niveles de energía de los semiconductores en bulto. A diferencia de elementos el silicio (Si) y el germanio (Ge), las estructuras tipo zinc-blenda, como el arsenuro de galio (GaAs) no tienen centro de inversión. Como consecuencia de esto, el acoplamiento espín-órbita genera una degeneración de espín de la dispersión de energía del bulto debido a la asimetría de inversión de bulto (BIA, por sus siglas en inglés).

La corrección tridimensional al Hamiltoniano de partícula libre debido al BIA [28], se puede escribir como:

$$\hat{H}_D^{3D} = \hat{p}_x(\hat{p}_y^2 - p_z^2)\hat{\sigma}_x + \hat{p}_y(p_z^2 - \hat{p}_x^2)\hat{\sigma}_y + \hat{p}_z(\hat{p}_x^2 - \hat{p}_y^2)\hat{\sigma}_z, \quad (2.24)$$

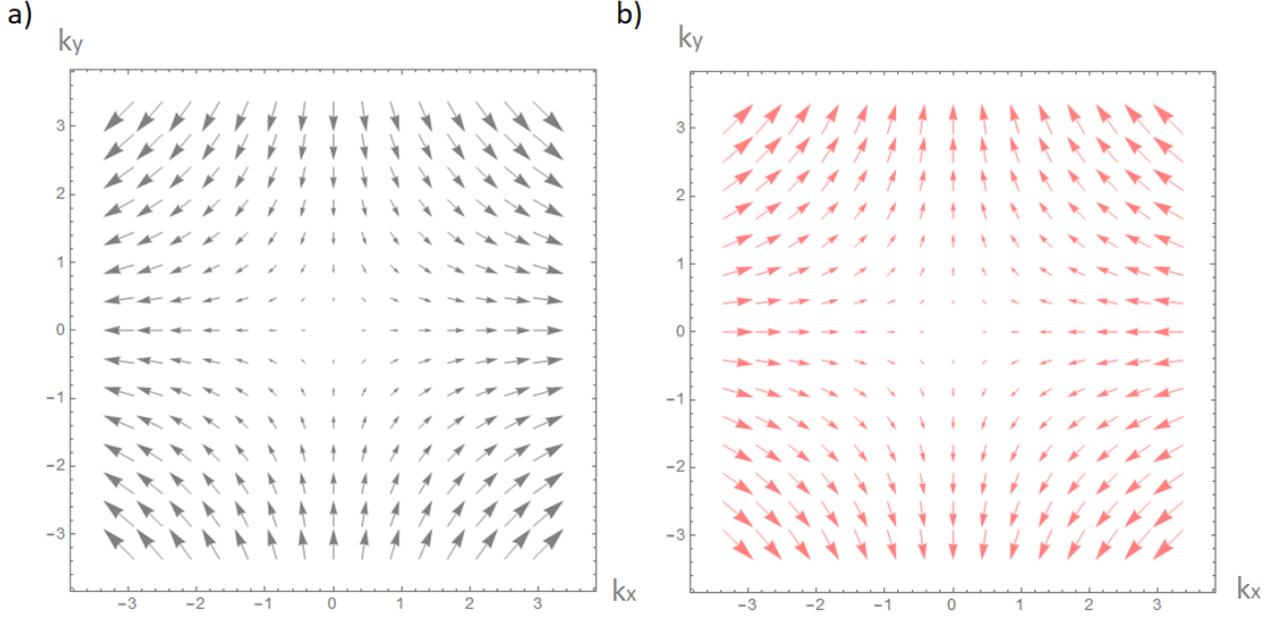
que, al considerar que para un pozo de potencial  $\langle p_z \rangle = 0$  debido a su simetría y que  $\langle p_z^2 \rangle \neq 0$  y es una constante dependiente de la muestra, se obtiene que el Hamiltoniano de Dresselhaus (ver apéndice C) es:

$$\hat{H}_D^{3D} = \hat{H}_D + \hat{H}_{D^3} = \frac{\beta}{\hbar}(\hat{p}_y\hat{\sigma}_y - \hat{p}_x\hat{\sigma}_x) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(\hat{p}_x\hat{p}_y^2\hat{\sigma}_x - \hat{p}_y\hat{p}_x^2\hat{\sigma}_y), \quad (2.25)$$

donde  $\beta$  depende de  $\langle p_z^2 \rangle$  y  $\gamma$  es una constante que depende del material. La ec. (2.25) muestra que el Hamiltoniano de Dresselhaus está compuesto por un término lineal (el que es proporcional a  $\beta$ ) y un término cúbico (el que es proporcional a  $\gamma$ ). En muchos de los casos, el término cúbico no es considerado, ya que, por lo general  $\langle p_z^2 \rangle \ll \hat{p}_x, \hat{p}_y$ . Al despreciar el término cúbico, el Hamiltoniano queda como:

$$\hat{H}_D = \frac{\beta}{\hbar}(\hat{p}_y\hat{\sigma}_y - \hat{p}_x\hat{\sigma}_x) \quad (2.26)$$

En general, la dispersión de energía del acoplamiento espín-órbita Dresselhaus (DSOC, por sus siglas en inglés) es similar a la que se mostró para RSOC. Por su parte, la polarización de espín (Figura: 2.4) se diferencia a la mostrada para RSOC.



**Figura 2.4:** Polarización de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus para la banda correspondiente a a)  $\mathcal{E}_+$  y b)  $\mathcal{E}_-$

### 2.3.3. Interacción conjunta de Rashba y Dresselhaus

En 1992, se describió por primera vez (De Andrada, et al. (1992)) que existe una anisotropía para el desdoblamiento de las bandas de energía de los 2DEG hechas a base de heterouniones de materiales semiconductores del grupo III-V, la cual se puede deber a la interacción conjunta de las contribuciones de Rashba y Dresselhaus. [33] Los electrones que están en los 2DEG se pueden describir mediante el Hamiltoniano:

$$H_{RDD^3} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_y - \hat{\sigma}_y\hat{p}_x) + \frac{\beta}{\hbar}(\hat{p}_y\hat{\sigma}_y - \hat{p}_x\hat{\sigma}_x) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(\hat{p}_x\hat{p}_y^2\hat{\sigma}_x - \hat{p}_y\hat{p}_x^2\hat{\sigma}_y) \quad (2.27)$$

Si únicamente se considera la contribución lineal de Dresselhaus, el Hamiltoniano se reduce a

$$\hat{H}_{RD} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_y - \hat{\sigma}_y\hat{p}_x) + \frac{\beta}{\hbar}(\hat{\sigma}_y\hat{p}_y - \hat{\sigma}_x\hat{p}_x), \quad (2.28)$$

que es la expresión que, en este capítulo, se seguirá analizando. Si se define  $k_y = k\text{sen}\theta$ ,  $k_x = k\text{cos}\theta$  y se propone que:

$$\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 4\alpha\beta\text{cos}\theta\text{sen}\theta} = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\text{sen}2\theta}, \quad (2.29)$$

se puede llegar a que los eigenvalores de  $\hat{H}_{RD}$  son:

$$\mathcal{E}_\nu(\mathbf{k}, \theta) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \nu\Delta(\theta)k, \quad (2.30)$$

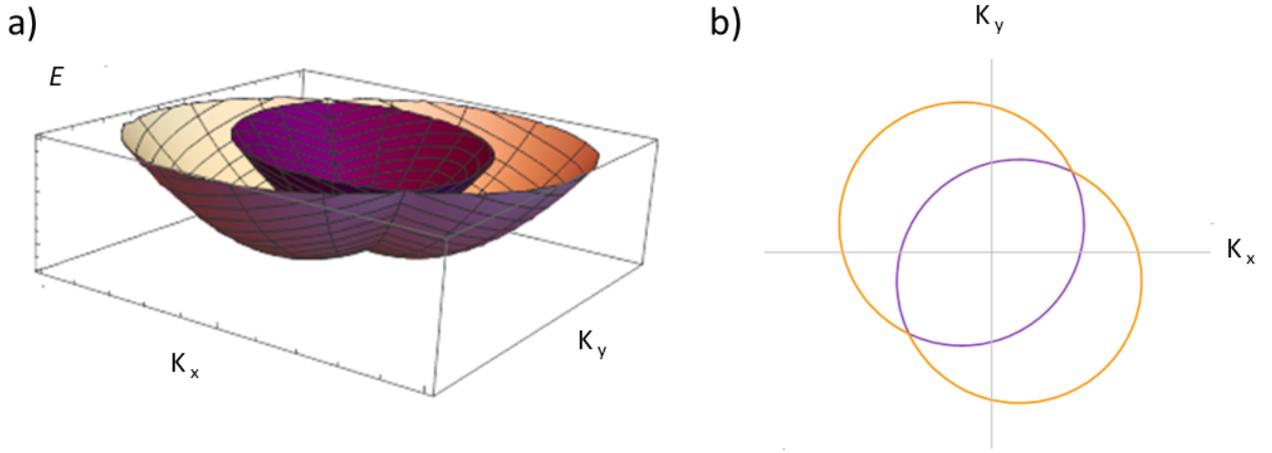
con  $\nu = \pm$ . También se puede obtener que los eigenvectores correspondientes se pueden expresar

como:

$$\Psi_\nu(\mathbf{k}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \nu e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix} = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\nu i}{\Delta(\theta)_k} (\alpha k_+ - i\beta k_-) \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

donde  $k_+ = k_x + ik_y$  y  $k_- = k_x - ik_y$  y  $\phi = \arctan\left(\frac{\alpha k_x - \beta k_y}{-\alpha k_y + \beta k_x}\right)$ .

Para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus el espectro de energía se muestra en la Figura 2.5a y los contornos de Fermi para cada banda se muestran en la Figura 2.5b.



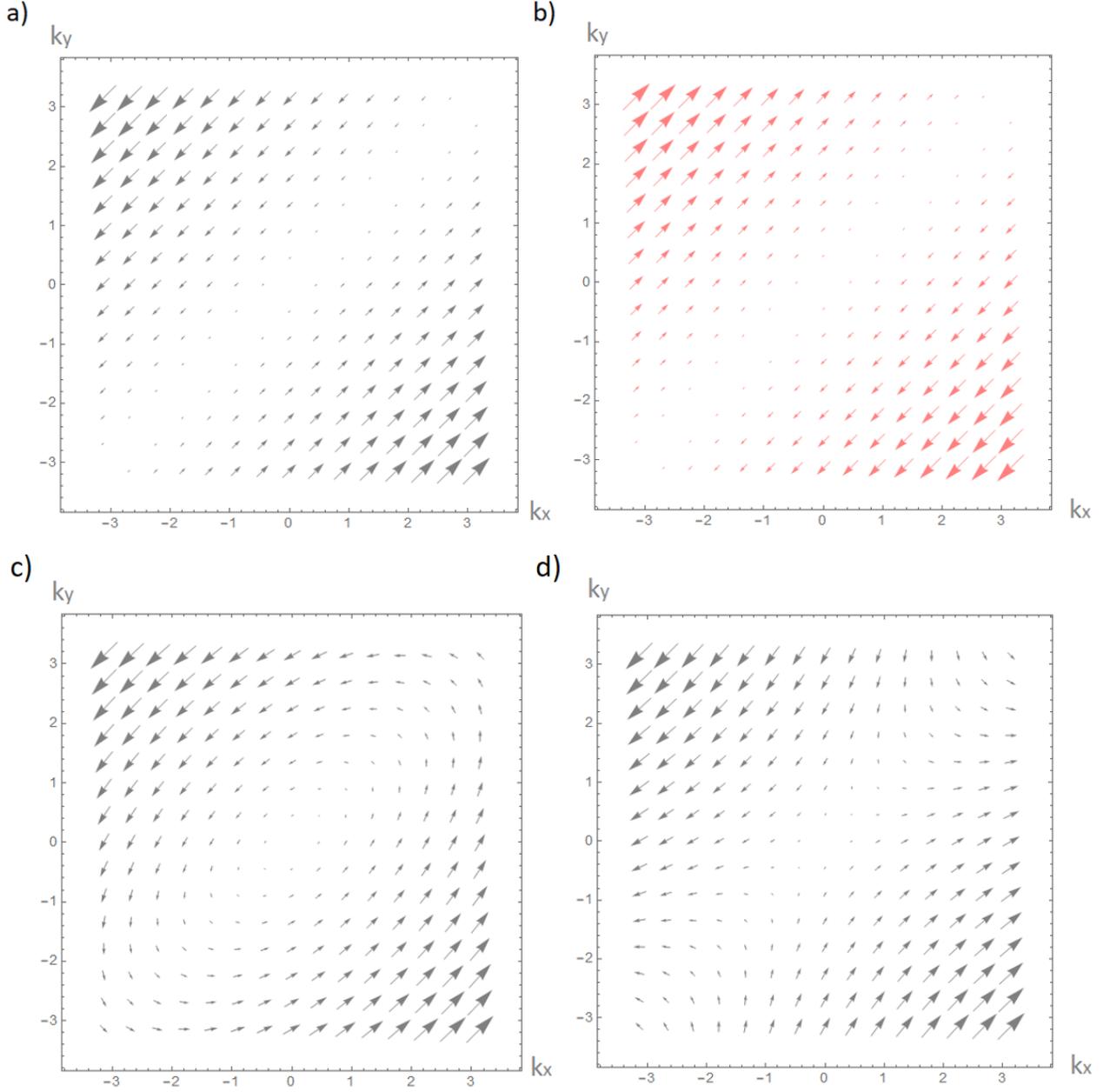
**Figura 2.5:** a) Espectro de energía y b) contornos de Fermi para la banda  $\mathcal{E}_+$  (azul) y  $\mathcal{E}_-$  (naranja) para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus.

Para esta interacción, la polarización de espín es:

$$\langle \hat{\mathbf{S}} \rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} (\cos\phi(\mathbf{k})\hat{\mathbf{x}} + \sin\phi(\mathbf{k})\hat{\mathbf{y}}) \quad (2.32)$$

Note la diferencia explícita de  $\phi$  en el vector de onda  $\mathbf{k}$  y de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  a diferencia del caso Rashba puro (sin Dresselhaus) que es independiente de  $\alpha$  (ec. (2.19)). En la Figura 2.6 se puede observar la polarización de espín para diferentes valores de  $\alpha$  y  $\beta$ .

Como se puede observar para todos los casos, la dirección de la polarización de la banda  $\mathcal{E}_+$  es opuesta a la de la banda  $\mathcal{E}_-$ . Para el caso  $\alpha = \beta$ , se puede observar que la contribución de la polarización debido al acoplamiento espín-órbita de la banda  $\mathcal{E}_+$  y  $\mathcal{E}_-$  se cancelan. [34] Para  $\beta < \alpha$ , la polarización de espín es similar a la mostrada para el efecto Rashba (Figura 2.2a), mientras que para  $\alpha < \beta$  es similar a la mostrada para el efecto Dresselhaus (Figura 2.4a).



**Figura 2.6:** Polarización de espín para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal a) para la banda  $\mathcal{E}_+$  ( $\alpha = \beta$ ), b) para la banda  $\mathcal{E}_-$  ( $\alpha = \beta$ ), c) para la banda  $\mathcal{E}_+$  ( $\alpha = 0.7$ ,  $\beta = 0.4$ ) y d) para la banda  $\mathcal{E}_+$  ( $\alpha = 0.4$ ,  $\beta = 0.7$ )

### 2.3.4. Interacción conjunta Rashba y Dresselhaus (lineal y cúbico)

El Hamiltoniano que describe la interacción espín-órbita que incluye la contribución cúbica de Dresselhaus se muestra en la ec. (2.27). De este Hamiltoniano se obtiene que los eigenvalores son:

$$\mathcal{E}_\nu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \nu \sqrt{\alpha^2 k^2 + \beta^2 k^2 - 2\alpha\beta k^2 \sin(2\theta) - \alpha\gamma k^4 \sin(2\theta) + \beta\gamma k^4 \sin^2(2\theta) + \frac{\gamma}{4} k^6 \sin^2(2\theta)}, \quad (2.33)$$

que al definir

$$\begin{aligned}\Delta(k, \theta) &\equiv \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\text{sen}(2\theta) - \alpha\gamma k^2\text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k^2\text{sen}^2(2\theta) + \frac{\gamma}{4}k^4\text{sen}^2(2\theta)} \\ &= \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\text{sen}(2\theta) + \gamma k^2\text{sen}(2\theta)} \left[ -\alpha + \beta\text{sen}(2\theta) + \frac{\gamma}{4}k^2\text{sen}(2\theta) \right],\end{aligned}\quad (2.34)$$

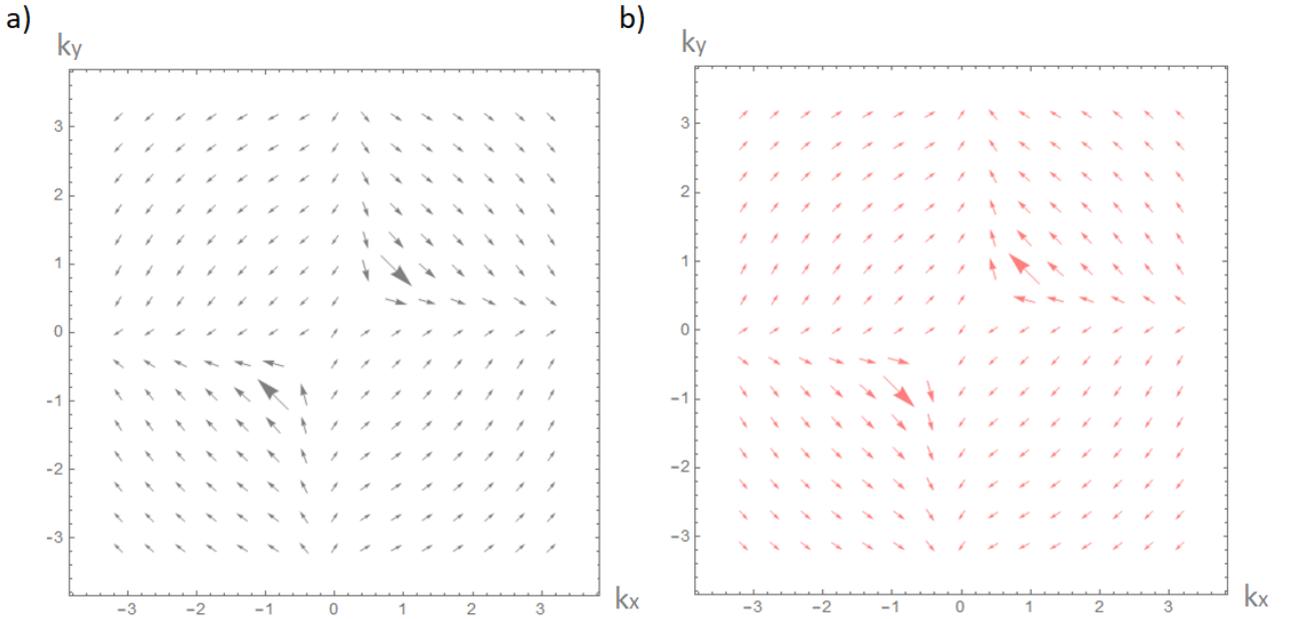
los eigenvalores se pueden expresar como

$$\Psi_\nu(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\nu i}{k\Delta(k, \theta)}(\alpha k_+ - i\beta k_- - \gamma k_+ k^2 \text{sen}\theta \cos\theta) \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

Para este sistema, la polarización de espín es:

$$\langle \hat{\mathbf{S}}_\pm \rangle = \pm \frac{\hbar}{2k\Delta(k, \theta)} \left[ (-\alpha k_y + \beta k_x + \gamma k^2 \text{sen}\theta \cos\theta k_y) \hat{\mathbf{x}} + (\alpha k_x - \beta k_y - \gamma k^2 \text{sen}\theta \cos\theta k_x) \hat{\mathbf{y}} \right] \quad (2.36)$$

En la Figura 2.7 se observa que la polarización de espín para este sistema es más compleja que para los casos mostrados anteriormente.



**Figura 2.7:** Polarización de espín para la banda  $\mathcal{E}_+$  ( $\alpha = 0.2$ ,  $\beta = 0.3$  y  $\gamma = 0.3$  (unidades adimensionales))

Finalmente, es importante recordar que para cada interacción espín-órbita (Rashba, Dresselhaus lineal y Dresselhaus cúbico) existe un parámetro que depende de cada material, el cual indica qué tanto contribuye cada tipo interacción al Hamiltoniano de acoplamiento espín-órbita.

Para la interacción espín-órbita Rashba el parámetro es  $\alpha$  y es sintonizable mediante campos eléctricos, para Dresselhaus lineal el parámetro es  $\beta$  y depende del ancho efectivo del pozo de potencial (Apéndice C) y para Dresselhaus cúbico el parámetro es  $\gamma$ . La Tabla siguiente muestra valores teóricos correspondientes a cada parámetro.

**Tabla 2.1:** Parámetro de Rashba ( $\alpha$ ), Dresselhaus lineal ( $\beta$ ) y Dresselhaus cúbico ( $\gamma$ ) para acoplamiento espín órbita para diferentes materiales semiconductores: arseniuro de indio (InAs), arseniuro de galio (GaAs) y arseniuro de aluminio (AlAs). [46]

Material	$m^*[m_0]$	$\alpha[eVm]$	$\beta[eVm]$	$\gamma[eVm^3]$
InAs	0.023	$1.125 \times 10^{-13}$	$3.333 \times 10^{-12}$	$4.863 \times 10^{-29}$
GaAs	0.067	$4.720 \times 10^{-13}$	$1.680 \times 10^{-12}$	$2.445 \times 10^{-29}$
AlAs	0.159	$4.30 \times 10^{-14}$	$7.910 \times 10^{-13}$	$1.155 \times 10^{-29}$

# Capítulo 3

## Formalismo de Kubo

### 3.1. Introducción

En materia condensada muchos de los experimentos consisten en la medición de la respuesta lineal debida a una perturbación, es decir, en la medición de señales cuya intensidad es directamente proporcional a la de la perturbación. En general, el término de respuesta lineal puede ser usado cuando la magnitud de la perturbación es pequeña. [35] Existe una amplia variedad de perturbaciones cuya respuesta es lineal, por lo que hay varias fórmulas que describen sistemas con este tipo de respuesta. A las ecuaciones que describen estas relaciones de correlación se les conoce como fórmulas de Kubo. La primera fórmula de respuesta lineal fue propuesta alrededor de 1953 por George Green. Su fórmula describe el transporte en líquidos. Pocos años después (1959), Kubo derivó por primera vez las ecuaciones de la conductividad eléctrica en sólidos. [35]

### 3.2. Fórmula general de Kubo

Como se mencionó anteriormente, la fórmula de Kubo es ampliamente usada en el régimen de respuesta lineal para conocer cómo cambia una observable  $\Xi$  debido a una perturbación externa. En esta sección se derivará la ecuación general de Kubo utilizando únicamente mecánica cuántica y siguiendo el procedimiento de Wong [18]. [18,36]

Considere un sistema que puede ser descrito con el Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  con eigenvectores  $|n\rangle$ . El sistema está bajo un campo de perturbación externo, cuyo Hamiltoniano es  $\hat{H}'$ . Debido a la perturbación externa  $\hat{H}'$  al sistema  $\hat{H}_0$ , se desea conocer cual es el cambio que  $\hat{H}'$  produce a una observable  $\Xi$ . [18, 36] Recordando que el valor de expectación de una observable  $A$  en un estado representado por una matriz de densidad  $\rho_0$  está dado por:

$$\langle A \rangle = Tr(\hat{\rho}_0 A), \quad (3.1)$$

donde el valor promedio termodinámico de un operador  $\Xi$  se define como:

$$\langle \Xi \rangle = \frac{\text{Tr}[\hat{\rho}_0 \Xi]}{Z_0} = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n | \Xi | n \rangle e^{-E_n/k_B T}, \quad (3.2)$$

y el operador de densidad es:

$$\hat{\rho}_0 = \sum_n |n\rangle \langle n| e^{-E_n/k_B T}, \quad (3.3)$$

aquí  $Z_0$  es la función de partición canónica,  $k_B$  es la constante de Boltzman y  $T$  es la temperatura. La perturbación  $\hat{H}'$  inicia a un tiempo  $t_0$  y rompe el equilibrio del sistema, por lo que el Hamiltoniano que describe el sistema perturbado es:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (3.4)$$

donde la perturbación es proporcional a una función escalón unitario (función escalón de Heaviside), lo que implica que un campo de perturbación de fuerza unitaria es aplicado desde el infinito de forma adiabática. Al tiempo  $t = 0$  la función vale cero. [18, 36] Debido a que se desea conocer el valor esperado del operador  $\Xi$  para tiempo mayores que  $t_0$ , es necesario conocer la evolución temporal de los eigenvectores. El valor esperado de  $\Xi$ , se puede escribir como:

$$\langle \Xi(t) \rangle = \frac{\text{Tr}[\rho(t) \Xi]}{Z_0} = \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t) | \Xi | n(t) \rangle e^{-E_n/k_B T}, \quad (3.5)$$

donde  $\rho(t)$  está definido como:

$$\rho(t) = \sum_n |n(t)\rangle \langle n(t)| e^{-E_n/k_B T} \quad (3.6)$$

Como se mencionó con anterioridad, el formalismo de Kubo es usado para perturbaciones pequeñas. Debido a esto, es útil escribir los eigenvectores y la observable en el esquema cuántico de interacción como se muestra a continuación:

$$|\hat{n}(t)\rangle = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} |n(t)\rangle, \quad (3.7)$$

$$\hat{\Xi}(t) = e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \Xi(0) e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}. \quad (3.8)$$

Por otra parte, la ecuación de Schrödinger que, inicialmente se escribía como:

$$\hat{H}(t) |n(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |n(t)\rangle, \quad (3.9)$$

al evolucionar en el tiempo y recordando que  $\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t)$ , se puede escribir como:

$$\begin{aligned}\hat{H}'(t) |\hat{n}(t)\rangle &= [\hat{H}(t) - \hat{H}_0] e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |n(t)\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |n(t)\rangle \\ &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle,\end{aligned}\tag{3.10}$$

donde  $\hat{H}_0$  no depende del tiempo. Si se define

$$u(t, t_0) |n\rangle = u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle = |\hat{n}(t)\rangle,\tag{3.11}$$

se puede reescribir la ec. (3.11), como:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\hat{n}(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle) = \hat{H}'(t) (u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle),\tag{3.12}$$

donde  $|\hat{n}(t_0)\rangle$  no depende del tiempo. De la ecuación anterior se obtiene que

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} u(t, t_0) = \hat{H}'(t) u(t, t_0),\tag{3.13}$$

la cual es una ecuación diferencial, cuya solución es

$$u(t, t_0) = \exp \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar}\tag{3.14}$$

Al expandir en una serie de Taylor la ec. (3.14), se puede reescribir como:

$$\begin{aligned}u(t, t_0) &= \exp \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \\ &= \left( \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right)^0 + \left( \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right)^1 + \frac{1}{2!} \left( \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right)^2 + \dots\end{aligned}\tag{3.15}$$

Debido a que el formalismo de Kubo está basado en la teoría de respuesta lineal, únicamente son de interés los términos de orden lineal, por lo que

$$u(t, t_0) = \exp \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \approx 1 + \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar}\tag{3.16}$$

Al utilizar el operador de evolución temporal, se obtiene que los eigenvectores son:

$$\begin{aligned} |n(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} |\hat{n}(t)\rangle \\ &= e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} u(t, t_0) |\hat{n}(t_0)\rangle \approx e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \left( 1 + \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right) |\hat{n}(t_0)\rangle \end{aligned} \quad (3.17)$$

Con base en esto, se puede escribir el valor de expectación de la observable  $\Xi$  como:

$$\begin{aligned} \langle \Xi(t) \rangle &= \frac{1}{Z_0} \sum_n \langle n(t_0) | e^{i\hat{H}_0 t/\hbar} \left( 1 + \frac{i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right) \Xi e^{-i\hat{H}_0 t/\hbar} \left( 1 + \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right) | n(t_0) \rangle e^{-E_n/k_B T} \\ &= \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle \hat{n}(t_0) | \left( 1 + \frac{i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right) \Xi \left( 1 + \frac{-i \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau}{\hbar} \right) | \hat{n}(t_0) \rangle, \end{aligned} \quad (3.18)$$

que, al despreciar los términos cuadráticos, queda como:

$$\langle \Xi(t) \rangle = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \left( \langle \hat{n}(t_0) | \hat{\Xi}(t) | \hat{n}(t_0) \rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \hat{n}(t_0) | [ \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau, \hat{\Xi}(t) ] | \hat{n}(t_0) \rangle \right) \quad (3.19)$$

A su vez, la integral del Hamiltoniano de la perturbación es:

$$\begin{aligned} \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau &= \hat{H}'^2(\tau) \Big|_{t_0}^t = (\hat{H}(\tau) - \hat{H}_0)^2 \Big|_{t_0}^t = (\hat{H}^2(\tau) - 2\hat{H}(\tau)\hat{H}_0 + \hat{H}_0^2) \Big|_{t_0}^t \\ &= (\hat{H}^2(\tau) - 2\hat{H}_0(\hat{H}_0 + \hat{H}') + \hat{H}_0^2) \Big|_{t_0}^t \end{aligned} \quad (3.20)$$

Si se eliminan los términos cuyo orden es mayor o igual que cuadrático, entonces:

$$\int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau \approx -2\hat{H}_0 \hat{H}' \Big|_{t_0}^t = -2\hat{H}_0 (\hat{H}'(t) - \hat{H}'(t_0)) \quad (3.21)$$

Si se define:

$$\langle \Xi(t) \rangle_0 = \frac{1}{Z_0} \sum_n e^{-E_n/k_B T} \langle \Xi(t) \rangle, \quad (3.22)$$

entonces se puede reescribir la ec. (3.19) como:

$$\langle \Xi(t) | = \langle \hat{\Xi}(t) \rangle_0 + \frac{i}{\hbar} \langle [ \int_{t_0}^t \hat{H}'(\tau) d\tau, \hat{\Xi}(t) ] \rangle, \quad (3.23)$$

que es la fórmula general de Kubo. Es importante notar que ésta depende del Hamiltoniano de la perturbación y de los eigenvectores correspondientes al hamiltoniano del sistema inicial, es decir del sistema no perturbado.

### 3.3. Conductividad de carga

Como se mencionó anteriormente, Kubo derivó las ecuaciones para la conductividad eléctrica en sólidos. En esta sección se derivará la expresión de Kubo para la conductividad eléctrica, utilizando la teoría de respuesta lineal de Kubo y siguiendo el procedimiento de Wong [18].

Para encontrar la expresión de la conductividad de carga, es necesario pensar que el sistema es un conjunto de electrones -o un trozo de metal- que sufre una perturbación debida a un campo electromagnético (fotónico) que depende del tiempo, pero no del espacio. [18, 36] El Hamiltoniano del sistema después de la perturbación tiene la forma:

$$H(t) = \frac{1}{2m^*} \left[ \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 + V(\mathbf{r}), \quad (3.24)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva del electrón,  $\hat{\mathbf{p}}$  el operador de momento,  $e$  la carga del electrón,  $c$  la velocidad de la luz,  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  el potencial vectorial y  $V(\mathbf{r})$  el potencial. Si se desarrolla el Hamiltoniano y se desprecia el término cuadrático del potencial vectorial, el Hamiltoniano total del sistema se escribe como:

$$\begin{aligned} H(t) &= \frac{1}{2m^*} \left[ \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e^2}{c^2} |\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)|^2 \right] + V(\mathbf{r}) \\ &\approx \frac{1}{2m^*} \left[ \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} [\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}] \right] + V(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (3.25)$$

Para llegar a la expresión de Kubo de conductividad eléctrica, es útil escribir explícitamente el Hamiltoniano de la forma  $H(t) = H_0 + H'(t)$ . Para esto, se considera que el potencial vectorial y el campo eléctrico son ondas planas con vector de onda  $\mathbf{q}$ , frecuencia  $\omega$  y dirección de propagación  $\nu$  (donde  $\nu$  puede ser  $x$ ,  $y$  o  $z$ ); de tal forma que:

$$A_\nu(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (3.26)$$

$$E_\nu(\mathbf{r}, t) = E_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (3.27)$$

Sabiendo que:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t), \quad (3.28)$$

la ecuación de Maxwell queda como:

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{-1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \frac{-1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \\ &= \frac{-1}{c} \nabla \times \frac{\partial \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{c} \nabla \times (i\omega A_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}), \end{aligned} \quad (3.29)$$

de donde se obtiene que:

$$E_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} = \frac{i\omega}{c} A_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}, \quad (3.30)$$

del tal forma que:

$$A_0 = \frac{-ic}{\omega} E_0, \quad (3.31)$$

por lo que el Hamiltoniano del sistema, se puede escribir como:

$$H(t) = \frac{1}{2m^*} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) - \frac{ie}{2m^*\omega} [\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}] \Theta(t - t_0), \quad (3.32)$$

por lo que:

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \hat{\mathbf{p}}^2 + V(\mathbf{r}) \quad (3.33)$$

$$H'(t) = -\frac{ie}{2m^*\omega} [\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}] \Theta(t - t_0) \quad (3.34)$$

Se desea escribir  $H'(t)$  en términos del operador de corriente de carga eléctrica, que se define como:

$$\mathbf{j} = e\mathbf{v}, \quad (3.35)$$

con:

$$\frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}, H_0] = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m^*}, \quad (3.36)$$

de tal forma que:

$$\mathbf{j}(t < t_0) = \frac{e\hat{\mathbf{p}}}{m^*}, \quad (3.37)$$

por lo que:

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{j}(t < t_0) m^*}{e} \quad (3.38)$$

El Hamiltoniano de la perturbación puede ser reescrito como:

$$H'(t) = \frac{-i}{2\omega} [\mathbf{j}(t < t_0) \cdot \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{j}(t < t_0)] \Theta(t) \quad (3.39)$$

Si se supone que el campo eléctrico  $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$  es espacialmente uniforme, éste sólo dependerá de la frecuencia por lo que:

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} (\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)) = \mathbf{E}(t) = E_0 e^{-i\omega t} \quad (3.40)$$

Para  $t = t_0$  -es decir, al inicio de la perturbación- el operador de velocidad es:

$$\mathbf{v}(t = t_0) = \frac{1}{i\hbar} [\mathbf{r}, H(t)] = \frac{1}{m^*} \left[ \hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} A_0 \right] \quad (3.41)$$

El valor esperado de la densidad de corriente de carga  $\mathbf{J}$ , para un tiempo  $t$  mayor a  $t_0$ , se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{J}(t) \rangle &= \frac{e}{\Omega} \langle \mathbf{v}(t) \rangle = \frac{e}{\Omega m^*} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle - \frac{e^2}{\Omega c m^*} \langle A_0 \rangle = \frac{e}{\Omega m^*} \langle \hat{\mathbf{p}}(t) \rangle - \frac{e^2}{\Omega c m^*} \mathbf{A}(t) \\ &= \frac{e}{\Omega m^*} \langle \hat{\mathbf{p}}(t) \rangle + \frac{ie^2}{\Omega m^* \omega} \mathbf{E}(t) = \frac{1}{\Omega} \langle \mathbf{j}(t) \rangle + \frac{ie^2}{\Omega m^* \omega} \mathbf{E}(t), \end{aligned} \quad (3.42)$$

donde  $\Omega$  es el inverso de la densidad electrónica.

Al utilizar la fórmula generalizada de Kubo y al considerar que la observable que se desea evaluar en el tiempo es  $j_\nu(t)$  y que la perturbación se puede escribir como:

$$H'(\tau) = \frac{-i}{\omega} j_\mu(t < t_0) E_0 e^{-i\omega\tau}, \quad (3.43)$$

se puede llegar a que:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{j}(t) \rangle = & \sum_n f(\mathcal{E}_n) \langle n(t_0) | j_\nu(t) | n(t_0) \rangle_0 + \\
 & \frac{i}{\hbar} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \int_{t_0}^t d\tau \langle n(t_0) | \left[ \frac{-i}{\omega} j_\mu(t < t_0) E_0 e^{-i\omega\tau}, j_\nu(t) \right] | n(t_0) \rangle = \\
 & \frac{i}{\hbar\omega} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \int_{t_0}^t d\tau \langle n(t_0) | [j_\mu(t < t_0), j_\nu(t)] | n(t_0) \rangle E_0 e^{-i\omega\tau}
 \end{aligned} \tag{3.44}$$

En la ecuación anterior, se puede observar que  $\sum_n f(\mathcal{E}_n) \langle n(t_0) | j_\nu(t) | n(t_0) \rangle_0 = 0$ , ya que para  $t < t_0$  el sistema aún no ha sido perturbado y, por tanto, no hay corriente eléctrica. Se debe recordar que, por ser electrones, la función de distribución que describe cuántas partículas hay por debajo de cierto nivel energético  $E_F$  (energía de Fermi) a una temperatura  $T$  es la distribución de Fermi-Dirac:

$$f(\mathcal{E}_n) = \frac{1}{1 + \exp \frac{\mathcal{E}_n - E_F}{k_B T}}. \tag{3.45}$$

Utilizando las ecuaciones 3.44 y 3.42 se puede obtener que la  $\nu$ -ésima componente de la densidad de corriente eléctrica se escribe como:

$$\begin{aligned}
 \langle J_\nu(t) \rangle = & \frac{in_e e^2}{m^* \omega} E_\nu(t) \\
 & + \frac{1}{\Omega \hbar \omega} \sum_\mu \sum_n \int_{t_0}^t d\tau f(\mathcal{E}_n) \langle n(t_0) | [j_\mu(t < t_0), j_\nu(t)] | n(t_0) \rangle E_\mu(t) e^{i\omega(t-\tau)}
 \end{aligned} \tag{3.46}$$

Recordando que, la ley de Ohm microscópica  $\sigma^c$  se escribe como:

$$J_\nu = \sum_\mu \sigma_{\nu,\mu}^c E_\mu, \tag{3.47}$$

con  $\mu, \nu = x, y, z$  y al comparar con 3.46, se puede observar que  $\frac{in_e e^2}{m^* \omega} E_\nu(t)$  está en la misma dirección que  $J_\nu$ , mientras que el segundo término, tiene la forma de la ley de Ohm microscópica. Con base en lo anterior, se obtiene que la conductividad es:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{\nu,\mu}^c = & \frac{in_e e^2}{m^* \omega} \delta_{\nu,\mu} \\
 & + \frac{1}{\Omega \hbar \omega} \int_{t_0}^t d\tau \sum_n f(\mathcal{E}_n) \langle n(t_0) | [j_\mu(t < t_0), j_\nu(t)] | n(t_0) \rangle e^{i\omega(t-\tau)}
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Para llegar a la expresión de Kubo para la conductividad eléctrica, es necesario hacer las siguientes consideraciones respecto a la función de correlación mostrada en la ec. (3.48):

1. Se asume que el campo eléctrico se aplica de forma adiabática, por lo que  $t_0 \rightarrow -\infty$
2. Para considerar los efectos de disipación (debido a impurezas) del momento del electrón es necesario agregar el término de corrección  $i\eta$  a la frecuencia  $\omega$ , por lo que  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$
3. Como la ec. (3.48) está en términos de  $t - \tau$ , es necesario hacer un cambio de variable, en el que  $(t - \tau) \rightarrow t$

La ecuación de Kubo para la conductividad eléctrica se escribe finalmente como:

$$\sigma_{\nu,\mu}^c = \frac{in_e e^2}{m^*(\omega + i\eta)} \delta_{\nu,\mu} + \frac{1}{\Omega \hbar (\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\eta)t} \sum_n f(\mathcal{E}_n) \langle n | [j_\nu(t), j_\mu(0)] | n \rangle \quad (3.49)$$

El primer término, corresponde a la conductividad de Drude, donde  $n_e$  es la densidad de electrones de valencia y  $m$  la masa del electrón libre. Por otra parte,  $\eta$  es el inverso del parámetro  $\tau$ , que es el tiempo que sucede entre eventos de colisión electrónicos.[37] Por otra parte, el segundo término de la ec. (3.49) es la contribución cuántica lineal a la conductividad de carga. Esta contribución está en términos de los eigenvectores del sistema no perturbado, también se puede observar que dicha contribución no está en términos del campo fotónico. [35]

### 3.3.1. Conductividad de carga: interacción conjunta Rashba y Dresselhaus lineal

Un ejemplo del uso de la fórmula de Kubo es la conductividad de carga. En esta sección se mostrará cómo utilizando este formalismo es posible obtener valores para la conductividad de carga. El procedimiento hecho a continuación fue realizado con base en el desarrollo de Wong [18]. Para un 2DEG con interacción espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus, se puede encontrar que como consecuencia de un campo eléctrico débil se genera una corriente de espín y de carga. Se puede calcular la conductividad de carga  $\sigma_{\nu,\mu}^{ch}$  (que es la parte de la conductividad  $\sigma_{\nu,\mu}^c$  sin considerar la contribución de Drude  $\sigma_D(\omega)$ ) utilizando la ec. (3.49) y el Hamiltoniano, los eigenvalores y eigenvectores mostrados para este sistema anteriormente. Por simplicidad, se presentará el caso en el que  $\nu = \mu$ . La expresión para la conductividad longitudinal de carga es

$$\sigma_{yy}^C(\omega) = \sigma_D(\omega) + \sigma_{yy}^{ch} \quad (3.50)$$

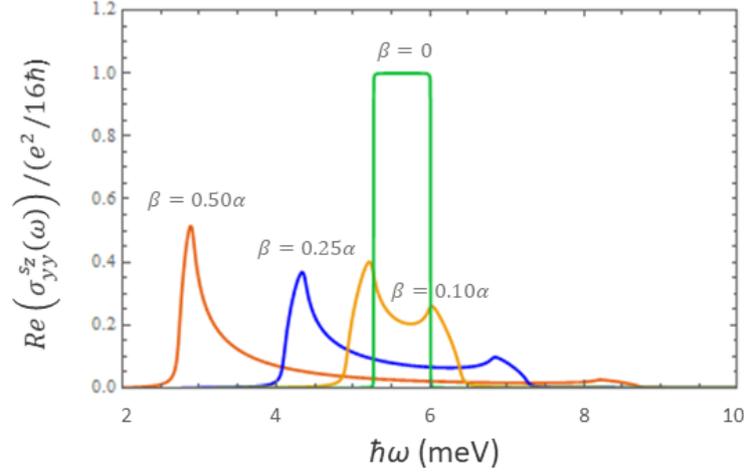
con  $\sigma_D(\omega) = \frac{in_e e^2}{m^*(\omega + i\eta)}$ . Por su parte, la conductividad de carga es:

$$\sigma_{yy}^{ch}(\omega) = \frac{ie^2(\alpha^2 - \beta^2)^2}{\pi^2 \hbar^4 (\omega + i\eta)} \int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{\cos^2 \theta}{\Delta(\theta)} \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\Delta(\theta)k}{\hbar}\right)} dk d\theta, \quad (3.51)$$

donde

$$k_{F\pm} = \mp \frac{m\Delta(\theta)}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{m^2\Delta^2(\theta)}{\hbar^4} + k_F^2} \quad (3.52)$$

donde  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ . Al usar  $\alpha = 1.6 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ ,  $n_e = 5 \times 10^{15} \text{ m}^{-2}$ , y  $\hbar\eta = 0.25 \times 10^{-3}$ , e integrar numéricamente se obtienen los espectros para la conductividad mostrados en la Figura 3.1



**Figura 3.1:** Conductividad de carga para diferentes valores de  $\beta$  y  $\alpha$  fijo y  $\mathbf{E} = E_y \hat{\mathbf{y}}$ .

Se puede observar, la curva para los tres casos es esencialmente la misma, con la diferencia de que el espectro se ensancha para valores de  $\beta$  mayores. Debido a esto, la conductividad de carga puede ser modulada, ya que depende de la frecuencia y de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ , por lo que la conductividad de carga puede cambiar si la proporción entre los parámetros se modifica o si la frecuencia del campo eléctrico sufre algún cambio. [18, 38]

# Capítulo 4

## Efecto Hall de espín para electrones

En sistemas donde se presenta el efecto Hall de espín, existe por ende una corriente de espín. Intuitivamente, para electrones en presencia de un campo eléctrico longitudinal  $\mathbf{E} = E_y \hat{\mathbf{y}}$  el valor esperado de la corriente de espín polarizada en  $\hat{\mathbf{z}}$  y moviéndose en dirección  $\hat{\mathbf{x}}$  se puede escribir formalmente como:

$$\mathbf{J}_x^{s_z} = \frac{1}{2} \langle \{ \hat{v}_x, \hat{s}_z \} \rangle \equiv \sigma^{SHE} E_y, \quad (4.1)$$

donde  $\mathbf{J}_x^{s_z}$  es la densidad de corriente de espín,  $\{\hat{a}, \hat{b}\}$  representa el anticonmutador (para los operadores  $\hat{a}$  y  $\hat{b}$ ),  $\hat{s}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z$  es el operador de espín en dirección  $\hat{\mathbf{z}}$ ,  $\hat{v}_x$  es el operador de velocidad de los electrones en la dirección  $\hat{\mathbf{x}}$  y  $\sigma^{SHE}$  es la conductividad asociada al efecto Hall de espín.

### 4.1. Fórmula de Kubo para la conductividad Hall de espín

En esta sección, se describe la fórmula de Kubo utilizada para obtener el cálculo de la conductividad Hall de espín. Para obtener dicha expresión es necesario considerar que el hamiltoniano no perturbado es aquél que incluye el efecto de acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus además del término de partícula libre.

Se asume que para  $t_0 = 0$  se aplica un campo eléctrico de corriente alterna, es decir, el campo eléctrico es la perturbación. Para el estudio de la conductividad de espín, se considerará que el transporte Hall es en la dirección  $\hat{\mathbf{x}}$ , el campo eléctrico se propaga en la dirección  $\hat{\mathbf{y}}$  y el espín está alineado en dirección  $\hat{\mathbf{z}}$ , por lo que la conductividad Hall se escribirá como  $\sigma_{xy}^{s_z}$ . Después de hacer las consideraciones mencionadas anteriormente, la expresión para la conductividad Hall de espín se puede calcular mediante la expresión

$$\sigma_{xy}^{s_z}(\omega) = \frac{e}{\hbar A(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\eta)t} \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \langle \Psi_{\mathbf{k}, \nu}(\mathbf{r}) | [\hat{\mathcal{J}}_x^{s_z}(t), \hat{v}_y(0)] | \Psi_{\mathbf{k}, \nu}(\mathbf{r}) \rangle \quad (4.2)$$

En la fórmula de Kubo para la conductividad Hall de espín a temperatura  $T = 0$  y  $\hat{\mathcal{J}}_x^{s_z}(t)$  es el operador de corriente de espín. En este trabajo, se utilizará la definición convencional la densidad de corriente de espín por lo que  $\hat{\mathbf{j}}_x^{s_z}$  tomará el lugar de  $\hat{\mathcal{J}}_x^{s_z}$  en la ecuación de la conductividad Hall de espín. El operador convencional está definido por el anticonmutador:

$$\hat{\mathbf{j}}_x^{s_z} = \frac{1}{2}\{\hat{v}_x, \hat{s}_z\} \quad (4.3)$$

Cabe mencionar que existen definiciones alternativas que incluyen un término correspondiente a la torca de espín, que se obtiene a partir del operador conservado ( $\hat{\mathcal{J}}_x^{s_z}$ ): sin embargo, su inclusión va más allá del alcance de esta tesis y nos centraremos en los resultados que se desprenden del uso de la definición convencional del operador de corriente de espín (ec. (4.3)).

## 4.2. Conductividad Hall de espín para el efecto Rashba

Para obtener la expresión para la conductividad Hall de espín para el efecto Rashba, se utilizará la ec. (4.2). El Hamiltoniano total estará dado por  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_R$ , con  $\hat{H}_0$  el Hamiltoniano de la partícula libre y  $\hat{H}_R$  es el correspondiente para el efecto Rashba

$$\hat{H}_R = \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x), \quad (4.4)$$

sus respectivos eigenvalores y eigenvectores están presentados en las ecs. (2.13) y (2.17). Considerando lo anterior, se puede obtener que la velocidad de los electrones para la dirección  $\hat{\mathbf{x}}$  y  $\hat{\mathbf{y}}$  son respectivamente

$$\hat{v}_x(0) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_x} = \frac{\hat{p}_x}{m} + \frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}_y, \quad (4.5)$$

$$\hat{v}_y(0) = \frac{\partial \hat{H}}{\partial \hat{p}_y} = \frac{\hat{p}_y}{m} - \frac{\alpha}{\hbar} \hat{\sigma}_x. \quad (4.6)$$

Por lo tanto el operador de corriente de espín está dado por

$$\hat{\mathbf{j}}_x^s(0) = \frac{1}{2}\{\hat{v}_x(0), \hat{s}_z\} = \frac{1}{2}\left\{\frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z, \frac{\hat{p}_x}{m} + \frac{\alpha}{\hbar}\hat{\sigma}_y\right\} = \frac{\hbar}{4m}\{\hat{\sigma}_z, \hat{p}_x\} = \frac{\hbar}{2m}\hat{\sigma}_z \hat{p}_x, \quad (4.7)$$

el cual obviamente no depende del tiempo explícitamente del tiempo. Para que el operador sea dependiente del tiempo es necesario escribir el operador en el esquema de interacción, tal que:

$$\hat{\mathbf{j}}_x^s(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \frac{\hbar}{2m} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (4.8)$$

por lo que el conmutador presente en la ec. 4.2, se puede escribir como:

$$[\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] = \frac{-\alpha}{2m} \left( e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_x \hat{\sigma}_z e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_x - \hat{\sigma}_x e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_x \hat{\sigma}_z e^{-i\hat{H}t/\hbar} \right). \quad (4.9)$$

Para calcular la conductividad, es necesario obtener el valor de expectación correspondiente al conmutador, que conduce a:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \Psi_{\mathbf{k},\nu}(\mathbf{r}) \rangle &= \langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle \\ &= \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-\alpha}{2m} \xi_1 | \mathbf{k}, \nu \rangle + \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-\alpha}{2m} \xi_2 | \mathbf{k}, \nu \rangle \end{aligned} \quad (4.10)$$

con  $\xi_1 = e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_x \hat{\sigma}_z e^{-i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_x$  y  $\xi_2 = \hat{\sigma}_x e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_x \hat{\sigma}_z e^{-i\hat{H}t/\hbar}$ . Para esto es útil reconocer que se satisfacen las siguientes identidades,

$$e^{\pm i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu \rangle = e^{\pm i\mathcal{E}_\nu t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu \rangle, \quad (4.11)$$

$$\hat{\sigma}_z | \mathbf{k}, \nu \rangle = \mathbb{I} | \mathbf{k}, -\nu \rangle, \quad (4.12)$$

$$\hat{\sigma}_x | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \begin{pmatrix} \nu e^{i\theta} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (4.13)$$

$$\hat{p}_x | \mathbf{k}, \nu \rangle = \hbar k_x | \mathbf{k}, \nu \rangle, \quad (4.14)$$

por lo que el primer término de la derecha de (4.10) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-\alpha}{2m} \xi_1 | \mathbf{k}, \nu \rangle &= \sum_{\nu'} \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-\alpha}{2m} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{p}_x \hat{\sigma}_z e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu' \rangle \langle \mathbf{k}, \nu' | \hat{\sigma}_x | \mathbf{k}, \nu \rangle \\ &= \frac{-\alpha}{2m} \hbar k_x \sum_{\nu'} \exp \left[ \frac{it}{\hbar} (-\mathcal{E}_{\nu'} + \mathcal{E}_{-\nu'}) \right] \delta_{\nu, -\nu'} \langle \mathbf{k}, \nu' | \hat{\sigma}_x | \mathbf{k}, \nu \rangle \\ &= \frac{\alpha i \hbar \nu}{2m} \frac{k_x^2}{k} \exp \left( \frac{i2\nu\alpha k t}{\hbar} \right), \end{aligned} \quad (4.15)$$

donde  $\delta_{\nu, \nu'}$  representa la delta de Kroenecker tal que  $\delta(\theta)_{\nu, -\nu'} = 1$  para  $\nu' = -\nu$  y  $\delta(\theta)_{\nu, -\nu'} = 0$  para  $\nu' \neq -\nu$ . Además, no es difícil ver que:

$$-\mathcal{E}_{\nu'} + \mathcal{E}_{-\nu'} = -\mathcal{E}_{-\nu} + \mathcal{E}_\nu = - \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \alpha k \right) + \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha k \right) = 2\alpha k. \quad (4.16)$$

Al realizar un procedimiento similar para la segunda componente del valor de expectación del conmutador (4.10), se obtiene que:

$$\langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-\alpha}{2m} \xi_2 | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{\alpha i \hbar \nu}{2m} \frac{k_x^2}{k} \exp \left( \frac{-i2\nu\alpha k t}{\hbar} \right), \quad (4.17)$$

por lo que el valor de expectación total del conmutador (4.10) es finalmente:

$$\langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{i\nu\alpha\hbar}{mk} k_x^2 \cos\left(\frac{2\alpha kt}{\hbar}\right) \quad (4.18)$$

Al sustituir el valor de expectación del conmutador (ec. (4.18)) en la Fórmula de Kubo (ec. (4.2)), se obtiene que la conductividad Hall para sistemas con interacción espín-órbita tipo Rashba es:

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{e}{\hbar A(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt \exp(i(\omega + i\eta)t) \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{i\nu\alpha\hbar}{mk} k_x^2 \cos\left(\frac{2\alpha kt}{\hbar}\right), \quad (4.19)$$

donde la parte que se integra respecto al tiempo es:

$$\int_0^\infty e^{i(\omega+i\eta)t} \cos\left(\frac{2\alpha kt}{\hbar}\right) dt = \frac{i(\omega + i\eta)}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\alpha k}{\hbar}\right)^2}, \quad (4.20)$$

por lo que la ec. (4.19) se reduce a

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{-e\alpha}{Am} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{\nu k_x^2}{k} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\alpha k}{\hbar}\right)^2}. \quad (4.21)$$

Para proceder, es necesario sustituir la sumatorias por integrales (ver Apéndice A) de tal forma que  $\sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \nu \rightarrow -\int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{Ak}{(2\pi)^2} dk d\theta$ , tal que:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{sz}(\omega) &= \frac{-e\alpha}{Am} \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k^2 \text{sen}^2\theta}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\alpha k}{\hbar}\right)^2} dk d\theta \\ &= \frac{-e\alpha}{4\pi m} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\alpha k}{\hbar}\right)^2} dk \end{aligned} \quad (4.22)$$

En (4.22) la integral respecto a  $k$  en la conductividad es definida como  $I_{k_R}$

$$\begin{aligned} I_{k_R} &= \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2\alpha k}{\hbar}\right)^2} dk \\ &= -\frac{\hbar^2}{4\alpha^2} (k_{F-} - k_{F+}) + \frac{\hbar^3}{16\alpha^3} (\omega + i\eta) \ln \left[ \frac{1 + \frac{2\alpha k}{\hbar(\omega+i\eta)}}{1 - \frac{2\alpha k}{\hbar(\omega+i\eta)}} \right] \Bigg|_{k_{F+}}^{k_{F-}}, \end{aligned} \quad (4.23)$$

Para evaluar la integral respecto a  $k$  es necesario considerar que la energía de Fermi es la

misma para la banda  $\mathcal{E}_+$  que para la banda  $\mathcal{E}_-$ , por lo que:

$$k_{F\pm}(\theta) = \mp \frac{\alpha m}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{\alpha^2 m^2}{\hbar^4} + \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}_F}, \quad (4.24)$$

con  $\mathcal{E}_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m}$  y  $k_F = \sqrt{2\pi n_e}$ , por lo que

$$k_{F-} - k_{F+} = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}, \quad (4.25)$$

además, es necesario utilizar la identidad funcional

$$\operatorname{arctanh}(x) = \frac{1}{2} \ln \left( \frac{1+x}{1-x} \right), \quad (4.26)$$

para  $|x| < 1$ . Con base en lo anterior se obtiene que la integral respecto a  $k$  es:

$$I_{\mathbf{k}_R} = \frac{-m}{2\alpha} + \frac{\hbar^3}{8\alpha^3} (\omega + i\eta) \left\{ \operatorname{arctanh} \left[ \frac{2\alpha k_{F-}}{\hbar(\omega + i\eta)} \right] - \operatorname{arctanh} \left[ \frac{2\alpha k_{F+}}{\hbar(\omega + i\eta)} \right] \right\}, \quad (4.27)$$

por lo que la conductividad Hall de espín para el efecto Rashba se puede escribir finalmente como:

$$\sigma_{xy}^{sz}(\omega) = \frac{e}{8\pi} - \frac{\hbar^3 e}{32\pi\alpha^2 m} (\omega + i\eta) \left\{ \operatorname{arctanh} \left[ \frac{2\alpha k_{F-}}{\hbar(\omega + i\eta)} \right] - \operatorname{arctanh} \left[ \frac{2\alpha k_{F+}}{\hbar(\omega + i\eta)} \right] \right\}, \quad (4.28)$$

lo que coincide con lo reportado en la literatura por Wong [1]. El resultado obtenido depende de la frecuencia del campo eléctrico externo (es decir la perturbación), del parámetro de Rashba, de la masa efectiva, de la densidad electrónica del 2DEG y de constantes universales. Es importante notar que en el límite estático, es decir, para  $\omega \rightarrow 0$  y  $\eta \rightarrow 0$ , el valor de la conductividad se reduce a:

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi}, \quad (4.29)$$

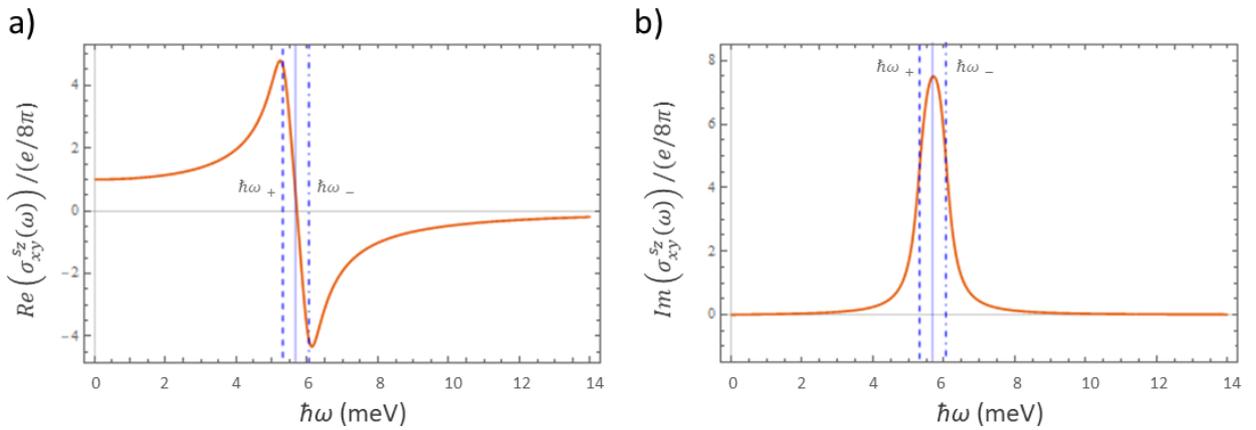
resultado que coincide con lo reportado por Rashba, et al. [39] y Nitta, et al. [40] y Sinova, et al. [41]. El valor de la conductividad Hall de espín para el límite estático es correspondiente al término no disipativo en la expresión obtenida, ya que no depende del campo eléctrico. Como se puede observar, el valor de la conductividad Hall de espín a frecuencia cero depende únicamente de constantes universales, por lo que el resultado en dicho límite no varía sin importar el material o la perturbación. Cabe mencionar que este resultado es válido en ausencia de interacciones electrón-electrón y sin dispersión apreciable debido a impurezas o desorden.

### 4.2.1. Discusión de resultados

La expresión para la conductividad Hall de espín para sistemas con efecto Rashba se muestra en la ec. 4.22 (en términos de las integrales en ángulo y momento) y 4.28 (después

de haber integrado). Para poder analizar la expresión obtenida como función de la frecuencia, se supondrá que el sistema que se analiza es un pozo cuántico (sistema bidimensional) constituido por arsenuro de indio ( $InAs$ ). Para este sistema se tomaron los siguientes parámetros:  $\alpha = 1.6 \times 10^{-11}$  eVm, una masa efectiva  $m = 0.055m_0$  (con  $m_0$  la masa en del electrón), una densidad electrónica  $n_e = 5 \times 10^{15}m^{-2}$  y se eligió un valor de  $\hbar\eta = 0.25 \times 10^{-3}$  meV.

Para observar el comportamiento de la conductividad Hall de espín para este sistema en un rango de energías, se evaluó la ec. (4.28). La parte real de la conductividad Hall de espín se muestra en la Figura 4.1a, mientras que la parte imaginaria se muestra en la Figura 4.1b.

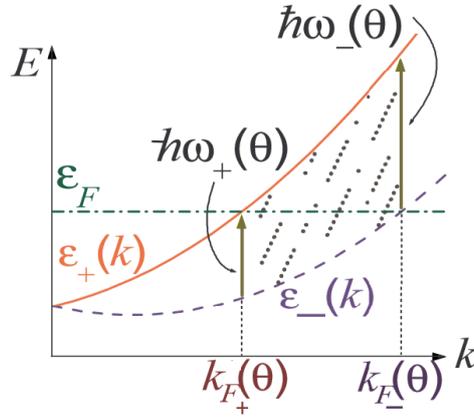


**Figura 4.1:** Curvas para la parte a) real y b) imaginaria de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción espín órbita tipo Rashba. En líneas discontinuas se muestran las energías asociadas a las frecuencias  $\omega_+$  y  $\omega_-$ . Estas energías representan los límites (mínimo y máximo) energéticos para que una transición óptica sea posible. La energía  $\hbar\omega_+$  y  $\hbar\omega_-$  corresponde a 5.31 meV y 6.05 meV, respectivamente (ver Figura 4.2).

En la gráfica de la parte real de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción espín órbita como función de la energía  $\hbar\omega$  (Figura 4.1a), se puede observar que a frecuencia pequeña ( $\omega \rightarrow 0$ ), el valor de  $(Re\sigma_{xy}^{sz}(\omega))/(e/(8\pi))$  se aproxima a 1, por lo que el valor de la conductividad Hall de espín se aproxima al valor de la conductividad universal. Para frecuencias altas, el valor de la conductividad Hall de espín se aproxima a 0.

Por otra parte, es importante mencionar que el valor elegido para  $\eta$  cambia ligeramente la posición de los mínimos y máximos que se observarán en los espectros de conductividad Hall de espín; además de suavizar la forma de la curva. Para valores de  $\eta$  mayores, el espectro óptico de la conductividad Hall de espín se suaviza, mientras que para valores menores de  $\eta$  los máximos y los mínimos son más prominentes.

La energía de dispersión de espín para este sistema ( $\Delta_R = 2k_F\alpha$ ) es 5.67 meV (línea sólida azul). En la Figura 4.1 se observa que la energía de dispersión corresponde a la energía para la cual la parte real de la conductividad Hall de espín vale cero y a la energía para la cual la parte imaginaria de la conductividad Hall de espín tiene un máximo. Para el caso de acoplamiento espín órbita tipo Rashba, existen dos frecuencias principales denominadas  $\omega_+$  y  $\omega_-$ , las cuales son el límite de la absorción óptica. La energía a la cual está asociada cada frecuencia ( $\hbar\omega_+$  y  $\hbar\omega_-$ , respectivamente) representa la energía necesaria para que exista una transición energética para las bandas  $\mathcal{E}_+$  y  $\mathcal{E}_-$ . Para este sistema  $\hbar\omega_+ = 5.31$  meV y  $\hbar\omega_- = 6.05$  meV. En la Figura 4.1a se puede observar que existe un máximo y un mínimo para la conductividad Hall de espín, los cuales corresponden a la energía dada por  $\hbar\omega_-$  y  $\hbar\omega_+$ . Físicamente, el máximo y el mínimo observado en la Figura 4.1a representan la menor y la mayor energía fotónica necesaria para que existan transiciones interbanda (ver Figura 4.2)



**Figura 4.2:** Esquema de transiciones energéticas interbanda de la banda  $\mathcal{E}_-$  a la banda  $\mathcal{E}_+$ . [18]

### 4.3. Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus lineal

La conductividad Hall de espín dependiente de la frecuencia para sistemas con interacción espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus lineal, se obtendrá utilizando de nuevo la ec. (4.2). Para este caso el Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = \hat{H}_R + \hat{H}_D = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x\hat{p}_y - \hat{\sigma}_y\hat{p}_x) + \frac{\beta}{\hbar}(\hat{p}_y\hat{\sigma}_y - \hat{p}_x\hat{\sigma}_x), \quad (4.30)$$

con eigenvalores y los eigenvectores descritos en las ecuaciones 2.30 y 2.31, respectivamente.

El valor para la velocidad en la dirección  $\hat{\mathbf{x}}$  y  $\hat{\mathbf{y}}$  para este caso son respectivamente,

$$\hat{v}_y(0) = \frac{\hat{p}_y}{m} - \frac{\alpha}{\hbar}\hat{\sigma}_x - \frac{\beta}{\hbar}\hat{\sigma}_y, \quad (4.31)$$

$$\hat{v}_x(0) = \frac{\hat{p}_x}{m} - \frac{\alpha}{\hbar}\hat{\sigma}_y - \frac{\beta}{\hbar}\hat{\sigma}_x, \quad (4.32)$$

y el operador de corriente de espín en el esquema de interacción se escribe como:

$$\hat{\mathbf{j}}_x^s(t) = e^{i\hat{H}t/\hbar} \frac{\hbar}{2m} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (4.33)$$

por lo que la expresión para el conmutador después de manipulaciones algebraicas es explícitamente:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] &= e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} \left( \frac{-\alpha\hat{\sigma}_x - \beta\hat{\sigma}_y}{2m} \right) \\ &+ \left( \frac{\alpha\hat{\sigma}_x + \beta\hat{\sigma}_y}{2m} \right) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Al obtener el valor de expectación del conmutador se obtiene que:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle &= \langle \mathbf{k}, \nu | e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} \left( \frac{-\alpha\hat{\sigma}_x - \beta\hat{\sigma}_y}{2m} \right) | \mathbf{k}, \nu \rangle \\ &+ \langle \mathbf{k}, \nu | \left( \frac{\alpha\hat{\sigma}_x + \beta\hat{\sigma}_y}{2m} \right) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu \rangle \quad (4.35) \\ &= \langle \mathbf{k}, \nu | \chi_1 | \mathbf{k}, \nu \rangle + \langle \mathbf{k}, \nu | \chi_2 | \mathbf{k}, \nu \rangle, \end{aligned}$$

y recordando que  $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta\sin 2\theta}$ , el primer término de la ec. (4.35) se reduce a

$$\langle \mathbf{k}, \nu | \chi_1 | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{-\hbar i \nu k_x^2}{2mk\Delta(\theta)} (\alpha^2 - \beta^2) \exp\left(\frac{i2\Delta(\theta)k\nu t}{\hbar}\right) \quad (4.36)$$

donde hemos usado que la diferencia entre los eigenvalores se expresa como:

$$\mathcal{E}_\nu - \mathcal{E}_{-\nu} = \left( \frac{\hbar k^2}{2m} + \nu k \Delta(\theta) \right) - \left( \frac{\hbar k^2}{2m} - \nu k \Delta(\theta) \right) = 2\nu k \Delta(\theta) \quad (4.37)$$

Similarmente, el valor de expectación de  $\chi_2$  se puede escribir como:

$$\langle \mathbf{k}, \nu | \chi_2 | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{-\hbar i \nu k_x^2}{2mk\Delta(\theta)} (\alpha^2 - \beta^2) \exp\left(\frac{-i2\Delta(\theta)k\nu t}{\hbar}\right), \quad (4.38)$$

por lo que el valor de expectación de la expresión obtenida en el conmutador es:

$$\langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle = \frac{-\nu i \hbar k_x^2}{mk\Delta(\theta)} (\alpha^2 - \beta^2) \cos\left(\frac{2k\Delta(\theta)t}{\hbar}\right) \quad (4.39)$$

Al sustituir el valor de expectación del conmutador en la ec. 4.2, se obtiene la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal

$$\begin{aligned}\sigma_{xy}^{sz} &= \frac{e}{\hbar A(\omega + i\eta)} \int_0^\infty e^{i(\omega + i\eta)t} \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{-\nu i \hbar k_x^2}{mk\Delta(\theta)} (\alpha^2 - \beta^2) \cos\left(\frac{2k\Delta(\theta)t}{\hbar}\right) dt \\ &= \frac{e}{A} \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{\nu k_x^2}{mk\Delta(\theta)} (\beta^2 - \alpha^2) \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2}\end{aligned}\quad (4.40)$$

Tal como se hizo para el caso Rashba, para obtener una expresión para la conductividad Hall de espín, en este caso es necesario sustituir  $\sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \nu \rightarrow -\int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{Ak}{(2\pi)^2} dk d\theta$  y  $kx = k\cos\theta$ , que conduce a

$$\sigma_{xy}^{sz} = \frac{-e(\beta^2 - \alpha^2)}{m(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k^2 \cos^2\theta}{\Delta(\theta)} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2} dk d\theta, \quad (4.41)$$

donde

$$k_{F\pm}(\theta) = \mp \frac{\Delta(\theta)m}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{\Delta^2(\theta)m^2}{\hbar^4} + \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}_F}, \quad (4.42)$$

por lo que

$$k_{F-} - k_{F+} = \frac{2m\Delta(\theta)}{\hbar^2} \quad (4.43)$$

Es importante notar que la expresión para la conductividad Hall de espín para este sistema (ec. 4.41) se reduce, como se espera, a la ecuación para la conductividad Hall de espín para sistemas con efecto Rashba ( $\beta = 0$ ) mostrada en la ec. (4.22). La integral respecto a  $k$  que está inmersa en la expresión para la conductividad Hall de espín para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus es:

$$\begin{aligned}I_{k_{RD}} &= \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2} dk \\ &= \frac{-\hbar^2}{8\Delta^2(\theta)} \left\{ k \ln \left[ (\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2 \right] \Big|_{k_{F+}}^{k_{F-}} - \int_{k_{F-}}^{k_{F+}} \ln \left[ (\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2 \right] dk \right\}\end{aligned}\quad (4.44)$$

Al integrar el segundo término de la ec. 4.44 resultan tres términos, del cual uno de ellos se elimina con el primer término de la ec. 4.44, por lo que el resultado final de la integral en  $k$  se puede escribir como:

$$I_{k_{RD}} = \frac{(\omega + i\eta)}{2 \left(\frac{2\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^3} \ln \left[ \frac{\left| \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar} + (\omega + i\eta) \right|}{\left| \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar} - (\omega + i\eta) \right|} \right] \Big|_{k_{F+}}^{k_{F-}} - \frac{1}{\left(\frac{2\Delta(\theta)}{\hbar}\right)^2} k \Big|_{k_{F+}}^{k_{F-}} \quad (4.45)$$

Para evaluar el logaritmo natural del primer término de  $I_{\mathbf{k}RD}$ , es necesario considerar que  $2k_{F+}\Delta(\theta) < \hbar\omega < 2k_{F-}\Delta(\theta)$ , tal que

$$\begin{aligned} \ln\Pi &= \ln \left. \frac{\left| \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar} + (\omega + i\eta) \right|}{\left| \frac{2k\Delta(\theta)}{\hbar} - (\omega + i\eta) \right|} \right|_{k_{F+}}^{k_{F-}} = \ln \left. \frac{\left| \frac{2k_{F-}\Delta(\theta)}{\hbar} + (\omega + i\eta) \right|}{\left| \frac{2k_{F-}\Delta(\theta)}{\hbar} - (\omega + i\eta) \right|} \right| \frac{2k_{F+}\Delta(\theta)}{\hbar} - (\omega + i\eta)}{\frac{2k_{F+}\Delta(\theta)}{\hbar} + (\omega + i\eta)} \\ &= \ln \left[ \frac{(\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_{F-})(\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta(\theta)k_{F+})}{(2\Delta(\theta)k_{F-} - \hbar(\omega + i\eta))(\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_{F+})} \right] \end{aligned} \quad (4.46)$$

También es importante notar que típicamente  $\frac{m\Delta(\theta)}{\hbar^2 k_F} \ll 1$ , por lo que al sustituir  $k_{F\pm}$  por su equivalencia en términos de la  $k_F$ , se obtiene que

$$\begin{aligned} \frac{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_{F-}}{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_{F+}} &= \frac{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_F + 2\Delta(\theta)k_F \left( \frac{\Delta(\theta)m}{\hbar^2 k_F} \right)}{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_F - 2\Delta(\theta)k_F \left( \frac{\Delta(\theta)m}{\hbar^2 k_F} \right)} \\ &\approx \frac{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_F}{\hbar(\omega + i\eta) + 2\Delta(\theta)k_F} = 1, \end{aligned} \quad (4.47)$$

por lo que se puede escribir

$$\ln\Pi = \ln \left[ \frac{\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta(\theta)k_{F+}}{2\Delta(\theta)k_{F-} - (\hbar(\omega + i\eta))} \right], \quad (4.48)$$

y la integral respecto a  $k$  se reduce a:

$$I_{\mathbf{k}RD}(\theta) = \frac{(\omega + i\eta)}{2 \left( \frac{2\Delta(\theta)}{\hbar} \right)^3} \ln \left[ \frac{\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta(\theta)k_{F+}}{2\Delta(\theta)k_{F-} - (\hbar(\omega + i\eta))} \right] - \frac{m}{2\Delta(\theta)} \quad (4.49)$$

Así que sólo queda por integrar en el ángulo  $\theta$  en (4.41). Con base en la ecuación anterior, se obtiene que la expresión que describe la conductividad Hall de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita Rashba y Dresselhaus (sólo considerando el término lineal) es:

$$\sigma_{xy}^{sz}(\omega) = \frac{e\hbar^2}{32\pi^2 m} (\beta^2 - \alpha^2) \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2\theta}{\Delta^4(\theta)} \left[ \frac{(\omega + i\eta)\hbar}{2} \ln \left\{ \frac{\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta(\theta)k_{F+}}{2\Delta(\theta)k_{F-} - (\hbar(\omega + i\eta))} \right\} + \frac{4m\Delta^2(\theta)}{\hbar^2} \right] d\theta \quad (4.50)$$

Como se puede observar, la expresión para la conductividad Hall de espín para sistema con

efecto Rashba y Dresselhaus (considerando únicamente el término lineal) depende del material que constituye el sistema (ya que depende de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$ ), de la masa efectiva del electrón, la frecuencia  $\omega$  del campo eléctrico, la densidad electrónica del sistema y de constantes fundamentales. La dependencia de esta conductividad es la misma que la de la conductividad Hall de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba.

Para el límite estático ( $\omega \rightarrow 0$  y  $\eta \rightarrow 0$ ) la expresión para la conductividad Hall de espín se reduce a:

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e\hbar^2}{32\pi^2m}(\beta^2 - \alpha^2) \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2\theta}{\Delta^4(\theta)} \frac{4m\Delta^2(\theta)}{\hbar^2} d\theta = \frac{(\beta^2 - \alpha^2)e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \frac{\cos^2\theta}{\Delta^2(\theta)} d\theta \quad (4.51)$$

en la que la integral respecto a  $\theta$  es:

$$\int_0^{2\pi} \frac{\cos^2\theta}{\Delta^2(\theta)} d\theta = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\Delta^2(\theta)} d\theta + \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{\Delta^2(\theta)} d\theta, \quad (4.52)$$

donde

$$\int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{\Delta^2(\theta)} d\theta = 0 \quad (4.53)$$

y, por su parte el segundo término de la integral (4.52) es:

$$\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\Delta^2(\theta)} d\theta = \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \frac{1}{\Delta^2(\theta)} d\theta = \frac{\arctan \left[ \frac{(\beta^2 + \alpha^2)\tan\theta - 2\alpha\beta}{|\beta - \alpha||\beta + \alpha|} \right]}{|\beta - \alpha||\beta + \alpha|} \Bigg|_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} \quad (4.54)$$

Para evaluar  $I_{\mathbf{k}RD}$  es importante recordar que  $\tan\left(\frac{3\pi}{2}\right) = -\infty$ ,  $\tan\left(\frac{\pi}{2}\right) = \infty$ ,  $\lim_{x \rightarrow \infty} \arctan(x) = \frac{\pi}{2}$ ,  $\lim_{x \rightarrow -\infty} \arctan(x) = -\frac{\pi}{2}$  y  $\arctan(-x) = -\arctan(x)$ ; por lo que

$$\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{1}{\Delta^2(\theta)} d\theta = \frac{\pi}{|\beta^2 - \alpha^2|}, \quad (4.55)$$

de tal forma que la conductividad Hall de espín para interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal en el límite estático es:

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e(\alpha^2 - \beta^2)}{8\pi|\alpha^2 - \beta^2|} = \frac{e}{8\pi} \text{sign}(\alpha^2 - \beta^2), \quad (4.56)$$

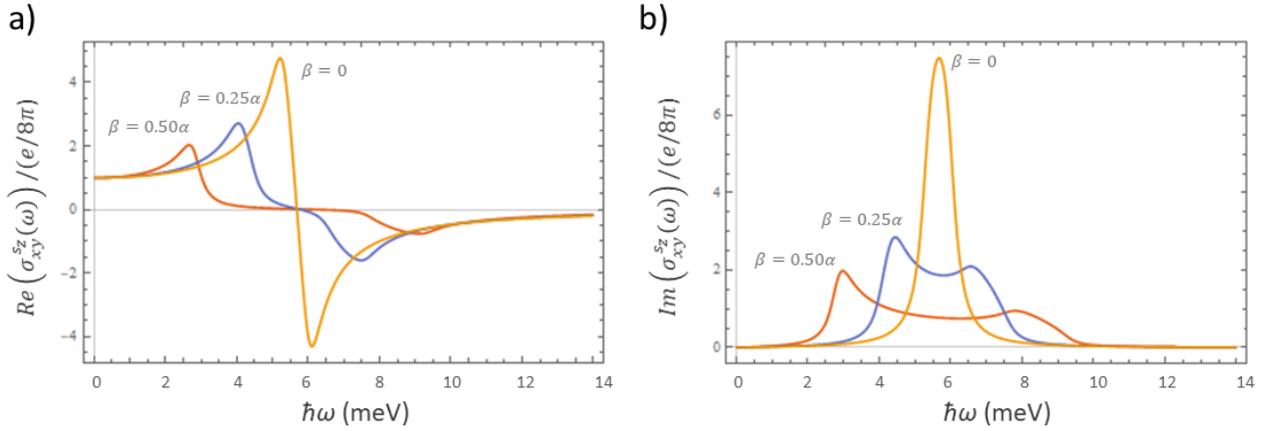
esta expresión coincide con lo reportado en la literatura por Chen, et al [42], Mireles, et al [43] y Shen, et al [44]. Como se puede observar, en el límite estático la conductividad depende de los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  y de constantes fundamentales. La expresión para la conductividad Hall de espín encontrada se reduce a la encontrada para el caso Rashba ( $\beta = 0$ ) en el límite

estático (ec. (4.22)).

### 4.3.1. Discusión de resultados

Para estudiar la conductividad Hall de espín como función de la frecuencia se utilizaron los mismos parámetros que para el caso anterior, sólo que para este caso  $\beta \neq 0$ . Para este sistema  $\alpha_0 = 1.6 \times 10^{-11}$  eVm. En todos los casos  $\alpha = \alpha_0$ , a menos que se indique lo contrario. Para obtener la curva de conductividad, se graficó la ec. (4.41). La integral respecto a  $k$  fue resuelta analíticamente, mientras que la integral respecto a  $\theta$  fue resuelta numéricamente, ambas integrales fueron resueltas en *Mathematica*. Los límites de la integral se obtuvieron utilizando la ec. (4.42).

Se obtuvo la gráfica de la conductividad Hall de espín v.s. la energía  $\hbar\omega$  para  $\beta = 0.50\alpha$ ,  $\beta = 0.25\alpha$  y  $\beta = 0$  (ver Figura 4.3), con el propósito de observar el cambio en el comportamiento de la conductividad al variar el valor de  $\beta$ .



**Figura 4.3:** Gráficas para la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus lineal para  $\beta = 0.50\alpha$  (línea sólida naranja),  $\beta = 0.25\alpha$  (línea sólida azul) y  $\beta = 0$  (línea sólida amarilla)

Al igual que en el caso donde sólo se tiene interacción espín órbita tipo Rashba, para la interacción conjunta de Rashba y Dresselhaus lineal el valor de la parte real de la conductividad Hall de espín para frecuencias bajas se aproxima al valor de la conductividad universal, mientras que para altas frecuencias, el valor de la conductividad se aproxima a cero. Además, se observa que cuando el valor de  $\beta$  disminuye, el rango de energías para las cuales hay transiciones ópticas permitidas es menor; sin embargo, el valor mínimo y máximo para la conductividad Hall de espín es mayor.

Al analizar la parte imaginaria de la conductividad Hall de espín se aprecia que, al igual que para la parte real, el espectro se ensancha cuando el valor del parámetro  $\beta$  aumenta. En la parte imaginaria de la conductividad para  $\beta = 0.50\alpha$  se observa que existe un rango de energías (aproximadamente entre 5 y 7 meV) para el cual el valor de la conductividad varía poco. Además, en la parte real de este espectro se observa que para  $4 \text{ meV} < \hbar\omega < 8 \text{ meV}$  el valor de la conductividad es constante y cercano a cero. Es importante observar que para el caso  $\beta = 0$  se obtienen las gráficas obtenidas para el caso Rashba y es este caso el que presenta una mayor simetría comparado con los casos en los que  $\beta \neq 0$ .

Las características del espectro para este sistema, de acuerdo a lo reportado por Wong [1], pueden ser entendidos por la anisotropía de desdoblamiento de espín debido a la presencia simultánea del efecto Rashba y Dresselhaus. Para el caso Rashba existían dos frecuencias principales, debido a que no existe una dependencia angular. Para el caso simultáneo de efecto Rashba y Dresselhaus existen cuatro frecuencias principales:  $\omega_{\pm}$  que se definen a través de los límites de absorción óptica y  $\omega_a$  y  $\omega_b$  surgen de la *Densidad Conjunta de Estados*. La Densidad Conjunta de Estados (JDOS, por sus siglas en inglés) es el término que se usa para llamar a los sistemas cuya densidad de estados es diferente porque existen transiciones ópticas entre bandas y sus vectores de onda satisfacen que:  $\mathcal{E}_+(k, \theta) - \mathcal{E}_-(k, \theta) = \hbar\omega$  [2, 45]. La definición de las energías importantes para este sistema es:

$$\hbar\omega_+ = 2k_{F_+} \left( \frac{\pi}{4} \right) \Delta \left( \frac{\pi}{4} \right), \quad (4.57)$$

$$\hbar\omega_- = 2k_{F_-} \left( \frac{3\pi}{4} \right) \Delta \left( \frac{3\pi}{4} \right), \quad (4.58)$$

$$\hbar\omega_a = 2k_{F_-} \left( \frac{\pi}{4} \right) \Delta \left( \frac{\pi}{4} \right) \quad (4.59)$$

$$\hbar\omega_b = 2k_{F_+} \left( \frac{3\pi}{4} \right) \Delta \left( \frac{3\pi}{4} \right) \quad (4.60)$$

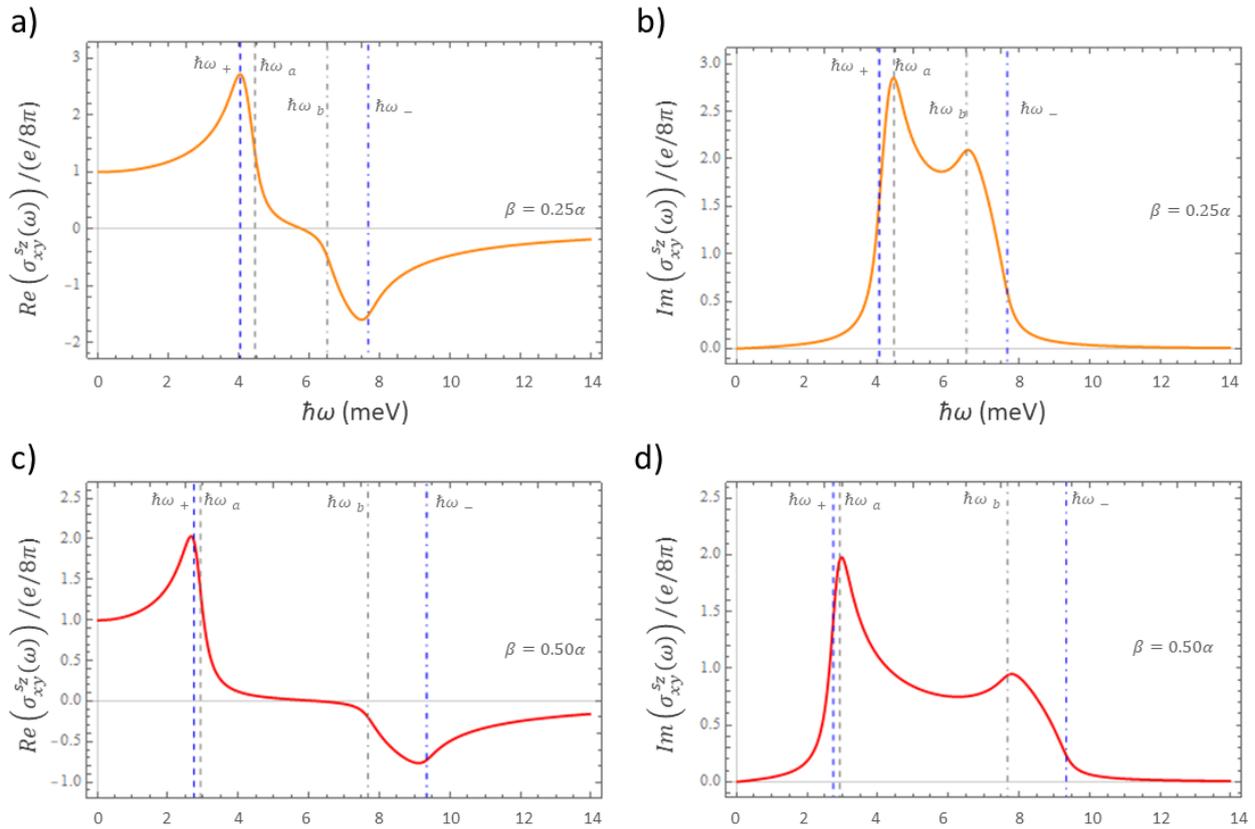
Utilizando las definiciones anteriores, se llega a que para este sistema

$$\hbar\omega_{\pm} = 2 \left( \mp \frac{m}{\hbar^2} |\alpha \mp \beta|^2 + k_F |\alpha \mp \beta| \right) \quad (4.61)$$

$$\hbar\omega_a = 2 \left( \frac{m}{\hbar^2} |\alpha - \beta|^2 + k_F |\alpha - \beta| \right) \quad (4.62)$$

$$\hbar\omega_b = 2 \left( -\frac{m}{\hbar^2} |\alpha + \beta|^2 + k_F |\alpha + \beta| \right) \quad (4.63)$$

Para  $\beta = 0.25\alpha$ , se encontró que  $\hbar\omega_+ = 4.05$  meV,  $\hbar\omega_a = 4.46$  meV,  $\hbar\omega_b = 6.51$  meV y  $\hbar\omega_- = 7.66$  meV tal y como se muestra en la Figura 4.4a y 4.4b. Por su parte, para  $\beta = 0.50\alpha$ , se encontró que  $\hbar\omega_+ = 2.74$  meV,  $\hbar\omega_a = 2.93$  meV,  $\hbar\omega_b = 7.68$  meV y  $\hbar\omega_- = 9.34$  meV tal y como se muestra en la Figura 4.4c y 4.4d.



**Figura 4.4:** Gráficas para la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal para  $\beta = 0.25\alpha$  (a y b) y  $\beta = 0.50\alpha$  (c y d). En todos los casos  $\hbar\omega_+$  se muestra en línea discontinua azul,  $\hbar\omega_a$  en línea discontinua gris,  $\hbar\omega_b$  en línea punteada gris y  $\hbar\omega_-$  en línea punteada azul.

## 4.4. Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus (3D)

Para obtener la conductividad Hall de espín en sistemas con interacción conjunta Rashba y Dresselhaus (considerando su contribución cúbica) es necesario obtener eigenvalores y

eigenvectores para dicho sistema. El Hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = \hat{H}_R + \hat{H}_{D^3} = \frac{p^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar}(\hat{\sigma}_x \hat{p}_y - \hat{\sigma}_y \hat{p}_x) + \frac{\beta}{\hbar}(\hat{p}_y \hat{\sigma}_y - \hat{p}_x \hat{\sigma}_x) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(\hat{p}_x \hat{p}_y^2 \hat{\sigma}_x - \hat{p}_y \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) \quad (4.64)$$

Y sus eigenvalores se pueden escribir en forma compacta como:

$$\Psi_\nu(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\nu i}{k \Delta(k, \theta)} (\alpha k_+ - i \beta k_- - \gamma k_+ k^2 \text{sen} \theta \text{cos} \theta) \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

Debido a la contribución cúbica de Dresselhaus, los eigenvalores que describen las bandas de dispersión contienen términos donde  $k$  está elevada a la sexta potencia, tal que:

$$\mathcal{E}_\nu = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \nu \sqrt{\alpha^2 k^2 + \beta^2 k^2 - 2\alpha\beta k^2 \text{sen}(2\theta) - \alpha\gamma k^4 \text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k^4 \text{sen}^2(2\theta) + \frac{\gamma}{4} k^6 \text{sen}^2(2\theta)}, \quad (4.66)$$

expresión que, aunque analítica, resulta muy intrincada en cálculos posteriores ya que la integración respecto a  $k$  resulta muy complicada de resolver analíticamente por lo que se recurre a la integración numérica.

Sin embargo, bajo consideraciones físicamente aceptables es posible reescribir los eigenvalores de manera que sean más sencillos de manipular. Para esto se propone que la expresión  $\Delta(\theta)$  obtenida para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus lineal sea llamado  $\Delta_0(\theta)$ , definida por

$$\Delta_0(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta \text{sen}(2\theta)}, \quad (4.67)$$

y similarmente para el caso del Hamiltoniano incluyendo el término cúbico definimos

$$\Delta_\gamma(k, \theta) = \sqrt{\gamma k^2 \text{sen}(2\theta) \left[ -\alpha + \beta \text{sen}(2\theta) + \frac{\gamma}{4} k^2 \text{sen}(2\theta) \right]}, \quad (4.68)$$

que al sustituir  $k$  por  $k_{F_0}(\theta)$  con

$$k_{F_0}(\theta) = -\frac{\Delta_0(\theta)m}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{\Delta_0^2(\theta)m^2}{\hbar^4} + \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}_F} \quad (4.69)$$

para los términos de la contribución cúbica (con el propósito de simplificar las operaciones

posteriores), por lo que  $\Delta_\gamma(k, \theta)$  se transforma en:

$$\Delta_{\gamma_0}(k_{F_0}, \theta) = \sqrt{\gamma k_{F_0}^2 \text{sen}(2\theta) \left[ -\alpha + \beta \text{sen}(2\theta) + \frac{\gamma}{4} k_{F_0}^2 \text{sen}(2\theta) \right]}, \quad (4.70)$$

por lo que se puede definir  $\Delta^2(k, \theta) \equiv \Delta_0^2(\theta) + \Delta_\gamma^2(k, \theta)$  y por tanto

$$\Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta) \equiv \Delta_0^2(\theta) + \Delta_{\gamma_0}^2(k_{F_0}, \theta) \quad (4.71)$$

Usando el valor simplificado de los eigenvalores, es decir, usando  $\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$  se obtiene que:

$$\mathcal{E}_{\nu 0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \nu k \Delta_{F_0}(\theta) \quad (4.72)$$

Para obtener la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta de efecto Rashba, Dresselhaus lineal y Dresselhaus cúbico, es necesario obtener las velocidades electrónicas, ya que son ingredientes esenciales del conmutador que se muestra en la ec. (4.2). Siguiendo el procedimiento realizado para los sistemas anteriores, se debe calcular el conmutador y obtener su valor de expectación para llegar a una expresión similar a la de que ec. (4.2). Posteriormente, resuelve analíticamente la integral en el tiempo y la integral respecto a  $k$  (ver Apéndice B). Debido a la consideración hecha a los eigenvalores se tiene que los límites de integración son

$$k_{F_\pm} = \mp \frac{m \Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{m^2 \Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^4} + \frac{2m}{\hbar^2} \mathcal{E}_F} \quad (4.73)$$

por lo que

$$k_{F_-} - k_{F_+} = \frac{2m \Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^2}, \quad (4.74)$$

De esta forma, la conductividad Hall de espín es

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{sz}(\omega) = & \frac{-e}{4\pi^2 m} \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \frac{\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)} \frac{(\omega + i\eta)}{2 \left( \frac{(2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta))}{\hbar} \right)^3} \ln \left[ \frac{\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)k_{F_+}}{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)k_{F_-} - (\hbar(\omega + i\eta))} \right] d\theta \\ & - \frac{-e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \cos^2 \theta \frac{\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta)} d\theta, \end{aligned} \quad (4.75)$$

con

$$\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta) \equiv -\alpha^2 + \beta^2 + \alpha\gamma k_{F_0}^2 \text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k_{F_0}^2 \text{cos}(2\theta) - \frac{\gamma^2}{4} k_{F_0}^4 \text{sen}^2(2\theta) \quad (4.76)$$

La expresión para la conductividad Hall de espín depende de  $k_{F_0}$ , los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\gamma$ , la frecuencia  $\omega$  del campo eléctrico, la masa efectiva del electrón,  $k_F$  y constantes fundamentales.

Al sustituir el valor de  $\mathcal{G}_{F_0}(\theta)$  y de  $\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$  en la ec. (4.75) se puede notar que, al incluir el término cúbico de Dresselhaus, la expresión resultante para la conductividad Hall de espín está compuesta múltiples contribuciones en  $\theta$  (en el numerador y en el denominador). Debido a esto, la expresión resultante de la integral analítica respecto  $\theta$  es muy extensa aunque exacta y no se mostrará en esta sección. Por otro lado se observa que en el límite  $\omega \rightarrow 0$  y  $\eta \rightarrow 0$  el valor para la conductividad es

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \text{cos}^2\theta \frac{\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta)} d\theta, \quad (4.77)$$

que al hacer  $\gamma = 0$ , la expresión se reduce a la obtenida para  $\omega \rightarrow 0$  y  $\eta \rightarrow 0$  en el caso en el que no se considera la contribución cúbica del acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus.

Con el propósito de obtener una expresión analítica para la conductividad Hall de espín se hicieron tres consideraciones respecto a la expresión obtenida para la conductividad Hall de espín en el límite estático (ec.(4.77)). La primera consideración fue que  $\Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta) = \Delta_F^2(\theta)$  y que  $\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta) = \mathcal{G}_F(\theta)$ , lo cual reduce el número de términos que es necesario integrar. La segunda consideración fue que para un pozo de potencial cuyo ancho efectivo es muy grande  $\alpha\gamma \gg \gamma\beta$ . Finalmente, se consideró que por su orden de magnitud  $\alpha\gamma k_F^2 \gg \gamma^2 k_F^4$ , por lo que la siguiente aproximación es válida sólo para sistemas que cumplan esta consideración (como es el caso de los espectros obtenidos más adelante para InAs). La expresión mostrada en ec.(4.77) se transforma en

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{sz}(0) &= \frac{e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \text{cos}^2\theta \frac{-\alpha^2 + \beta^2 + \alpha\gamma k_F^2 \text{sen}(2\theta)}{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta \text{sen}(2\theta) - \alpha\gamma k_F^2 \text{sen}(2\theta)} \\ &= \frac{e}{8\pi} \left[ \frac{\alpha\gamma k_F^2}{2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2} + \frac{(\alpha^2 - \beta^2)(2\alpha\beta) - 2\alpha\gamma\beta^2 k_F^2}{(2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2)\sqrt{(\alpha^2 - \beta^2)^2 - (\alpha\gamma k_F^2)^2 - 4\alpha^2\beta\gamma k_F^2}} \right] \\ &\approx \frac{e}{8\pi} \left[ \frac{\alpha\gamma k_F^2}{2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2} + \frac{(2\alpha\beta)(\alpha^2 - \beta^2)}{(2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2)|\alpha^2 - \beta^2|} \right], \end{aligned} \quad (4.78)$$

que al definir  $s_{RD} = \frac{(\alpha^2 - \beta^2)}{|\alpha^2 - \beta^2|} = \pm 1$  (con  $s_{RD} = +1$  para  $\alpha > \beta$  y  $s_{RD} = -1$  para  $\alpha < \beta = -1$ ) y  $\mathcal{X}_\gamma = \frac{(2\beta)}{(2\beta + \gamma k_F^2)}$ , la conductividad Hall de espín aproximada se puede escribir como

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) \approx \frac{e}{8\pi} [1 - \mathcal{X}_\gamma(1 - s_{RD})] \quad (4.79)$$

Es importante notar que para  $\gamma = 0$  la expresión para la conductividad Hall de espín se reduce a

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} \frac{\alpha^2 - \beta^2}{|\alpha^2 - \beta^2|} = \frac{e}{8\pi} \text{sign}(\alpha^2 - \beta^2) \quad (4.80)$$

la cual es la expresión encontrada para el límite estático en el caso de la interacción Rashba y Dresselhaus lineal.

Otro caso en el que se puede obtener una expresión analítica es el caso en el que  $\alpha \rightarrow 0$  (lo cual es posible, ya que  $\alpha$  es modulable) para el límite estático. Para realizar esta aproximación se partió de la expresión mostrada en la ec. (4.77). Por fines de practicidad, se consideró que  $k_{F_0}(\theta) \rightarrow k_F$  en los términos  $\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$  y  $\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$ , lo cual reduce el número de términos que dependen de  $\theta$ , por lo que simplifica la integral. La conductividad Hall de espín para este sistema es:

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \cos^2\theta \left( \frac{\beta^2 + \beta\gamma k_F^2 \cos 2\theta - \frac{\gamma^2}{4} k_F^4 \sin^2 2\theta}{\beta^2 + (\beta\gamma k_F^2 + \frac{\gamma^2}{4} k_F^4) \sin^2 2\theta} \right) \quad (4.81)$$

Después de realizar apropiadamente la integral y de factorizar, se obtiene que para este sistema la conductividad Hall de espín es finalmente,

$$\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} \left( 1 - \frac{\beta + \frac{\gamma}{2} k_F^2}{\beta + \frac{\gamma}{4} k_F^2} \sqrt{\frac{\beta^2}{\beta^2 + \beta\gamma k_F^2 + \frac{\gamma^2}{4} k_F^4}} - \frac{\sqrt{\beta^2 + \beta\gamma k_F^2 + \frac{\gamma^2}{4} k_F^4}}{\beta + \frac{\gamma}{4} k_F^2} \right) \quad (4.82)$$

#### 4.4.1. Discusión de resultados para InAs

Para conocer la contribución del término cúbico de la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus a la conductividad Hall de espín se analizó el comportamiento del espectro para diferentes aproximaciones de la conductividad, para diferentes valores de  $\beta$  y para diferentes valores de  $\gamma$ . El análisis realizado en esta sección se hizo considerando los mismos parámetros que para el caso Dresselhaus lineal y se utilizó el valor reportado por Fabian, et al [46]. para el parámetro cúbico  $\gamma_0 = 4.863 \times 10^{-29} \text{eV m}^3$ . Las aproximaciones utilizadas para evaluar el comportamiento

del término cúbico son:

$$\sigma_{xy}^{s_z(1)}(\omega) = \frac{-e}{(2\pi)^2 m} \int_0^{2\pi} \int_{k_F^+}^{k_F^-} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta_F(k_F, \theta)}{\hbar}\right)^2} \frac{k^2 \cos^2 \theta}{\Delta_F(k_F, \theta)} \mathcal{G}(k, \theta) dk d\theta, \quad (4.83)$$

con

$$k_F^\pm = k_F \mp \frac{m\Delta_F(\theta)}{\hbar^2} \quad (4.84)$$

con  $\Delta_F(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta^2 - 2\alpha\beta \sin(2\theta) - \alpha\gamma k_F^2 \sin(2\theta) + \beta\gamma k_F^2 \sin^2(2\theta) + \frac{\gamma^2}{4} k_F^4 \sin^2(2\theta)}$ . Esta aproximación utiliza  $\Delta_F(k_F, \theta)$  y  $\mathcal{G}_F(k_F, \theta)$  con lo que se está ignorando la contribución del acoplamiento espín órbita que está presente en  $\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$  y  $\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$ . Sin embargo, esta aproximación fue incluida porque permite observar cómo cambia el espectro para la conductividad al compararlo con una mejor aproximación que es

$$\sigma_{xy}^{s_z(2)}(\omega) = \frac{-e}{(2\pi)^2 m} \int_0^{2\pi} \int_{k_{F_+}}^{k_{F_-}} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^2} \frac{k^2 \cos^2 \theta}{\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)} \mathcal{G}(k, \theta) dk d\theta, \quad (4.85)$$

donde los límites de aproximación se muestran en la ec. (B.19).

Para obtener las energías principales se utilizaron las ecuaciones 4.57, 4.58, 4.59 y 4.60, en dichas ecuaciones se sustituyó  $\Delta(\theta)$  por  $\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$ .

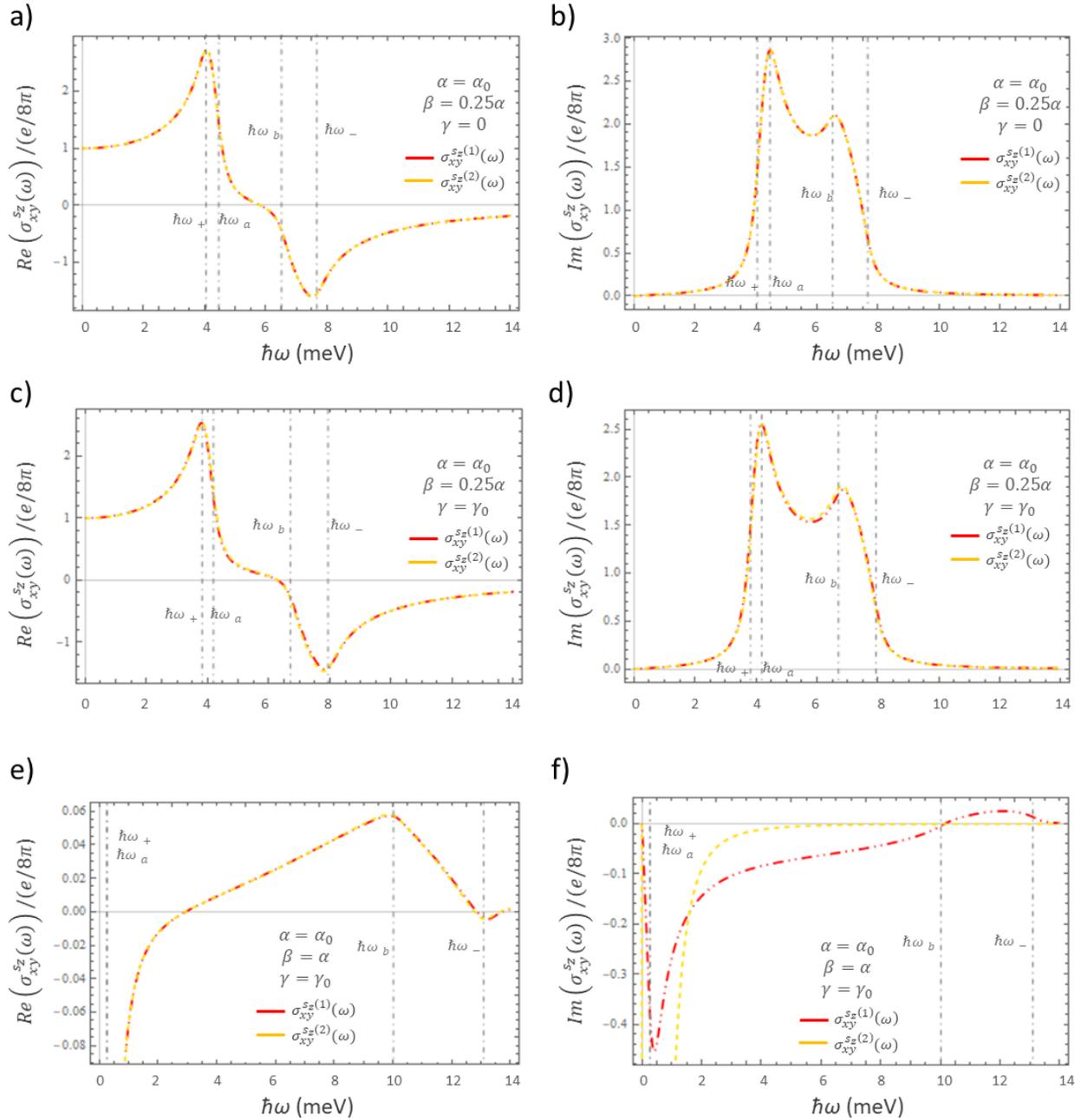
### Caso $\beta = 0.25\alpha$

Para el caso  $\beta = 0.25\alpha$  se graficaron los espectros de la parte real e imaginaria de las aproximaciones a la conductividad Hall de espín mostradas en las ecuaciones 4.83 y 4.85. Primero se graficaron los casos  $\gamma = 0$  (Figura 4.5a y 4.5b),  $\gamma = \gamma_0$  (Figura 4.5c y 4.5d) y el caso  $\beta = \alpha$  con  $\gamma = \gamma_0$  (Figura 4.5e y 4.5f).

Se observa que para el caso  $\gamma = 0$  el espectro de la conductividad Hall de espín (Figuras 4.5a y 4.5b) se reduce como se esperaba al mostrado considerando únicamente la contribución lineal de Dresselhaus. Las energías importantes son  $\hbar\omega_+ = 4.05$  meV,  $\hbar\omega_a = 4.46$  meV,  $\hbar\omega_b = 6.51$  meV y  $\hbar\omega_- = 7.66$  meV. Se visualiza que para este sistema las tres aproximaciones coinciden, lo cual cumple con lo esperado, ya que al hacer  $\gamma = 0$  las tres expresiones se reducen a la expresión de la conductividad para el caso que considera Dresselhaus lineal.

Para el caso  $\gamma = \gamma_0$  (Figuras 4.5c y 4.5d) se observa que, en comparación con el caso  $\gamma = 0$ , el espectro se ensanchó y el valor de los máximos y los mínimos (tanto en la parte real como en la parte imaginaria) disminuyeron. Las energías importantes son  $\hbar\omega_+ = 3.82$  meV,

$\hbar\omega_a = 4.19$  meV,  $\hbar\omega_b = 6.70$  meV y  $\hbar\omega_- = 7.94$  meV, por lo que el rango de energía para el que existen transiciones ópticas interbanda es mayor que para el caso  $\gamma = 0$ . En este caso la aproximación mostrada en la ec. (4.85) muestra ligeras diferencias en el mínimo de la parte real de la conductividad y en los extremos que la parte imaginaria del espectro respecto a la aproximación mostrada en la ec. (4.83).



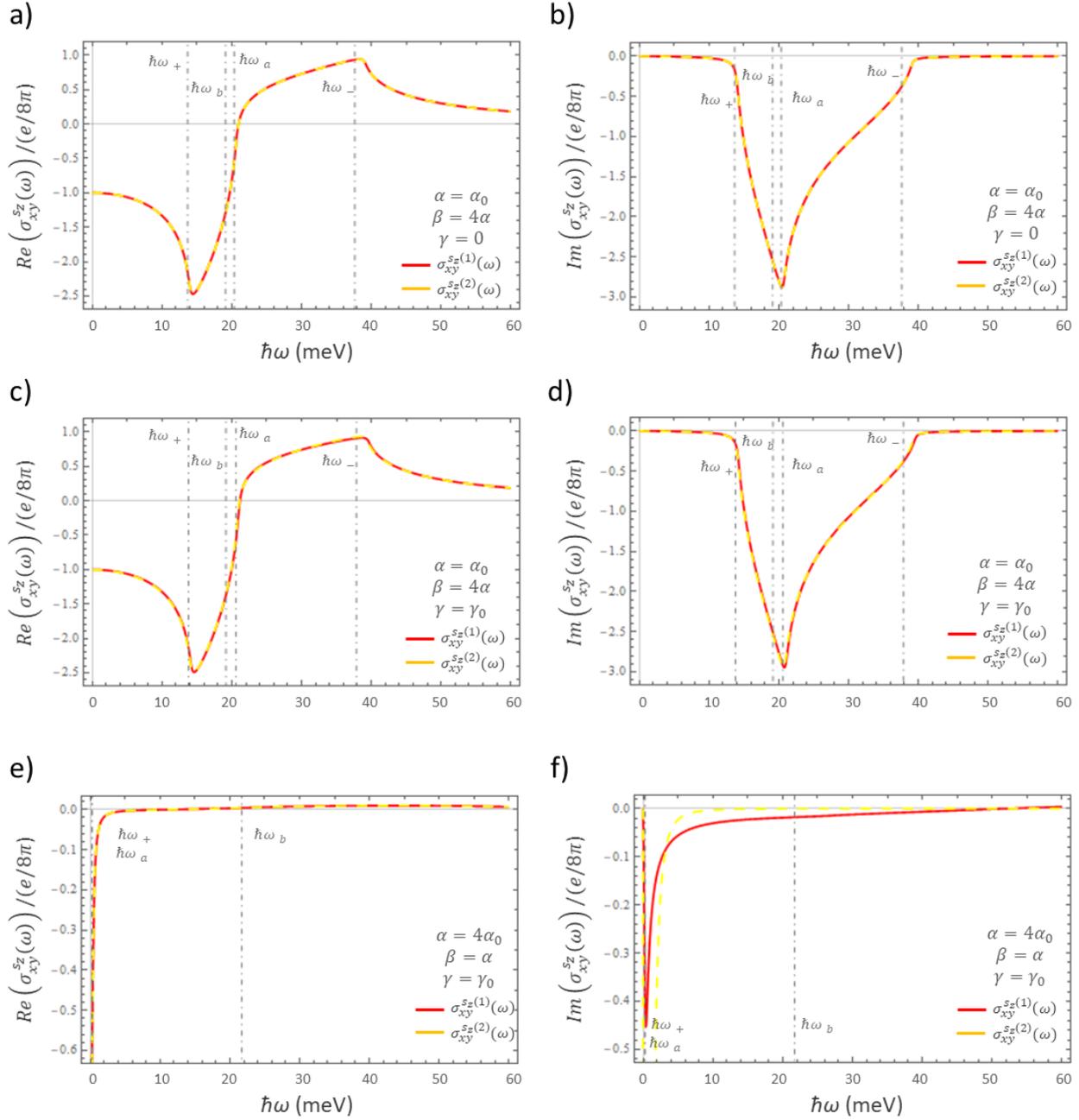
**Figura 4.5:** Gráficas para las aproximaciones de la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus para  $\gamma = 0$  (a y b),  $\gamma = \gamma_0$  (c y d) y el caso  $\beta = \alpha$  con  $\gamma = \gamma_0$  (e y f). En todos los espectros, la aproximación mostrada en la ec. (4.83) se muestra en rojo y la mostrada en la ec. (4.85) (las más precisa) en amarillo. En todos los casos las energías importantes ( $\hbar\omega_+$ ,  $\hbar\omega_-$ ,  $\hbar\omega_a$  y  $\hbar\omega_b$ ) se muestran en líneas punteadas grises.

En el caso  $\beta = \alpha$  con  $\gamma = \gamma_0$  (Figuras 4.5e y 4.5f), se observa que la forma del espectro cambia radicalmente respecto a los mostrados en las Figuras 4.5a-4.5d. Lo anterior se debe a que una parte de la conductividad desaparece cuando  $\beta = \alpha$  ya que el término  $\mathcal{G}(\theta)$  es reducido. Las energías importantes son  $\hbar\omega_+ = 0.27$  meV,  $\hbar\omega_a = 0.27$  meV,  $\hbar\omega_b = 10.02$  meV y  $\hbar\omega_- = 13.09$  meV. Es importante observar que  $\hbar\omega_+ \sim \hbar\omega_a$  por lo que en las Figuras 4.5e y 4.5f dichas energías se presentan en la misma línea. Las energías obtenidas para este caso, muestran que el rango de energías para el cual existen transiciones ópticas interbanda es mayor que para el caso  $\beta = 0.25\alpha$ . En el espectro de la parte real de la conductividad las aproximaciones toman valores similares, mostrando una diferencia para energías mayores a 10 meV. Para el espectro de la parte imaginaria de la conductividad la aproximación más precisa (ec. (4.85)) difiere significativamente de la mostrada en la ec. 4.83.

### Caso $\beta = 4\alpha$

Se graficó la parte real e imaginaria de la conductividad Hall de espín. Con la finalidad de visualizar el comportamiento de las aproximaciones se graficaron las expresiones mostradas en las ecuaciones 4.83 y 4.85 para  $\beta = 4\alpha$  (lo que implica cambiar el ancho efectivo del pozo cuántico (ver Apéndice C)). Los espectros obtenidos para  $\gamma = 0$ ,  $\gamma = \gamma_0$  y  $\beta = \alpha = 4\alpha_0$  para  $\gamma = \gamma_0$  se muestran en la Figura 4.6. En la Figura 4.6 se observa que el rango de energías de interés es mucho mayor que cuando  $\beta = 0.25\alpha$ . Al comparar los espectros con sus análogos en el sistema con  $\beta = 0.25\alpha$  se observa que la forma del espectro cambió sustancialmente: el espectro es más asimétrico y sus mínimos y máximos son más amplios. En general, las aproximaciones toman los mismos valores; sin embargo, en las Figuras 4.6e y 4.6f se observa que las aproximaciones varían entre sí. Es importante recordar que la mostrada en la ec. (4.85) es la más precisa.

En las Figuras 4.6a y 4.6b se muestra respectivamente la parte real e imaginaria del espectro para  $\gamma = 0$ , mientras que en las Figuras 4.6c y 4.6d se muestra la parte real e imaginaria (respectivamente) del espectro para  $\gamma = \gamma_0$ . Al comparar la parte real de ambos espectros con el mostrado en la Figura 4.5a (donde  $\beta = 0.25\alpha$ ) se observa que en estos casos el mínimo para la conductividad se muestra a menor energía que el máximo. En el caso mostrado en la Figura 4.6a, el mínimo para la parte real de la conductividad se encontraba para una mayor energía que el máximo de la conductividad. Las diferencias en los espectros se deben a que  $\alpha < \beta$ . Al analizar la parte imaginaria (Figuras 4.6b y 4.6d) se observa que el valor de la conductividad es negativo para todos los valores de la energía analizados, mientras que en el caso  $\beta = 0.25\alpha$  (Figuras 4.5b y 4.5d) el valor de la conductividad era positivo en el rango de energías estudiado. Para estos casos, cuando  $\omega \rightarrow 0$  el valor de la conductividad tiende a -1, mientras que para frecuencias altas, el valor de la conductividad tiende a cero.



**Figura 4.6:** Gráficas para las aproximaciones de la parte real (páneos izquierdos) e imaginaria (páneos derechos) de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus cúbico para  $\gamma = 0$  (a y b),  $\gamma = \gamma_0$  (c y d) y el caso  $\alpha = 4\alpha_0$  con  $\gamma = \gamma_0$  (e y f). En todos los espectros la aproximación mostrada en la ec. (4.83) se muestra en rojo y la mostrada en la ec. (4.85) (las más precisa) en amarillo. En todos los casos las energías importantes ( $\hbar\omega_+$ ,  $\hbar\omega_-$ ,  $\hbar\omega_a$  y  $\hbar\omega_b$ ) se muestran en líneas punteadas grises.

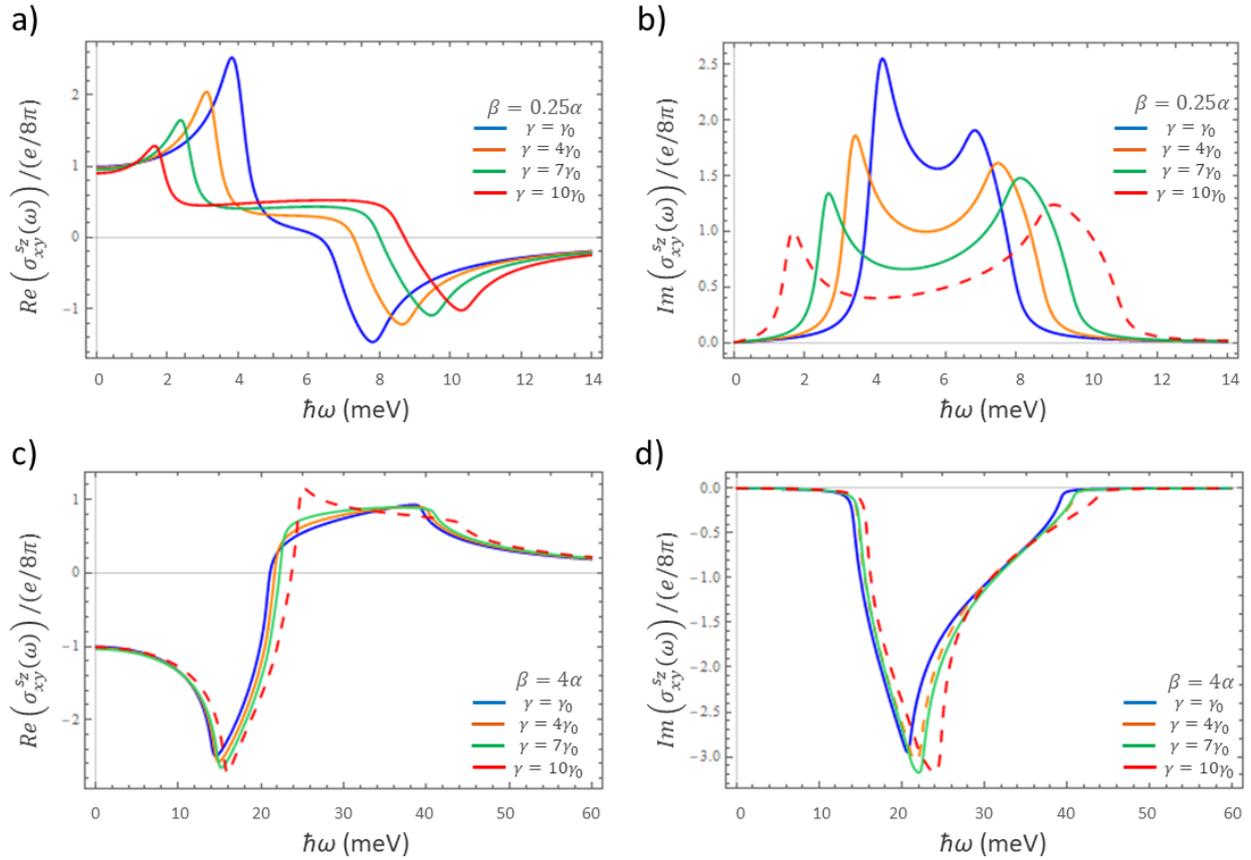
Por otra parte, al analizar el valor de la energía asociado a las frecuencias importantes se encuentra que para  $\gamma = 0$ ,  $\hbar\omega_+ = 13.69$  meV,  $\hbar\omega_a = 20.34$  meV,  $\hbar\omega_b = 19.12$  meV y  $\hbar\omega_- = 37.60$  meV. Por su parte, para  $\gamma = \gamma_0$ , las energías asociadas a frecuencias de interés son  $\hbar\omega_+ = 13.80$  meV,  $\hbar\omega_a = 20.60$  meV,  $\hbar\omega_b = 19.17$  meV y  $\hbar\omega_- = 37.84$  meV. Al comparar los espectros y las energías obtenidas para cada caso, se encuentra que los espectros son muy similares y que los

límites en la energía para los cuales puede haber transiciones ópticas interbanda también es muy similar, por lo que la contribución de  $\gamma$  no es tan notoria como en el caso  $\beta = 0.25\alpha$ . Lo anterior se debe a que el rango de energías para este caso es 4 veces más amplio que en el caso anterior, por lo que un cambio de la misma magnitud es menos notorio.

Al analizar el caso  $\beta = \alpha = 4\alpha_0$ , se observa que tanto en la parte real como en la imaginaria, para la mayor del rango de energía estudiado el valor de la conductividad es muy cercano a cero. Al analizar la energía asociada a frecuencias de interés se encontró que  $\hbar\omega_+ = 0.27$  meV,  $\hbar\omega_a = 0.27$  meV,  $\hbar\omega_b = 21.71$  meV y  $\hbar\omega_- = 69.24$  meV. Debido que  $\hbar\omega_+ \sim \hbar\omega_a$  ambas frecuencias se muestran en la misma línea. Por su parte  $\hbar\omega_-$  no se visualiza en los espectros mostrados ya que su valor es mayor que el rango de energías analizado. El análisis hecho en esta sección fue realizado también para  $\beta = 6\alpha$  se encontró que el rango de energía es del espectro es mayor y que el comportamiento de las curvas de conductividad son muy similares a las mostradas para el caso  $\beta = 4\alpha$ .

### Caso $\gamma$ grande

Con la finalidad de estudiar cuál es el efecto de la contribución cúbica de Dresselhaus a la conductividad Hall de espín se decidió graficar espectros para  $\gamma = \gamma_0$ ,  $\gamma = 4\gamma_0$ ,  $\gamma = 7\gamma_0$  y  $\gamma = 10\gamma_0$ . Todos los casos fueron calculados para  $\beta = 0.25\alpha$  y  $\beta = 4\alpha$ . En general se utilizó la aproximación mostrada en la ec. (4.85) excepto en los casos donde la conductividad se muestra con línea discontinua. Los casos que fueron graficados utilizando la ec. (4.83), se hicieron con esta aproximación ya que al utilizar la ec. (4.85) el comportamiento del espectro no era contundente o bien porque el tiempo de cálculo era muy alto. Los espectros obtenidos se muestran en la Figura 4.7.



**Figura 4.7:** Gráficas de la parte a) real y b) imaginaria de la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus cúbico. Se muestran los espectros para  $\gamma = \gamma_0$  (azul),  $\gamma = 4\gamma_0$  (naranja),  $\gamma = 7\gamma_0$  (verde) y  $\gamma = 10\gamma_0$  (rojo). Las curvas se obtuvieron para  $\beta = 0.25\alpha$  (a y b),  $\beta = 4\alpha$  (c y d). Los espectros obtenidos utilizando la aproximación mostrada en la ec. (4.85) se muestran en línea sólida, mientras que el espectro obtenido usando la aproximación de la ec. (4.83) se muestra en línea discontinua

Al analizar los espectros para  $\beta = 0.25\alpha$  tanto para la parte real (Figura 4.7a) como para la parte imaginaria (Figura 4.7b) de la conductividad, se observó que si el valor de  $\gamma$  aumenta el espectro se ensancha y el rango de energías para las que puede haber transiciones es mayor. Además, para la parte real de la conductividad se observa que la diferencia entre la energía mínima y máxima para las transiciones es mayor y el valor absoluto del mínimo y máximo de la conductividad disminuye. En los espectros de la parte real de la conductividad se observa que cuando  $\omega \rightarrow 0$  el valor de la conductividad Hall de espín para este sistema tiende al de la conductividad universal. Para frecuencias altas el valor de la conductividad tiende a 0.

Las energías obtenidas para los espectros mostrados en la Figura 4.7a y 4.7b se muestran en la Tabla 4.1. Se observa que para valores mayores de  $\gamma$  el valor de las energías  $\hbar\omega_+$  y  $\hbar\omega_a$  disminuye, mientras que para  $\hbar\omega_b$  y  $\hbar\omega_-$  aumenta. Lo anterior confirma la observación hecha anteriormente, donde se afirma que es mayor el rango de energías en el cual las transiciones

ópticas interbanda son permitidas para valores de  $\gamma$  mayores.

**Tabla 4.1:** Energías  $\hbar\omega_+$ ,  $\hbar\omega_a$ ,  $\hbar\omega_b$  y  $\hbar\omega_-$  para  $\beta = 0.25\alpha$  y diferentes valores de  $\gamma$ .

Cociente $\gamma/\gamma_0$	$\hbar\omega_+$ [meV]	$\hbar\omega_a$ [meV]	$\hbar\omega_b$ [meV]	$\hbar\omega_-$ [meV]
1	3.82	4.19	6.70	7.94
4	3.15	3.40	7.27	8.75
7	2.46	2.61	7.83	9.57
10	1.76	1.83	8.38	10.40

Para el caso  $\beta = 4\alpha$  (Figura 4.7a), se observa que el comportamiento de la parte real de la conductividad Hall de espín para diferentes valores de  $\gamma$  es muy similar. En general, cuando  $\gamma$  aumenta, el espectro se muestra desplazado a la derecha. El espectro está compuesto de un mínimo y dos máximos, a los que llamaremos primer máximo (al de menor energía) y segundo máximo (al de mayor energía). Cuando el valor de  $\gamma$  aumenta, el valor el mínimo de la conductividad toma valores menores, el primer máximo toma valores mayores y el segundo máximo disminuye. La Figura 4.7b muestra la parte imaginaria de la conductividad Hall de espín. Se observa que cuando  $\gamma$  aumenta existe un corrimiento a la derecha de los espectros. Además, al aumentar  $\gamma$  el valor de la conductividad disminuye.

En la Figura 4.7d se puede observar que a pesar de ser similar, el espectro obtenido usando la aproximación  $\sigma_{xy}^{s_z(1)}$  no tiene la misma forma que los obtenido mediante la aproximación  $\sigma_{xy}^{s_z(2)}$ . Lo anterior muestra que sí existe una diferencia entre las aproximaciones. A pesar de esto, el espectro obtenido con la aproximación  $\sigma_{xy}^{s_z(1)}$  permite darse una idea del comportamiento del espectro.

Anteriormente se mencionó que las energías asociadas a frecuencias importantes dan información del rango en el que las transiciones ópticas interbanda son posibles. Para observar la contribución del término cúbico de Dresselhaus con  $\beta = 4\alpha$  se calcularon las energías relevantes para los sistemas mostrados en las Figuras 4.7c y 4.7d. Los valores obtenidos se muestran en la Tabla 4.2.

**Tabla 4.2:** Energías  $\hbar\omega_+$ ,  $\hbar\omega_a$ ,  $\hbar\omega_b$  y  $\hbar\omega_-$  para  $\beta = 4\alpha$  y diferentes valores de  $\gamma$

Cociente $\gamma/\gamma_0$	$\hbar\omega_+$ [meV]	$\hbar\omega_a$ [meV]	$\hbar\omega_b$ [meV]	$\hbar\omega_-$ [meV]	$\hbar\omega_- - \hbar\omega_+$ [meV]
1	13.80	20.60	19.17	37.84	24.04
4	14.13	21.37	19.31	38.55	24.42
7	14.45	22.15	19.45	39.26	24.81
10	14.77	22.94	19.59	39.98	25.21

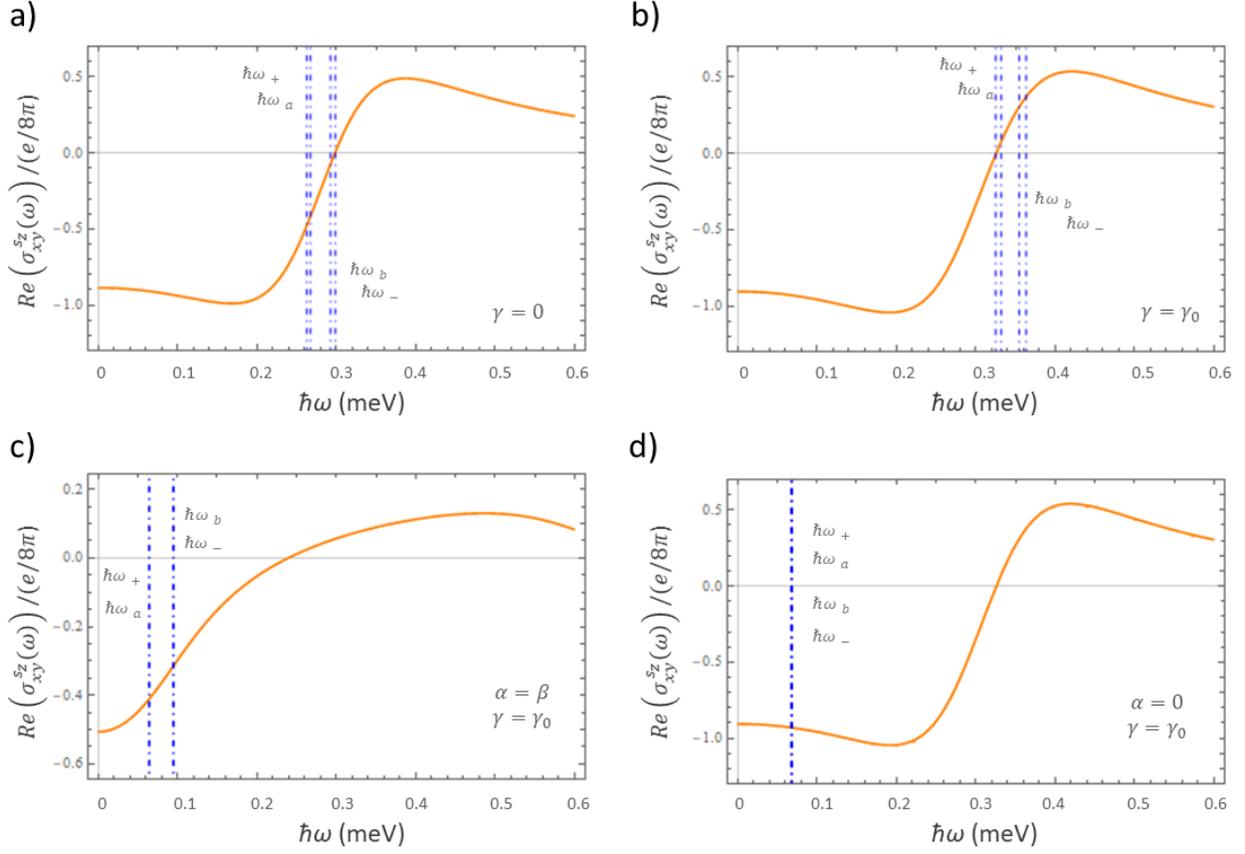
Al analizar las energías obtenidas en la Tabla 4.2 se observa que para este sistema el valor de  $\hbar\omega_b < \hbar\omega_a$ . Es importante recordar que el término  $\lambda 2\alpha\beta \text{sen} 2\theta$  (presente en  $k_{F_0}$  y  $k_{F_{\pm}}$ ) toma valores  $\lambda = \pm 1$  dependiendo de si  $\theta = \frac{\pi}{4}$  o  $\theta = \frac{3\pi}{4}$ . Debido a que  $\beta = 4\alpha$  la contribución del término  $\lambda 2\alpha\beta \text{sen} 2\theta$  a  $\Delta_{F_0}$  es mayor que cuando  $\beta = 0.25\alpha$ , por lo que resulta natural que  $\omega_a > \omega_b$ . Se observa también que conforme  $\gamma$  aumenta, la energía mínima y máxima necesaria para que existan transiciones ópticas aumenta, lo cual es consistente con que en las Figuras 4.7c y 4.7d los espectros tienen un corrimiento a la derecha.

Se calculó la diferencia  $\hbar\omega_- - \hbar\omega_+$  para analizar cómo cambia el rango de energías cuando  $\gamma$  aumenta. Se observa que para valores de  $\gamma$  mayores el rango de energías en el que las transiciones ópticas son permitidas es mayor. Por otra parte, se observa que cuando  $\beta = 4\alpha$  el rango de energías en el que las transiciones ópticas son permitidas es mucho más amplio que en el caso en el que  $\beta = 0.25\alpha$ . Finalmente, el rango de energías para el cual las transiciones ópticas están permitidas para  $\beta = 4\alpha$  es muy similar, mientras que en el caso  $\beta = 0.25\alpha$  el rango energético para transiciones permitidas tiene cambios mayores cuando  $\gamma$  aumenta.

#### 4.4.2. Discusión de resultados para AlAs

Para conocer la contribución del término cúbico de Dresselhaus, se decidió observar el espectro óptico de la conductividad para un sistema donde  $\Delta_{\gamma} = 2\gamma k_F^3$  fuera del orden de  $\Delta_R = 2\alpha k_F$ . El sistema utilizado fue arseniuro de aluminio (AlAs) y los parámetros usados fueron los reportados por Fabian, J; et al (ver la Tabla mostrada en el capítulo 2) [46]. El valor de  $\hbar\eta$  se fijó en 0.1 meV,  $n_e = 5 \times 10^{15} m^{-2}$ , por lo que la  $k_F$  es la misma que se usó para InAs. En todos los casos,  $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$  eVm, mientras que  $\alpha = 4.30 \times 10^{-14}$  eVm (a menos que se indique lo contrario).

Para el caso donde  $\gamma = 0$  se encontró que el espectro de la conductividad Hall de espín tiene (Figura 4.8a) una forma similar al encontrado para la interacción Rashba (que es equivalente a Dresselhaus lineal), lo cual concuerda con lo esperado, ya que no hay contribución cúbica y la contribución del parámetro de Rashba es mucho menor que la contribución del parámetro de Dresselhaus lineal. A diferencia del espectro obtenido para InAs, el espectro obtenido para AlAs se encuentra entre 0 y 0.6 meV, además, las energías asociadas a frecuencias importantes son mucho menores que las encontradas para el caso anterior. Se observa que para el límite estático el valor de la parte real de la conductividad Hall de espín es similar al negativo de la conductividad universal (debido a que  $\alpha < \beta$ ), mientras que para frecuencias altas el valor de la conductividad se aproxima a cero.



**Figura 4.8:** Espectro de la parte real de la conductividad Hall de espín para el semiconductor AlAs para a)  $\alpha_0 = 4.30 \times 10^{-14}$  eVm,  $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$  eVm y  $\gamma = 0$ , b)  $\alpha_0 = 4.30 \times 10^{-14}$  eVm,  $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$  eVm y  $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$  eVm<sup>3</sup>, c)  $\alpha = \beta$ ,  $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$  eVm y  $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$  eVm<sup>3</sup> y d)  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 7.910 \times 10^{-13}$  eVm y  $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$  eVm<sup>3</sup>.

Para el caso donde  $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$  eVm<sup>3</sup> se observa que el espectro de la conductividad Hall de espín es similar al mostrado para  $\gamma = 0$ ; sin embargo, el espectro es un poco más amplio. En la Figura 4.8b se observa que el valor de la conductividad es similar para diferentes energías. En líneas discontinuas azules se muestra la energía mínima y máxima requerida para transiciones interbanda permitidas. Las energías importantes tienen valores muy similares entre sí y toman valores mayores que para el caso  $\gamma = 0$ . En el caso estático, el valor de la parte real de la conductividad Hall de espín se aproxima al negativo de la conductividad universal, mientras que para frecuencias altas el valor de la conductividad se aproxima a cero.

Para el caso donde  $\alpha = \beta$  y  $\gamma = 1.155 \times 10^{-29}$  eVm<sup>3</sup> (Figura 4.8c) el espectro cambia drásticamente respecto a los casos anteriores, debido a que el término correspondiente al acoplamiento espín-órbita de Rashba, ahora, es del orden del término correspondiente al acoplamiento espín-órbita Dresselhaus lineal. En este caso, sólo se observan dos energías importantes (líneas punteadas azules) ya que  $\hbar\omega_+ \sim \hbar\omega_a$  y  $\hbar\omega_- \sim \hbar\omega_b$ .

Para el caso donde  $\alpha = 0$ ,  $\beta = 0.25\alpha_0$ , y  $\gamma = 1,155 \times 10^{-29} \text{eVm}^3$ , se encontró que el rango de energías para el cual las transiciones ópticas interbanda son permitidas es de  $0.31 \mu\text{eV}$ . Debido a lo anterior, el espectro mostrado en e Figura 4.8d únicamente muestra una línea discontinua azul, ya que  $\hbar\omega_+ = \hbar\omega_b$  y  $\hbar\omega_- = \hbar\omega_a$  además de que  $\hbar\omega_+ \sim \hbar\omega_-$ .

# Capítulo 5

## Conclusiones

En este trabajo de tesis se realizó un estudio teórico de la conductividad Hall de espín para gases bidimensionales de electrones con interacción espín-órbita con el propósito de estudiar los efectos de de la interacción espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus (incluyendo su contribución lineal y cúbica en momento). En este estudio se utilizó el formalismo de Kubo en respuesta lineal para calcular los componentes de la ecuación de Kubo para la conductividad usando el operador de corriente de espín convencional.

Para la interacción Rashba, logramos reproducir la expresión analítica para la conductividad Hall de espín. Además en el límite estático  $\omega \rightarrow 0$  se obtuvo que la conductividad Hall de espín es  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi}$  (este resultado es el mismo que se obtiene en ausencia de interacción Rashba y Dresselhaus finito) . Ambas expresiones coinciden con lo reportado en la literatura. Se obtuvo la parte real e imaginaria de espectro óptico dependiente de la energía, el cual mostró que existe un mínimo y un máximo para la conductividad Hall de espín. Para frecuencias altas el valor de la conductividad se aproxima a cero y para frecuencias baja al valor de la conductividad universal.

Para la interacción conjunta Rashba y Dresselhaus lineal, e verifica que en el límite estático  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} \frac{(\alpha^2 - \beta^2)}{|\alpha^2 - \beta^2|}$  como lo indica la literatura. Se observa que, al igual que en el caso Rashba finito el valor de la conductividad se aproxima a cero para altas frecuencias. Para bajas frecuencias la conductividad se aproxima al valor de la conductividad universal. Se encontró que la energía necesaria para las transiciones puede ser modulada cambiando la relación entre el parámetro de Rashba  $\alpha$  y el parámetro de Dresselhaus lineal  $\beta$  y que al cambiar esta relación también cambia la magnitud de la conductividad.

Para el caso de la interacción conjunta del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dres-

selhaus cúbico no es posible llegar a una expresión analítica exacta para la conductividad Hall de espín, por lo que el espectro de la conductividad se obtiene con integrales numéricas. Se logró obtener una expresión analítica para la conductividad (en el límite  $\beta\gamma \rightarrow 0$  y  $\gamma^2 \rightarrow 0$ )  $\sigma_{xy}^{sz}(0) = \frac{e}{8\pi} [1 - \mathcal{X}_\gamma(1 - s_{RD})]$ , con  $\mathcal{X}_\gamma = \frac{2\alpha\beta}{2\alpha\beta + \alpha\gamma k_F^2}$ , y  $s_{RD} = \frac{(\alpha^2 - \beta^2)}{|\alpha^2 - \beta^2|} = \pm 1$  (para  $\alpha > \beta = 1$  y para  $\alpha < \beta = -1$ ). Al igual que el caso conjunto Rashba y Dresselhaus lineal, el caso  $\alpha > \beta$  (con  $\gamma$  finita) la conductividad Hall tiende a la conductividad universal para frecuencias bajas mientras que para  $\alpha < \beta$  (y  $\gamma$  finita) la conductividad Hall se aproxima al negativo de la conductividad universal. El espectro de la conductividad Hall de espín mostró que el término cúbico de Dresselhaus ensancha los espectros.

Finalmente, se puede decir que el formalismo de Kubo fue en este trabajo una herramienta altamente valiosa, ya que permite obtener expresiones analíticas para la conductividad Hall de espín en el límite cuasiestático para el caso Rashba y Dresselhaus lineal. Usando este formalismo fue posible obtener expresiones que al ser integradas permitieron conocer el comportamiento de la conductividad Hall de espín para sistemas con acoplamiento espín-órbita Rashba y Dresselhaus (incluyendo su término cúbico).

# Capítulo 6

## Bibliografía

1. Shinjo, T. (eds). (2009). *Nanomagnetism and Spintronics*. Oxford: Elsevier, p. 2.
2. Beiser, A. (2003). *Concepts of Modern Physics*. 6<sup>a</sup> ed. Mc-GrawHill.
3. Cresser, J. (2009). Particle Spin and the Stern-Gerlach Experiment de *MACQUARIE University* en <http://physics.mq.edu.au/jcresser/Phys301/Chapters/Chapter6.pdf>
4. Steiner, M. (2004). *Micromagnetism and Electrical Resistance of Ferromagnetic Electrodes for Spin-Injection Devices*. Hamburgo: Cuvillier Verlag, p. 3.
5. Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., Zinn, W. (Marzo 1, 1989). Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, vol. 39.
6. Baibich, M., Broto, M., Fert, N., Nguyen Van Dau, F., Petroff, F., Eitenne, P., Creuzet, G., Friederich, A. y Chazelas, J. (Noviembre 21, 1988). Giant Magnetoresistance of (011) Fe/(001) Cr Magnetic Superlattices. *Physical Review Letters*, vol. 61.
7. McCray, P. (Enero, 2009). How spintronics went from the lab to the iPod. *Nature Nanotechnology*, Vol. 4
8. Shun-Qing, S. (Octubre, 2008). Spintronics and Spin Current. *AAPPS Bulletin*, vol. 18, no. 5.
9. Lombardi, G., Bianchi, G. (2009). *Spintronics: Materials, Applications and Devices*. Nueva York, E.U.A.: Nova Science Publishers, p. 242.
10. Datta, S., Das, B. (Febrero 12, 1990). Electronic analog of the electro-optic modulator. *Applied Physics Letters*, vol 56.
11. Samarth, N. (2004). *An introduction to Semiconductor Spintronics*. Pensilvania, E.U.A.: Elsevier, pp. 60-62.
12. Wang, G., Wang, Z., Zhao, W., Klein, J. (s.f.). *An overview of Spin Field Effect Transistor (Spin-FET) and Logic Device Using Spin-FET*, de Institut d'électronique fondamentale. En: <http://www.cnfm.fr/VersionFrancaise/animations/JNRDM/JNRDM2016/Papiers/Le13mai2016/13.Matin%20posters/9.2.8-JNRDM16%20Gefei-WANG.pdf>
13. Wolf, S., Chtchelkanova, A., Treger, D. Spintronics- Spin-Based Electronics en *Hanbook of Nanoscience, Engineering, and Technology*. CRC Press.

14. Hall, N. (2011). *The age of the qubit: A new era of quantum information in science and technology*. Inglaterra: Institute of Physics.
15. Hedin, E., Joe, S. (2014). *Spintronics in Nanoscale Devices*. Estados Unidos: CRC: Press
16. Awschalom, D., Flatté, M. (Marzo, 2007). Challenges for semiconductor spintronics. *Nature Physics*, Vol.3.
17. Banerjee, S., Tyagi, A. (2012). *Funcional Materials: preparation, processing and applications*. Londres, Inglaterra: Elsevier, pp. 195-196.
18. Wong, A. (2009). *Efecto Hall de espín de gases bidimensionales de electrones y huecos pesados* (Tesis de doctorado). Universidad Nacional Autónoma de México, Baja California, México.
19. Sato, K., Saitoh, E. (2015). *Spintronics for Next Generation Innovative Device*. Reino Unido: Wiley.
20. Tainaka, M. (s.f.). Elucidation of spin current caused by properties of the electron as a magnet. Japón: Keio University. Sitio web: <https://www.st.keio.ac.jp/en/kyurizukai/21ando.html>
21. Sears, F., Zemansky, M., Young, H., Freedman, R. (2009). *Física Universitaria*, 12<sup>a</sup> Edición. Vol. 2. México: Pearson Education, p. 943
22. Maekawa, S., Valenzuela, S., Saitoh, E., Kimura, T. (eds). (2012). *Spin Current*. Reino Unido: Oxford University Press, p.p. 185-188, 203.
23. Sinova, J.; et al. (Octubre 27, 2015). *Spin Hall effect*. REVIEWS OF MODERN PHYSICS, 87, pp.1214-1225.
24. Yoshida, D. (2002). *The Quantum Hall effect*. Berlín: Springer, p. 1.
25. Dyakonov, M. (s.f.). *Spin Hall effect*. Université Montpellier. Sitio web: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1210/1210.3200.pdf>
26. Kato, Y.; et al.(2004). *Observation of the Spin Hall Effect in Semiconductors*. Science 306, 1910. DOI: 10.1126/science.1105514
27. Wunderlich, J., Kaestner, B., Sinova, J., Jungwirth. T. (2005). *Experimental Observation of Spin-Hall Effect in a Two Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*. Physical Review Letters 94, 047204.
28. Li, Z., Marsiglio, F., Carbotte, J.P. (2013). Scientific Reports 3, 2828.
29. Strange, P. (1998). *Relativistic Quantum Mechanics with applications in Condensed Matter and Atomic Physics* . Reino Unido: Cambridge University Press.
30. Winkler, R. (2003). *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Erlangen, Alemania: Springer. pp. 1, 2, 5, 69-71, 77-79.
31. Shen, S. (2008, octubre). Spintronics and Spin Current. *AAPPS Bulletin*, Vol. 18, p. 31.
32. Bercioux, D. y Licignano, P. (2015). Quantum transport in Rashba spin-orbit materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, Vol. 78, pp. 1-3, 6-7.

33. Toloza, M., Ferreira, A., De Andrada, E. y La Rocca, G. (2012). Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction strength in GaAs/GaAlAs heterojunctions. *Physics Procedia*, Vol. 28, p. 1.
34. Li, Z., Marsiglio, F. y Carbotte, J. (2013, octubre 3). Vanishing of interband light absorption in a persistent spin helix state. *Scientific Reports*, Vol. 3, p. 1-2.
35. Mahan, D., (2000), *Many-Particle Physics*, Nueva York, Estados Unidos: Kluwer Academic y Plenum Publishers, p.p 160.
36. Singh, N., (1977), *Electronic transport theories from weakly to strongly correlated materials*, Nueva York, Estados Unidos: Taylor and Francis Group, p.p. 82-85.
37. Allen, P., (2006), Electronic Transport, en *Conceptual Foundations of Material Properties: A standard model for calculation of ground- and excited-state properties*, Amsterdam, Países Bajos: Elsevier, p.p. 166-167.
38. Maytorena, J. A., C. Lopez-Bastidas, and F. Mireles, 2006, Phys.Rev. B 74, 235313.
39. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C 17, 6039. 1984.
40. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. 78, 1335. 1997.
41. 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
42. T. W. Chen, C. M. Huang, and G. Y. Guo, Phys. Rev. B 73, 235309. 2006.
43. A. Wong, J. A. Maytorena, C. López-Bastidas, and F. Mireles, Phys. Rev. B 77, 035304. 2008.
44. S. Q. Shen, Phys. Rev. B 70, 081311R. 2004.
45. Dressel, M., Grüner, G. (2002). *Electrodynamics of Solids. Optical Properties of Electrons in Matter*. Inglaterra: Cambridge University Press.
- 46 J. Fabian, A. Matos-Abiague, C. Ertler, P. Stano and I. Zutic, Acta Phys. Slovaca, 2007, 57, 565.

# Apéndice A

## Límites de integración

En el cálculo de la conductividad Hall de espín para diferentes sistemas bidimensionales, se mencionó que era necesario hacer  $\sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \nu \rightarrow -\int_0^{2\pi} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \frac{Ak}{(2\pi)^2} dk d\theta$ , con la finalidad de poder obtener expresiones para la conductividad. En esta sección se pretende explicar cómo se obtienen los límites de integración para la integral en  $k$ .

En general, la expresión para la conductividad se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \sigma_{xy}^{sz}(\omega) &\propto \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{F}(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \nu f(\mathbf{k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) (f(\mathcal{E}_+(\mathbf{k})) - f(\mathcal{E}_-(\mathbf{k}))) \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

Debido a que los niveles de energía que están ocupados son los que están por debajo del nivel de Fermi, y recordando que la función de distribución de Fermi-Dirac es:

$$f(\mathcal{E}_\nu) = \frac{1}{\exp \frac{\mathcal{E}_\nu - E_F}{k_B T} + 1}, \quad (\text{A.2})$$

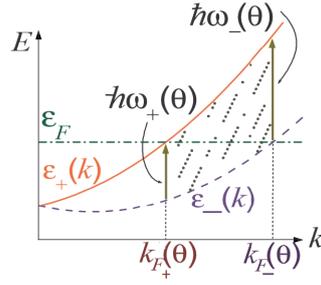
que para  $T = 0$ , se obtiene que para  $\mathcal{E}_\nu < E_F$ :

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\mathcal{E}_\nu) = 1, \quad (\text{A.3})$$

y para  $\mathcal{E}_\nu > E_F$ :

$$\lim_{T \rightarrow 0} f(\mathcal{E}_\nu) = 0, \quad (\text{A.4})$$

por lo que  $\mathcal{E}_+ = 1$  para  $0 < \mathcal{E}_+ < k_{F+}$ ; y,  $\mathcal{E}_- = 1$  para  $0 < \mathcal{E}_- < k_{F-}$ . En la Figura A.1 se muestra el esquema de la dispersión de energía del caso Rashba, donde se puede observar la energía de Fermi y para qué valores de  $\mathbf{k}$  los niveles están ocupados.



**Figura A.1:** Esquema de la dispersión de energía del caso Rashba. [18]

La expresión para la conductividad A.1, se transforma en:

$$\begin{aligned}
 \sigma_{xy}^{sz}(\omega) &\propto \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{F+}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) dk_x dk_y - \frac{A}{(2\pi)^2} \int_0^{k_{F-}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) dk_x dk_y \\
 &= -\frac{A}{(2\pi)^2} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \mathcal{F}(\mathbf{k}) dk_x dk_y = -\frac{A}{(2\pi)^2} \int_{k_{F+}}^{k_{F-}} \int_0^{2\pi} \mathcal{F}(\mathbf{k}, \theta) k d\theta dk
 \end{aligned} \tag{A.5}$$

# Apéndice B

## Conductividad Hall de espín: Rashba y Dresselhaus cúbico

Siguiendo el procedimiento mostrado para el sistema con interacción espín-órbita Rashba, para obtener la conductividad Hall de espín para sistemas con interacción conjunta de efecto Rashba, Dresselhaus lineal y Dresselhaus cúbico, es necesario obtener las velocidades electrónicas, ya que son ingredientes esenciales del conmutador que se muestra en la ec. (4.2). Las velocidades son:

$$\hat{v}_y(0) = \frac{\hat{p}_y}{m} - \frac{1}{\hbar}(\alpha\hat{\sigma}_x + \beta\hat{\sigma}_y) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(2\hat{p}_x\hat{p}_y\hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2\hat{\sigma}_y) \quad (\text{B.1})$$

$$\hat{v}_x(0) = \frac{\hat{p}_x}{m} + \frac{1}{\hbar}(\alpha\hat{\sigma}_y + \beta\hat{\sigma}_x) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(\hat{p}_y^2\hat{\sigma}_x - 2\hat{p}_y\hat{p}_x\hat{\sigma}_y) \quad (\text{B.2})$$

Otro ingrediente importante para obtener el conmutador de la expresión de la conductividad Hall de espín es el operador de corriente, el cual se puede expresar como:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{j}}_x^s(0) &= \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z, \hat{v}_x \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\hbar}{2}\hat{\sigma}_z, \left( \frac{\hat{p}_x}{m} + \frac{1}{\hbar}(\alpha\hat{\sigma}_y + \beta\hat{\sigma}_x) + \frac{\gamma}{\hbar^3}(\hat{p}_y^2\hat{\sigma}_x - 2\hat{p}_y\hat{p}_x\hat{\sigma}_y) \right) \right\} \\ &= \frac{\hbar}{2m}\hat{\sigma}_z\hat{p}_x, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

ya que  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{i,j}\mathbb{I}$ . En el esquema de interacción, el operador de corriente se escribe como:

$$\hat{\mathbf{j}}_x^s(t) = \frac{\hbar}{2m}e^{i\hat{H}t/\hbar}\hat{\sigma}_z\hat{p}_xe^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad (\text{B.4})$$

por lo que el valor del conmutador es:

$$\begin{aligned}
 [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] &= \left[ \frac{\hbar}{2m} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \frac{\hat{p}_y}{m} - \frac{1}{\hbar} (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y) + \frac{\gamma}{\hbar^3} (2\hat{p}_x \hat{p}_y \hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) \right] \\
 &= \frac{-1}{2m} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y) \\
 &\quad + \frac{1}{2m} (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} \\
 &\quad + \frac{\gamma m}{2\hbar^2} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} (2\hat{p}_x \hat{p}_y \hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) \\
 &\quad - \frac{\gamma m}{2\hbar^2} (2\hat{p}_x \hat{p}_y \hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar}
 \end{aligned} \tag{B.5}$$

Al obtener el valor de expectación de cada componente del conmutador se obtiene que:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{-1}{2m} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y) | \mathbf{k}, \nu \rangle \\
 = \frac{-1}{2m} \frac{\hbar k_x^2 \nu i}{k \Delta(k, \theta)} (\alpha^2 - \beta^2 - \alpha \gamma k_x k_y - \beta \gamma k_y^2) \exp\left(\frac{2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right),
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{1}{2m} (\alpha \hat{\sigma}_x + \beta \hat{\sigma}_y) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu \rangle \\
 = \frac{-1}{2m} \frac{\hbar k_x^2 \nu i}{k \Delta(k, \theta)} (\alpha^2 - \beta^2 - \alpha \gamma k_x k_y - \beta \gamma k_y^2) \exp\left(\frac{-2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right),
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}, \nu | \frac{\gamma}{2\hbar^2 m} e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} (2\hat{p}_x \hat{p}_y \hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) | \mathbf{k}, \nu \rangle \\
 = \frac{\gamma \hbar}{2m} \frac{k_x^2 \nu i}{k \Delta(k, \theta)} (\alpha k_x k_y + \beta(-2k_y^2 + k_x^2) - \gamma k_x^2 k_y^2) \exp\left(\frac{2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right),
 \end{aligned} \tag{B.8}$$

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{k}, \nu | -\frac{\gamma}{2\hbar^2 m} (2\hat{p}_x \hat{p}_y \hat{\sigma}_x - \hat{p}_x^2 \hat{\sigma}_y) e^{i\hat{H}t/\hbar} \hat{\sigma}_z \hat{p}_x e^{-i\hat{H}t/\hbar} | \mathbf{k}, \nu \rangle \\
 = \frac{\gamma \hbar}{2m} \frac{k_x^2 \nu i}{k \Delta(k, \theta)} (\alpha k_x k_y + \beta(-2k_y^2 + k_x^2) - \gamma k_x^2 k_y^2) \exp\left(\frac{-2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right)
 \end{aligned} \tag{B.9}$$

Al sumar el valor de expectación de cada término del conmutador, se obtiene que el valor de expectación para el conmutador de la conductividad Hall de espín es:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle &= -\frac{1}{2m} \frac{\nu i}{k\Delta(k, \theta)} \hbar k_x^2 (\alpha^2 - \beta^2 - \alpha_x k_y - \beta_y^2) \exp\left(\frac{2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right) \\
&- \frac{1}{2m} \frac{\nu i}{k\Delta(k, \theta)} \hbar k_x^2 (\alpha^2 - \beta^2 - \alpha_x k_y - \beta_y^2) \exp\left(\frac{-2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right) \\
&+ \frac{1}{2m} \frac{\nu i}{k\Delta(k, \theta)} \hbar k_x^2 (\alpha\gamma k_x k_y + \beta\gamma(-2k_y^2 + k_x^2) - \gamma^2 k_x^2 k_y^2) \exp\left(\frac{2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right) \\
&+ \frac{1}{2m} \frac{\nu i}{k\Delta(k, \theta)} \hbar k_x^2 (\alpha\gamma k_x k_y + \beta\gamma(-2k_y^2 + k_x^2) - \gamma^2 k_x^2 k_y^2) \exp\left(\frac{-2ik\Delta(k, \theta)\nu t}{\hbar}\right)
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Al agrupar términos semejantes y al usar identidades trigonométricas, se obtiene que:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}, \nu | [\hat{\mathbf{j}}_x^s(t), \hat{v}_y(0)] | \mathbf{k}, \nu \rangle &= \frac{\nu i \hbar k_x^2}{k\Delta(k, \theta)m} \cos\left(\frac{2k\Delta(k, \theta)t}{\hbar}\right) \\
&\left(-\alpha^2 + \beta^2 + \alpha\gamma k^2 \text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k^2 \text{cos}(2\theta) - \frac{\gamma^2}{4} k^4 \text{sen}^2(2\theta)\right),
\end{aligned} \tag{B.11}$$

por lo que el valor de la conductividad Hall de espín para la interacción conjunta del efecto Rashba y Dresselhaus cúbico es:

$$\sigma_{xy}^{sz}(\omega) = \frac{e}{\hbar A m (\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\eta)t} \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{\nu i \hbar k_x^2}{k\Delta(k, \theta)} \cos\left(\frac{2k\Delta(k, \theta)t}{\hbar}\right) \mathcal{G}(k, \theta) \tag{B.12}$$

con

$$\mathcal{G}(k, \theta) = -\alpha^2 + \beta^2 + \alpha\gamma k^2 \text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k^2 \text{cos}(2\theta) - \frac{\gamma^2}{4} k^4 \text{sen}^2(2\theta) \tag{B.13}$$

Con la finalidad de simplificar los cálculos y poder integrar analíticamente en  $k$  se hará  $\Delta(k, \theta) \rightarrow \Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)$  y  $\mathcal{G}(k, \theta) \rightarrow \mathcal{G}_{F_0}(\theta)$  con

$$\mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta) \equiv -\alpha^2 + \beta^2 + \alpha\gamma k_{F_0}^2 \text{sen}(2\theta) + \beta\gamma k_{F_0}^2 \text{cos}(2\theta) - \frac{\gamma^2}{4} k_{F_0}^4 \text{sen}^2(2\theta) \tag{B.14}$$

por lo que la expresión para la conductividad se expresa formalmente como

$$\sigma_{xy}^{sz}(\omega) = \frac{e}{\hbar A m (\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega + i\eta)t} \sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \frac{\nu i \hbar k_x^2}{k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)} \cos\left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)t}{\hbar}\right) \mathcal{G}_{F_0}(k_{F_0}, \theta) \tag{B.15}$$

La integral en el tiempo es:

$$i \int_0^\infty e^{i(\omega+i\eta)t} \cos\left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)t}{\hbar}\right) dt = \frac{(\omega + i\eta)}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^2}, \quad (\text{B.16})$$

y al hacer  $\sum_{\mathbf{k}, \nu} f(\mathcal{E}_\nu)_{T=0} \nu \rightarrow -\int_0^{2\pi} \int_{k_{F_+}}^{k_{F_-}} \frac{Ak}{(2\pi)^2} dk d\theta$ , la conductividad Hall de espín se escribe como:

$$\sigma_{xy}^{sz}(\omega) = \frac{-e}{(2\pi)^2 m} \int_0^{2\pi} \int_{k_{F_+}}^{k_{F_-}} \frac{1}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^2} \frac{k^2 \cos^2 \theta}{\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)} \mathcal{G}_{F_0}(\theta) dk d\theta \quad (\text{B.17})$$

Por su parte, la integral respecto a  $k$ , es:

$$\begin{aligned} I_{\mathbf{k}_{RD^{3D}}} &= \int_{k_{F_+}}^{k_{F_-}} \frac{k^2}{(\omega + i\eta)^2 - \left(\frac{2k\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^2} dk \\ &= \frac{-k \Big|_{k_{F_+}}^{k_{F_-}}}{\left(\frac{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^2} + \frac{(\omega + i\eta)}{\left(\frac{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^3} \operatorname{arctanh} \left\{ \frac{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)k}{\hbar(\omega + i\eta)} \right\} \Big|_{k_{F_+}}^{k_{F_-}} \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Como se puede observar en la ec. (B.18), debido a la aproximación hecha, la integral respecto a  $k$  es muy similar a la obtenida para el caso en el que la contribución del efecto Dresselhaus es lineal (ec. (4.44)). Debido a la consideración hecha a los eigenvalores se tiene que:

$$k_{F_\pm} = \mp \frac{m\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^2} + \sqrt{\frac{m^2\Delta_{F_0}^2(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^4} + \frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{E}_F} \quad (\text{B.19})$$

por lo que

$$k_{F_-} - k_{F_+} = \frac{2m\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar^2}, \quad (\text{B.20})$$

de tal forma que

$$I_{\mathbf{k}_{RD^{3D}}}(\theta) = \frac{(\omega + i\eta)}{2\left(\frac{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}{\hbar}\right)^3} \ln \left[ \frac{\hbar(\omega + i\eta) - 2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)k_{F_+}}{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)k_{F_-} - (\hbar(\omega + i\eta))} \right] - \frac{m}{2\Delta_{F_0}(k_{F_0}, \theta)}, \quad (\text{B.21})$$

# Apéndice C

## Ancho efectivo del pozo de potencial

El Hamiltoniano para la interacción espín-órbita de Dresselhaus que incluye el término cúbico es:

$$\hat{H}_{D^3} \sim \alpha_D [k_x(k_y^2 - k_z^2)\hat{\sigma}_x + k_y(k_z^2 - k_x^2)\hat{\sigma}_y + k_z(k_x^2 - k_y^2)\hat{\sigma}_z] \quad (\text{C.1})$$

Sabiendo que  $\langle k_z \rangle = 0$  y que  $\langle k_z^2 \rangle \neq 0$ , se puede escribir

$$\langle \hat{H}_{D^3} \rangle = \alpha_D (k_x k_y^2 \hat{\sigma}_x - k_x \langle k_z^2 \rangle \hat{\sigma}_x + k_y \langle k_z^2 \rangle^2 \hat{\sigma}_y - k_y k_x^2 \hat{\sigma}_y) \quad (\text{C.2})$$

donde  $\alpha_D = \gamma$  y  $\alpha \langle k_z^2 \rangle = \beta$ .

Para el pozo de potencial  $k_z = \frac{2\pi}{L_z}$ , donde  $L_z = w$  el ancho del potencial, por lo que  $\langle k_z^2 \rangle = \langle \frac{4\pi^2}{w^2} \rangle = \frac{4\pi^2}{w^2}$ . Al sustituir se encuentra que

$$\alpha_D \langle k_z^2 \rangle = \beta = \gamma \langle k_z^2 \rangle = \gamma \frac{4\pi^2}{w^2} \quad (\text{C.3})$$

por lo que

$$\beta = \gamma \frac{4\pi^2}{w^2}, \quad (\text{C.4})$$

lo que implica que  $\beta$  depende del inverso al cuadrado del ancho efectivo del pozo de potencial, i.e.  $\beta \sim \frac{1}{w^2}$ .