



Universidad Central de Venezuela

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

**ANILLO MESOSCÓPICO CON INTERACCIÓN
ESPÍN-ÓRBITA ACOPLADO A UN RESERVORIO
DE ELECTRONES**

Br. Michael Ellner

Dr. Ernesto Medina, Tutor

Caracas, 28 de mayo del año 2012



Universidad Central de Venezuela

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

**ANILLO MESOSCÓPICO CON INTERACCIÓN
ESPÍN-ÓRBITA ACOPLADO A UN RESERVORIO
DE ELECTRONES**

Br. Michael Ellner

Dr. Ernesto Medina, Tutor

Caracas, 28 de mayo del año 2012

ANILLO MESOSCÓPICO CON INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA
ACOPLADO A UN RESERVORIO DE ELECTRONES

Br. Michael Ellner

*Trabajo Especial de Grado presentado
ante la ilustre Universidad Central de Venezuela
como requisito parcial para optar al título de
Licenciado en Física.*

Agradecimientos

A mi tutor de tesis Ernesto Medina por su apoyo, paciencia y brindarme su infinita sabiduría.

A mis jurados Anamaría Font, Félix Marín, Rafael Martín y Vidal Alonso por correcciones y sugerencias que ayudaron a moldear la tesis. Agradezco también a Alexander López, Luis González, Luis González-Díaz y Ritguy Flores por discusiones y comentarios que me ayudaron a refinar varias secciones de la tesis.

A mis padres Celenia Martínez y Steve Ellner y hermanos Asdrúbal Camero y Michelle Ellner por su completa abnegación y buen ejemplo. Estoy igualmente agradecido con Lucía Serna por compartir conmigo lindos momentos durante los últimos tres años.

A mis compañeros de la universidad, en especial Almary Guerra, Aurimary Zoino, Erick Castro, José Gregorio Fernández y Víctor Díaz, por brindarme una grata amistad.

**Anillo mesoscópico con interacción espín-órbita acoplado a un
reservorio de electrones**

Michael Ellner

Dr. Ernesto Medina, Tutor

Universidad Central de Venezuela

Se estudian los estados electrónicos de un anillo mesoscópico con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y flujo magnético en configuración Aharonov-Bohm. Se introduce decoherencia en el anillo acoplándolo a un reservorio de electrones vía un cable ideal que actúa como una prueba de voltaje. Se calcula la densidad de estados, corrientes persistentes de carga y espín como función de la interacción espín-órbita, flujo magnético y acoplamiento al reservorio.

ÍNDICE GENERAL

Resumen	iv
Índice General	v
Lista de Figuras	vii
Introducción	1
0.1. Objetivo general	2
0.2. Objetivos específicos	3
1. Interacción espín-órbita en semiconductores	4
1.1. Semiconductores	5
1.1.1. Compuestos semiconductores III-V	6
1.1.2. Heteroestructuras	7
1.1.3. Dopaje remoto y el gas de electrones en dos dimensiones	8
1.2. Estructura de bandas de semiconductores con interacción espín-órbita. Método k-p	11
1.2.1. Modelo de Kane	14
1.3. Aproximación de función envolvente	19
1.3.1. Aproximación de función envolvente en heterouniones . .	21
2. Efecto Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher	30

ÍNDICE GENERAL

2.1.	Transformaciones de calibre	30
2.2.	Fases topológicas	33
2.2.1.	Efecto Aharonov-Bohm	34
2.2.2.	Efecto Aharonov-Casher	38
3.	Anillo semiconductor acoplado a un reservorio de electrones	40
3.1.	Autovalores y autofunciones del hamiltoniano	40
3.2.	Modelo de decoherencia de Büttiker	43
3.3.	Acople con el reservorio	45
3.4.	Densidad de estados	47
3.5.	Corrientes persistentes de carga	48
3.6.	Corrientes persistentes de espín	49
4.	Resultados y discusiones	51
4.1.	Espectro del anillo desacoplado	51
4.2.	Densidad de estados	55
4.3.	Corrientes persistentes de carga	59
4.4.	Corrientes persistentes de espín	63
	Conclusiones	66
	Bibliografía	69

LISTA DE FIGURAS

1.1.	Izquierda: Estructura cristalina zinkblenda; consiste de dos redes fcc desplazadas por un cuarto de la diagonal principal [1]. Derecha: Primera zona de Brillouin de la estructura zinkblenda; los puntos y direcciones simetría se indican en [2].	6
1.2.	Regla de la afinidad electrónica de Anderson (adaptado de [3]) . . .	8
1.3.	Dopaje remoto del n-AlGaAs - GaAs. Se separan espacialmente los portadores de las impurezas y se forma el gas de electrones bidimensional en la interfaz entre los dos semiconductores (adaptado de [3]).	10
1.4.	Heteroestructura usada para crear el gas de electrones bidimensional. La dirección de confinamiento es a lo largo del eje z [4].	11
1.5.	Estructura de bandas del GaAs cerca del punto Γ obtenida usando el modelo de cuatro bandas de Kane [5].	19
1.6.	Comportamiento de la función de onda bajo la aproximación de la función envolvente. Abajo: se muestran los potenciales periódicos. Arriba: se muestra la función oscilante de Bloch siendo modulada por la función envolvente [5].	21
1.7.	Bordes de banda de la heterunión AlGaAs-GaAs (adaptado de [6]).	23
2.1.	Esquema del experimento de doble rendija con electrones. Adaptado de [4]	35
2.2.	Campo magnético y potencial vector de un solenoide infinito [7] . .	36

LISTA DE FIGURAS

2.3.	Experimento de doble rendija con un solenoide pequeño cuyo campo magnético no interactúa con los electrones. Se observa un corrimiento en el patrón de interferencia. Adaptado de [4]	38
2.4.	Campo eléctrico producido por una línea infinita de carga.	38
3.1.	Anillo penetrado por un flujo magnético en configuración AB y acoplado a un reservorio de electrones vía un cable ideal [8]	44
3.2.	Anillo mesoscópico con interacción EO tipo Rashba fabricado de un GE2D. La interacción Rashba se modula mediante una compuerta de voltaje. El anillo se encuentra penetrado por un flujo magnético en configuración AB y acoplado a un reservorio de electrones vía un cable ideal.	45
4.1.	Energía de electrones en el anillo desacoplado en función del flujo magnético a) sin interacción EO ($\omega_{SO}/\Omega = 0$) y b) con interacción EO $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$. Adicionalmente, se muestran niveles de Fermi que encierran $4k$ electrones (línea negra sólida) y $4k + 2$ electrones (línea negra discontinua). . .	53
4.2.	Energía de electrones en el anillo desacoplado en función de la interacción EO a) sin flujo magnético ($\Phi/\Phi_0 = 0$) y b) con flujo magnético $\Phi/\Phi_0 = 0,2$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$	54
4.3.	Espectro 3D del anillo desacoplado en función del flujo magnético y el parámetro de interacción EO. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$	55
4.4.	Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. La interacción EO y el flujo magnético se encuentran apagados ($\omega_{SO}/\Omega = 0$, $\Phi/\Phi_0 = 0$). La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$	56
4.5.	Tiempo de vida de electrones en el anillo en función del parámetro de acoplamiento con el reservorio. Los puntos corresponden a tiempos de vida obtenidos mediante el ajuste de la distribución (4.2), mientras que la línea roja es un ajuste de los puntos.	57
4.6.	Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio . Los parámetros de interacción son a) $\omega_{SO}/\Omega = 0$, $\Phi/\Phi_0 = 0,1$ y b) $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$, $\Phi/\Phi_0 = 0$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$	58

LISTA DE FIGURAS

4.7.	Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. La interacción EO es $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$ mientras que el flujo magnético es $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$	59
4.8.	Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. La interacción EO se encuentra apagada y la corriente persistente de carga se mide en unidades $I_0 = ev_f/2\pi a$	61
4.9.	Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para distintas interacciones EO y acoplamiento $\varepsilon = 0,1$ con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$	62
4.10.	Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para distintas interacciones EO y acoplamiento $\varepsilon = 0,1$ con el reservorio. El número de electrones cambia en función del flujo de $4k$ a $4k+1$ (curva azul) y $4k$ a $4k+3$ (curva púrpura).	63
4.11.	Corriente persistente de espín en función del flujo magnético para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. La interacción EO es $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$. La corriente se mide en unidades $J_0 = \hbar v_f/4\pi a$	64
4.12.	Corriente persistente de espín en función del parámetro de EO para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. El flujo magnético se encuentra apagado ($\Phi/\Phi_0 = 0$). La corriente de espín se mide en unidades $J_0 = \hbar v_f/4\pi a$	65

INTRODUCCIÓN

Recientemente ha habido mucho interés en la interacción espín-órbita debido a su omnipresencia en materiales de alto valor tecnológico como los semiconductores no centro simétricos. Es de particular interés que la interacción espín-órbita puede ser usada para manipular el grado de libertad de espín mucho menos sujeto a los efectos de la decoherencia debido a su acoplamiento menos intenso que el de la carga eléctrica.

El espín se ha propuesto como recurso para las transacciones de información en futuros computadores cuánticos, que han sido implementados preliminarmente en el ámbito de la resonancia magnética nuclear. Por otro lado, los efectos topológicos como el de Aharonov-Bohm, Aharonov-Casher y efecto Hall sirven como mecanismos para la protección de corrientes de carga o espín reduciendo o eliminando la dispersión de electrones, emulando la superconductividad. Se ha propuesto que a diferencia de las corrientes de carga, las corrientes de espín son no disipativas debido a que no rompen la simetría de inversión temporal. En este sentido, las corrientes persistentes de carga son un fenómeno de gran interés, ya que emula a las corrientes superconductoras que a bajas temperaturas son corrientes no disipativas producto de campos magnéticos fijos.

En este trabajo estamos interesados en la determinación de corrientes persistentes de carga y espín en materiales semiconductores no centro simétricos con geometrías

no-simplemente-conexas. En particular, se considera un anillo mesoscópico basado en un gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita tipo Rashba y un flujo magnético en configuración Aharonov-Bohm. Se introduce decoherencia en el anillo mediante el uso de un reservorio de electrones que actúa como una prueba de voltaje.

La estructura del presente trabajo es la siguiente:

- En el capítulo 1 se presentan algunos conceptos básicos de la física de semiconductores necesarios para introducir el gas de electrones bidimensional. Usando la teoría k-p se estudian las bandas de energías en semiconductores III-V donde la interacción espín-órbita resulta importante. Finalmente se deduce el término de interacción espín-órbita tipo Rashba usando la aproximación de la función envolvente, una generalización de la teoría k-p, la cual permite incorporar el potencial de confinamiento del gas de electrones.
- En el capítulo 2 se estudian brevemente los efectos topológicos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher, cuyos mecanismos subyacentes son el acople de potenciales de calibre $U(1)$ y $SU(2)$ a la fase de la función de onda de una partícula con carga o momento magnético, respectivamente. Estos efectos topológicos se manifiestan en el anillo como corrientes persistentes de carga y espín.
- En el capítulo 3 se desarrollan los cálculos teóricos correspondientes al espectro del anillo, la densidad de estados y las corrientes persistentes de carga y espín. Además, usando el modelo de Büttiker [8], se desarrolla un modelo teórico que permite introducir decoherencia en el anillo.
- En el capítulo 4 se presentan los resultados del modelo desarrollado estudiando el comportamiento de las cantidades físicas calculadas en el capítulo 3.

0.1. Objetivo general

Estudiar analíticamente los estados electrónicos de un anillo mesoscópico.

0.2. Objetivos específicos

1. Estudiar las corrientes persistentes en el anillo en presencia de:
 - Un campo magnético en configuración Aharonov-Bohm.
 - Interacción espín-órbita tipo Rashba.
2. Desarrollar un modelo simple para introducir decoherencia en un anillo mesoscópico con interacción espín-órbita y flujo magnético en configuración Aharonov-Bohm.

CAPÍTULO 1

INTERACCIÓN ESPÍN-ÓRBITA EN SEMICONDUCTORES

En el presente capítulo se busca describir los efectos de la interacción espín-órbita (EO) en heteroestructuras formadas por semiconductores compuestos tipo III-V. El capítulo comienza con un breve resumen de los conceptos fundamentales de semiconductores y heteroestructuras. Posteriormente, en la sección 1.2, se describe el método k - p que permite tratar a la interacción EO en cristales usando la teoría de perturbaciones y describir las bandas de energía en la región cercana al centro de la zona de Brillouin. En la sección 1.2.1 se usa el modelo de Kane para escribir un hamiltoniano de dimensión finita como aproximación a la descripción de las bandas de semiconductores cúbicos de brecha directa. En la sección 1.3 se describe la aproximación de la función envolvente (AFE), una extensión del método k - p , que permite describir a los estados de electrones y huecos tomando en cuenta campos eléctricos y magnéticos que varían poco con respecto a la escala establecida por la constante de la red. Dentro del esquema de la AFE, en la sección 1.3.1 se usa el modelo de Kane para escribir un hamiltoniano efectivo de electrones en la primera banda de conducción de una heteroestructura confinante. El hamiltoniano efectivo contiene un término de interacción EO llamado Rashba. La interacción se manifiesta cuando el potencial de confinamiento

to es asimétrico y se amplifica en semiconductores de brecha fundamental pequeña. La heterounión tratada aquí corresponde a Arseniuro de Galio-Aluminio / Arseniuro de Galio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$). Sin embargo, se puede aplicar de forma similar a otras heterouniones confinantes.

1.1. Semiconductores

Los sólidos cristalinos se caracterizan por tener un arreglo periódico de átomos con distancias características comparables a la de los átomos mismos. Las funciones de ondas de los electrones de valencia se solapan entre sí lo cual resulta en una separación de sus niveles energéticos. Debido al alto número de átomos en un sólido, los niveles energéticos forman bandas cuasi-continuas. Al ir de las subcapas ocupadas a subcapas desocupadas de un átomo dado en su estado base, se forman bandas progresivamente más anchas [9]. Las bandas pueden entonces traslaparse o estar separadas por una brecha energética. La ocupación de una banda energética a temperatura cero viene dado por el número de electrones de valencia por celda unitaria de la red cristalina. La banda más energética que los electrones llenan por completo en el cero absoluto se denomina banda de valencia. Las subsiguientes bandas de energía se llaman bandas de conducción. La caracterización de un sólido viene dado por dos factores: la ocupación de las bandas de energía y la brecha entre la banda de valencia y la primera banda de conducción también llamada brecha fundamental E_G . Un sólido es metálico si tiene una banda de conducción parcialmente llena, o si ésta se solapa con la banda de valencia. Un sólido es no metálico si la banda de conducción se encuentra vacía. Si la separación entre las bandas es pequeña ($E_G < 2eV$), la energía térmica actúa como un puente que permite a una fracción de los electrones de la banda de valencia pasar a la banda de conducción. A estos sólidos se le llaman semiconductores.

La resistividad típica de un semiconductor intrínseco (sin dopaje significativo) a temperatura ambiente es de 10^9ohm-cm . En contraste, la resistividad de metales es $\rho \approx 10^{-6}\text{ohm-cm}$ y la de buenos aislantes $\rho \approx 10^{22}\text{ohm-cm}$. La resistividad de los

semiconductores se puede disminuir significativamente añadiendo dopaje (ver sección 1.1.3). Un cambio en el dopaje del semiconductor de una parte en 10^3 puede disminuir la resistividad por un factor de 10^{12} , logrando así una resistividad de $\rho \approx 10^{-3}$ ohm-cm [10].

Generalmente los semiconductores son sólidos formados a partir de enlaces covalentes. Pueden ser elementos semiconductores como Silicio (Si) y Germanio (Ge) o semiconductores compuestos como el Arseniuro de Galio. Éste último pertenece al grupo III-V.

1.1.1. Compuestos semiconductores III-V

Los semiconductores del grupo III-V cristalizan en una estructura zincblenda. Dicha estructura consiste en dos redes cúbicas centrada en las caras (fcc) desplazadas por un cuarto de la diagonal principal del cubo, de tal forma que cada ion tiene cuatro vecinos próximos (ver figura 1.1). La red recíproca de la zincblenda es una red cúbica centrada en el cuerpo (bcc). Su primera zona de Brillouin, la celda primitiva de Wigner-Seitz de la red recíproca, es un octaedro truncado (ver figura 1.1).

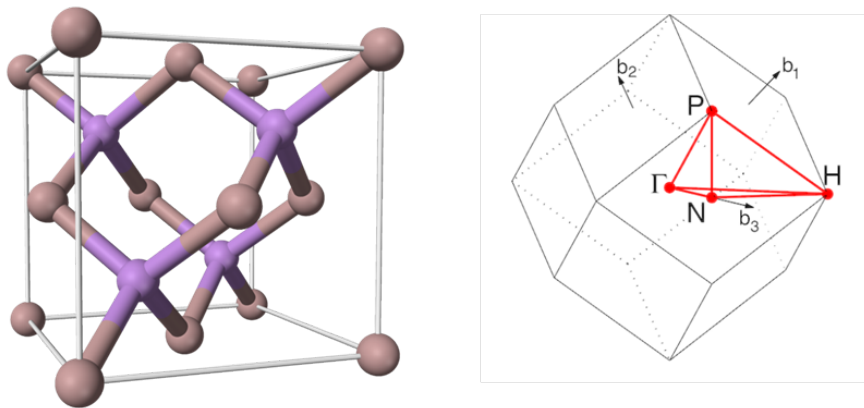


Figura 1.1: Izquierda: Estructura cristalina zincblenda; consiste de dos redes fcc desplazadas por un cuarto de la diagonal principal [1]. Derecha: Primera zona de Brillouin de la estructura zincblenda; los puntos y direcciones simetría se indican en [2].

Cada átomo de un tipo se encuentra conectado a cuatro átomos del otro tipo mediante enlaces covalentes que forman un tetraedro. En ellos se produce una hibridación de los orbitales s y p con los ocho electrones del enlace tetraédrico (cinco del anión y tres del catión). Se llenan los orbitales s enlazantes con dos electrones y los orbitales p enlazantes con seis electrones por celda unitaria formando bandas completamente llenas. El último conjunto de bandas de valencia proviene de los orbitales p y se les llama banda de huecos pesados, huecos livianos, desdoblada en espín. Los orbitales s antienlazantes forman la primera banda de conducción la cual en el cero absoluto se encuentra vacía. Los bordes de ambas bandas se encuentran en el centro de la zona de Brillouin. La relación de dispersión de electrones en la primera banda de conducción y de huecos en las bandas de valencia se estudia en la sección 1.2.1.

1.1.2. Heteroestructuras

Una heterounión es la interfaz que se encuentra entre dos capas de semiconductores cristalinos distintos. Un arreglo de semiconductores que forman una o más heterouniones se llama heteroestructura. Al variar la composición de una heteroestructura se pueden modificar las propiedades físicas de los electrones y huecos en los semiconductores. Para crear una heterounión, es necesario que los semiconductores constituyentes tengan estructuras cristalinas similares y constantes de red casi idénticas [3]. El GaAs tiene una constante de red $a \approx 5,65325\text{Å}$ mientras que la constante de red del $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ es $a \approx 5,65330\text{Å}$. La discrepancia entre las constantes de red es $3 \times 10^{-3} \%$ por lo que forman una buena heterounión. En general, los semiconductores que constituyen una heteroestructura tienen brechas fundamentales distintas. Para el GaAs se tiene $E_G = 1,422\text{eV}$ mientras que para el $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ se tiene $E_G = 1,797\text{eV}$. Por lo tanto, las bandas respectivas se encuentran corridas en energía una respecto de la otra. La característica relevante de una heteroestructura es la discontinuidad entre las energías de las bandas. Para determinar la discontinuidad entre las bandas de conducción se usa la regla de la afinidad electrónica de Anderson. Se considera una

heterounión entre dos materiales A y B con brechas fundamentales $E_g^A < E_g^B$. La regla de Anderson afirma que los niveles de vacío para ambos semiconductores coinciden (ver figura 1.2). Esto se debe a que la afinidad χ es prácticamente independiente del nivel de Fermi [3]. Con esto $\Delta E_c = E_c^B - E_c^A = \chi^A - \chi^B$. Para GaAs se tiene $\chi = 4,07\text{eV}$

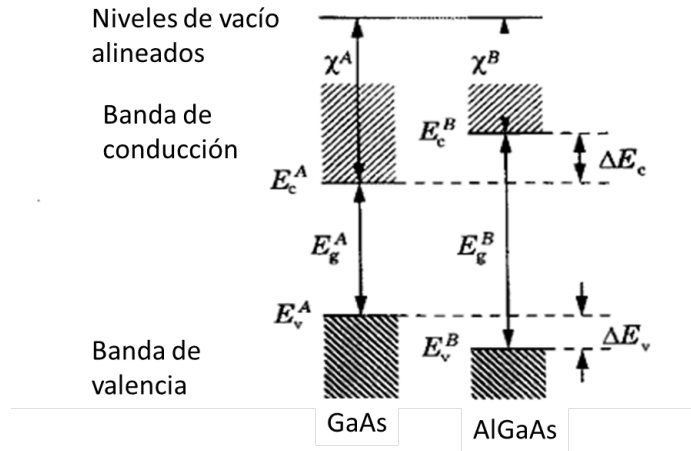


Figura 1.2: Regla de la afinidad electrónica de Anderson (adaptado de [3])

y para el $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ $\chi = 3,47\text{eV}$. La regla de Anderson predice diferencias entre las bandas de $\Delta E_c = 0,33\text{eV}$ y $\Delta E_v = 0,04\text{eV}$. Se observa que la brecha del $\text{Al}_{0,3}\text{Ga}_{0,7}\text{As}$ es mayor que la del GaAs. Una heteroestructura con dos capas de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ encerrando a una de GaAs atrapa tanto a los electrones como a los huecos del GaAs creando un "pozo de potencial".

1.1.3. Dopaje remoto y el gas de electrones en dos dimensiones

En dispositivos electrónicos creados con semiconductores, se necesitan portadores de carga móviles para conducir la corriente eléctrica: electrones, iones, huecos, etc; para introducir portadores de carga móviles, se dopa el material con impurezas. Esto es, se agregan una cantidad pequeña de átomos neutros que "donen" electrones libres a la red o "acepten" electrones dejando huecos móviles. Los semiconductores con portadores

móviles negativos se denominan tipo-n y con portadores positivos tipo p. Por ejemplo, se suele dopar $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ con Silicio para obtener un semiconductor donador de electrones ($\text{n-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$).

El problema con el dopaje directo de un semiconductor, es que al introducir electrones o huecos móviles en el material, las impurezas quedan eléctricamente cargadas. A su vez, esto ocasiona dispersión entre las cargas móviles y las impurezas debido a la interacción de Coulomb resultante. La dispersión disminuye la movilidad de los portadores e introduce decoherencia en el sistema [11]. La decoherencia puede borrar las fases adquiridas por los electrones móviles debido a efectos topológicos (ver capítulo 2) y crear brechas de energía en el sistema (ver capítulo 3). Una manera práctica de introducir electrones libres en un semiconductor y disminuir la dispersión por impurezas ionizadas es dopar remotamente al semiconductor. Esto es, separar espacialmente los portadores de las impurezas ionizadas. Se considera una heteroestructura creada con un semiconductor intrínseco y uno con dopaje tipo n. Si el semiconductor tipo n tiene mayor brecha fundamental que el intrínseco, entonces electrones provenientes de las impurezas migran al semiconductor puro hasta que los potenciales químicos de los semiconductores se igualen. El campo eléctrico generado por las impurezas deforma la banda de conducción y los electrones quedan atrapados en la heterounión en lo que se llama un gas de electrones de dos dimensiones (GE2D). Esto se esquematiza en la figura 1.3 para una heteroestructura $\text{n-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$. Si el semiconductor dopado es tipo p, entonces el semiconductor intrínseco debe tener una mayor brecha fundamental para conseguir el efecto.

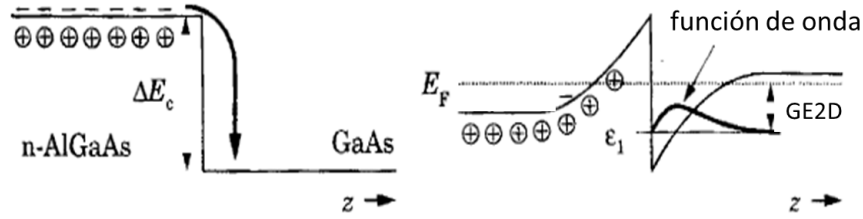


Figura 1.3: Dopaje remoto del n-AlGaAs - GaAs. Se separan espacialmente los portadores de las impurezas y se forma el gas de electrones bidimensional en la interfaz entre los dos semiconductores (adaptado de [3]).

Se puede mejorar la movilidad de los electrones en el GE2D descrito anteriormente creando una heteroestructura más complicada. Se suele agregar una capa fina de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sin dopar (o con ligero dopaje tipo p) entre las capas de n- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y GaAs. El $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ y el n- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tienen bandas de energía muy similares. Los electrones migran de la capa de n- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ a la de GaAs debido a la brecha ΔE_c entre los semiconductores. Se consigue de esta manera aislar aún más las impurezas ionizadas de los electrones libres y reducir así la dispersión. Esto resulta a costa de disminuir la densidad de electrones en el GE2D. Además de esto, se suele agregar una capa fina de GaAs y un ánodo como se muestra en la figura 1.4. El GaAs evita que el n- $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ se oxide y el ánodo permite establecer un voltaje de compuerta que modula el potencial de confinamiento.

El potencial neto en la heterounión tiene cuatro contribuciones [6]:

- El potencial del cristal $V_0(\vec{r})$ que incluye el cambio de materiales.
- El potencial generado por las impurezas ionizadas llamado potencial de agotamiento. Usando la ecuación de Poisson se consigue

$$V_D = \frac{4\pi}{\kappa_s} N_d z, \quad (1.1)$$

donde κ_s es la constante dieléctrica y N_d la carga de agotamiento.

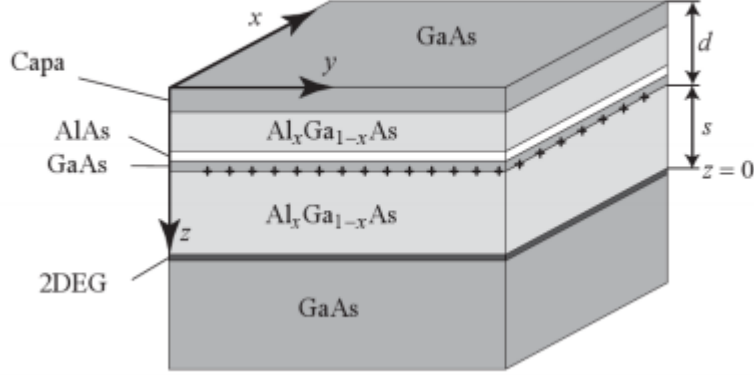


Figura 1.4: Heteroestructura usada para crear el gas de electrones bidimensional. La dirección de confinamiento es a lo largo del eje z [4].

- Un potencial efectivo tipo Hartree generado por los electrones

$$V_H(z) = \frac{4\pi e^2}{\kappa_s} N_{el} \left[z - \int_{-\infty}^z \rho(z') (z - z') dz' \right], \quad (1.2)$$

donde N_{el} es la carga de inversión y $\rho(z)$ la densidad de carga electrónica.

- Un potencial de compuerta que modula el potencial de confinamiento

$$V_{ext}. \quad (1.3)$$

1.2. Estructura de bandas de semiconductores con interacción espín-órbita. Método k-p

La interacción espín-órbita (EO) surge naturalmente al tomar el límite no relativista de la ecuación de Dirac [5, 4]. Dicho procedimiento conduce al hamiltoniano de Pauli:

$$H = \left[\frac{\vec{\Pi}^2}{2m_0} + e\phi \right] \mathbb{I}_{2 \times 2} - \left[\frac{\vec{\Pi}^4}{8m_0^3 c^2} - \frac{e\hbar^2}{8m_0^2 c^2} \vec{\nabla} \cdot \vec{E} \right] \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \frac{e\hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \times \vec{E}}{4m_0^2 c^2}, \quad (1.4)$$

donde $e = -|e|$ es la carga del electrón, m_0 la masa en reposo, c la velocidad de la luz en el vacío, \hbar la constante de Planck reducida, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ el vector de matrices de Pauli y $\vec{\Pi} = \vec{p} - e\vec{A}$ el momento cinético. El campo eléctrico y el campo magnético se derivan de un potencial escalar $\phi = \phi(\vec{r})$ y un potencial vector $\vec{A} = \vec{A}(\vec{r})$ respectivamente, según:

$$\vec{E} = -\nabla\phi \quad , \quad \vec{B} = \nabla \times \vec{A}.$$

El primer término en (1.4) corresponde al hamiltoniano no relativista usual: operador energía cinética más operador energía potencial $V = e\phi$. El segundo término describe la primera corrección relativista de la energía cinética y al término de Darwin, el cual da origen al efecto *Zitterbewegung*. Los últimos dos términos corresponden a interacciones Zeeman y EO, respectivamente. El término Zeeman describe la interacción entre el momento magnético intrínseco del electrón (espín) y un campo magnético mientras que la contribución EO describe el acople entre el espín y el movimiento orbital del electrón en un campo eléctrico.

En este trabajo de investigación nos interesa considerar la evolución de estados electrónicos en el ámbito de la materia condensada, a saber, en sistemas con periodicidad espacial. En este contexto, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que describe a un electrón moviéndose en una red periódica con interacción EO es

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) + \frac{\hbar\vec{\sigma} \cdot \nabla V_0(\vec{r}) \times \vec{p}}{4m_0^2 c^2} \right) \psi = E\psi, \quad (1.5)$$

donde $V_0(\vec{r})$ es el potencial cristalino originado por los núcleos. El resto de las correcciones relativistas de (1.1) sólo son importantes cuando átomos pesados están presentes y serán despreciadas en el resto de la tesis. El teorema de Bloch (ver [10]) indica que la función de onda de una partícula sujeta a un potencial periódico se puede descomponer en términos de una onda plana envolvente y una función (espinor) que tenga la misma periodicidad de la red

$$\psi_{\nu\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\nu\vec{k}}. \quad (1.6)$$

La etiqueta ν de la función de Bloch, caracteriza a la banda energética e incluye el grado de libertad del espín. Por otro lado, la etiqueta \vec{k} representa el vector de onda del cristal y se restringe a la primera zona de Brillouin de la red recíproca.

Al substituir (1.6) en (1.5) se obtiene

$$\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \times \nabla V_0(\vec{r}) + \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \vec{k} \cdot \vec{\sigma} \times \nabla V_0(\vec{r}) \right) u_{\nu \vec{k}} = E_{\nu \vec{k}} u_{\nu \vec{k}}.$$

Para $\vec{k} \approx 0$ se puede despreciar el último término debido a que el momento del cristal $\hbar \vec{k}$ es pequeño comparado con el momento electrónico \vec{p} [12]. El hamiltoniano resultante es

$$H_{\vec{k}, \vec{p}} = \underbrace{\left(\frac{\vec{p}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \vec{p} \cdot \vec{\sigma} \times \nabla V(\vec{r}) \right)}_{H_{\vec{k}, \vec{p}}(\vec{k}=0)} + \left(\frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right). \quad (1.7)$$

Las energías del borde de las bandas y las respectivas autofunciones se pueden obtener calculando los autovalores y autovectores de $H_{\vec{k}, \vec{p}}(\vec{k} = 0)$. Las autofunciones resultantes $u_{\nu 0}$ forman una base completa a partir de la cual se puede desarrollar la función de Bloch

$$u_{\nu \vec{k}} = \sum_{\nu'} c_{\nu'}(\vec{k}) u_{\nu' 0}. \quad (1.8)$$

Substituyendo (1.8) en la ecuación de Schrödinger, multiplicando por la izquierda por $u_{\nu \vec{k}}^*$ e integrando sobre una celda unitaria, se obtiene

$$\sum_{\nu'} \left\{ \left(E_{\nu 0} - E_{\nu \vec{k}} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} \right) \delta_{\nu \nu'} + \frac{\hbar \vec{k}}{m_0} \langle \nu 0 | \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} (\vec{\sigma} \times \nabla V) | \nu' 0 \rangle \right\} c_{\nu'}(\vec{k}) = 0. \quad (1.9)$$

La ecuación (1.9) permite tratar la interacción EO como una perturbación (para $\vec{k} \approx 0$). Los elementos de matriz asociados a la interacción separan niveles energéticos en el borde de la banda y los elementos de matriz asociados al término k-p mezclan los bordes de las bandas. Usando la teoría de perturbaciones degenerada, se pueden conseguir los tensores de masa efectiva para los electrones y los huecos (ver [5] para cálculos explícitos).

1.2.1. Modelo de Kane

El modelo de Kane consiste en resolver el hamiltoniano (1.9) usando un conjunto limitado de funciones, esto es, una base finita. Kane notó que para semiconductores compuestos tipo III-V el borde de las bandas de valencia v_t (orbitales tipo p) y el borde de la primera banda de conducción Γ_{6c} (orbitales tipo s) se encuentran poco separados [13]. Para el GaAs la separación es $E_G \approx 1,5eV$. A su vez éstas se encuentran significativamente separadas de las otras bandas. Kane utilizó una base restringida $\{u_{\nu 0}\}$ para describir a los estados Γ_{6c} y v_t y estudia el acoplamiento con otras bandas usando la teoría de perturbaciones. En la presente sección se calculan los autovalores del hamiltoniano (1.9) usando el modelo de Kane.

Las funciones de la base son autofunciones del hamiltoniano del cristal

$$H_{\vec{k},\vec{p}}(\vec{k} = 0)u_{\nu 0} = E_{\nu 0}u_{\nu 0} \quad (1.10)$$

Generalmente no se conocen las funciones de Bloch debido a que el potencial cristalino en (1.10) es complicado. Sin embargo, en los puntos de alta simetría de la primera zona de Brillouin, por ejemplo Γ_6 y v_t , la manera como las funciones de Bloch cambian bajo la acción del grupo de simetría puntual del cristal se pueden analizar usando argumentos de teoría de grupo [14]. Para $\vec{k} \approx 0$, la función de Bloch de una banda específica tiene la misma simetría que el orbital correspondiente cerca del borde de la banda.

Las funciones orbitales tienen la forma

$$\psi_{n,j,m_j} = \sum_{m,s} C_m^{CG} R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) \otimes \sigma_{m_s},$$

donde C_m^{CG} son los coeficientes de Clebsch-Gordan, Y_l^m los armónicos esféricos y σ_{m_s} representa el grado de libertad de espín. La base se construye de tal forma que la interacción EO sea diagonal [9]. El acoplamiento EO es proporcional a $\vec{L} \cdot \vec{S}$. A continuación se usa el momento angular total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ para desarrollar el término de interacción $\vec{L} \cdot \vec{S} = (J^2 - L^2 - S^2)/2$. Luego se construye la base $\{\psi_{n,j,m_j,l,s}\}$ usando el conjunto completo de observables que conmutan: $H_0 = T + V(r), J^2, J_z, L^2, S^2$.

En esta presentación vamos a usar una base de funciones de Bloch $\{u_{\nu 0}\}$ para (Γ_6, v_t) con la misma simetría que las funciones orbitales correspondientes $\{\psi_{n,j,m_j,l,s}\}$. La simetría está reflejada en las etiquetas $\{j, m_j, l, s\}$. La ventaja de construir la base de esta manera es que el hamiltoniano en (1.10) resulta diagonal. Para el caso presente, $s = 1/2$, Γ_{6c} tiene la misma simetría que las funciones con orbitales tipo s para los cuales $l = 0$. Por lo tanto $j = 1/2$, mientras que v_t tiene la simetría de orbitales tipo p ($l = 1$) y por ende, resultan en estados de momento angular total $j = 3/2$. Es fácil demostrar que el acoplamiento EO no afecta a los estados de Γ_{6c} , donde $\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \hbar(j^2 - l^2 - s^2)/2 = 0$. Sin embargo, el acoplamiento EO degenera a v_t en Γ_{8v} y Γ_{7v} . La banda correspondiente a Γ_{7v} se llama degenerada-en-espín. La tabla (1.1) identifica los elementos de la base $\{u_{\nu 0}\}$ en notación de Dirac.

Γ_j	J	m_j	ψ_{j,m_j}	E_j
Γ_{6c}	1/2	1/2	$ S \uparrow\rangle$	E_c
Γ_{6c}	1/2	-1/2	$ S \downarrow\rangle$	E_c
Γ_{8v}	3/2	1/2	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{6}} (X + iY) \downarrow\rangle$	E_v
Γ_{8v}	3/2	-1/2	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{6}} (X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle$	E_v
Γ_{8v}	3/2	3/2	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{1}{2}} (X + iY) \uparrow\rangle$	E_v
Γ_{8v}	3/2	-3/2	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{2}} (X - iY) \downarrow\rangle$	E_v
Γ_{7v}	1/2	1/2	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} Z \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} (X + iY) \downarrow\rangle$	$E_v - \Delta$
Γ_{7v}	1/2	-1/2	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle = -\sqrt{\frac{1}{3}} (X - iY) \uparrow\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} Z \downarrow\rangle$	$E_v - \Delta$

Tabla 1.1: Base de funciones del modelo de Kane

Ahora se emplearán estos resultados para calcular los elementos de matriz de (1.7) usando la base $\{u_{\nu 0}\}$

$$H_{8 \times 8} =
 \begin{array}{c|cccccccc}
 & |S \uparrow\rangle & |\frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle & |\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle & |\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle & |\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle & |\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle & |\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
 \hline
 \langle S \uparrow| & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}}P\hbar k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z & \frac{1}{\sqrt{6}}P\hbar k_- & 0 & -\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z & -\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_- \\
 \langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2}| & E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{6}}P\hbar k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z & \frac{1}{\sqrt{2}}P\hbar k_- & -\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_+ & \frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z \\
 \langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}| & 0 & E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}| & -\frac{1}{\sqrt{2}}P\hbar k_- & E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}| & \sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_z & 0 & E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}| & \frac{1}{\sqrt{6}}P\hbar k_+ & 0 & 0 & E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 & 0 \\
 \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}| & 0 & 0 & 0 & 0 & E_v + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 & 0 \\
 \langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}| & -\frac{1}{\sqrt{3}}P\hbar k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & E_v - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} & 0 \\
 \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}| & -\sqrt{\frac{2}{3}}P\hbar k_+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_v - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}
 \end{array}
 \tag{1.11}$$

En (1.11) $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Los elementos interbanda vienen dados por

$$P = \frac{1}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = \frac{1}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = \frac{1}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle \quad (1.12)$$

Se fija el cero de energía en la banda de conducción $E_c = 0$. Al calcular los autovalores del hamiltoniano se obtiene

$$E_c(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2 P^2 (E_G + 2\Delta/3)}{E_G (E_G + \Delta)}, \quad (1.13)$$

$$E_{hp}(\vec{k}) = -E_G + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0}, \quad (1.14)$$

$$E_{hl}(\vec{k}) = -E_G + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} - \frac{2\hbar^2 \vec{k}^2 P^2}{3E_c}, \quad (1.15)$$

$$E_{SO}(\vec{k}) = -E_G - \Delta + \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2 \vec{k}^2 P^2}{3(E_c + \Delta)}, \quad (1.16)$$

donde $E_G = E_c - E_{\Gamma_8}$ es la brecha fundamental.

La asociación que tienen los autovalores de (1.11) con bandas particulares se hace clara cuando se toma el vector de onda del cristal \vec{k} en la misma dirección que la cuantización del momento angular \vec{J} ($\vec{J} // \vec{k} // \hat{z}$). Los estados con $m_j = \pm 3/2$ de Γ_{8v} tienen energía (1.14). Las partículas pesadas cuya masa efectiva coincide con la del electrón, se denominan huecos pesados. Los estados con $m_j = \pm 1/2$ están asociados a partículas livianas. Entre estos se tienen los electrones en la banda de conducción (Γ_{6c}) con energía (1.13), los huecos livianos (Γ_{8v}) con energía (1.15) y los degenerados-en-espín (Γ_{7v}) con la energía (1.16).

En la vecindad del borde de la banda se expanden las energías en segundo orden en k para obtener las masas efectivas

$$\frac{1}{m_e} = \frac{1}{m_0} + \frac{4\hbar^2 P^2}{3E_G} + \frac{2\hbar^2 P^2}{3(E_G + \Delta)},$$

$$\frac{1}{m_{hp}} = \frac{1}{m_0},$$

$$\frac{1}{m_{hl}} = \frac{1}{m_0} - \frac{4P^2}{3E_G},$$

$$\frac{1}{m_{SO}} = \frac{1}{m_0} - \frac{2\hbar^2 P^2}{3(E_G + \Delta)}.$$

Bajo esta aproximación, la masa efectiva para los huecos pesados tiene el signo equivocado. El problema se soluciona incluyendo los efectos de bandas remotas usando la teoría de perturbaciones o considerando el modelo extendido de Kane [5]. Sin embargo, como la banda no tiene acoples con otras bandas, se puede corregir en forma *ad hoc*. Las relaciones de dispersión en la región cercana al punto Γ se muestran en la figura 1.5

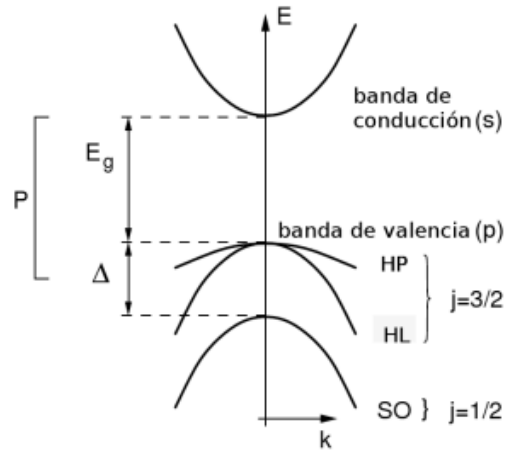


Figura 1.5: Estructura de bandas del GaAs cerca del punto Γ obtenida usando el modelo de cuatro bandas de Kane [5].

1.3. Aproximación de función envolvente

El método de la aproximación de función envolvente (AFE) permite describir estados de electrones y/o huecos en presencia de un campo externo que varía poco

en comparación con la escala del cristal. Dichos campos pueden ser internos como los producidos por los defectos del cristal, o externos como compuertas de voltaje. De particular interés es considerar el potencial de confinamiento del GE2D descrito en la sección 1.1.2.

La ecuación de Schrödinger para una partícula en una red periódica en presencia de un potencial $V(\vec{r})$ y un campo magnético \vec{B} es

$$\left(\frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m_0} + V_0(\vec{r}) - \frac{\hbar\vec{\sigma} \cdot (\vec{p} - e\vec{A}) \times \nabla V_0(\vec{r})}{4m_0^2 c^2} + V(\vec{r}) - \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (1.17)$$

En (1.17) sólo se incluye la contribución del potencial cristalino $V_0(\vec{r})$ en la interacción EO de Pauli. Expandiendo la función de onda en términos de las funciones de Bloch del borde de la banda se obtiene

$$\psi(\vec{r}) = \sum_{\nu'} f_{\nu'} u_{\nu'0}(\vec{r}) \quad (1.18)$$

Los coeficientes f_{ν} modulan las funciones de Bloch $u_{\nu 0}(\vec{r})$ y por lo tanto se llaman funciones envolventes. Debido a la anisotropía del semiconductor no se puede suponer que la función envolvente es una onda plana. La figura 1.6 muestra un esquema cualitativo de la función envolvente.

En notación de Dirac se tiene

$$|\psi\rangle = \sum_{\nu'} f_{\nu'} |\nu'\rangle. \quad (1.19)$$

Sustituyendo la expansión (1.18) en (1.17), multiplicando por la izquierda por $\langle\nu|$ y considerando que los potenciales $V(\vec{r})$, $\vec{A}(\vec{r})$ y la función envolvente varían poco dentro de una celda unitaria, se obtiene el hamiltoniano de la función envolvente

$$\sum_{\nu'} \left[\left(E_{\nu'}(0) + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right) \delta_{\nu,\nu'} + \Delta_{\nu,\nu'} - \frac{e\hbar}{2m_0} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} \delta_{\nu,\nu'} + \frac{\vec{\Pi} \cdot \vec{P}_{\nu,\nu'}}{m_0} \right] f_{\nu'} = E f_{\nu'}, \quad (1.20)$$

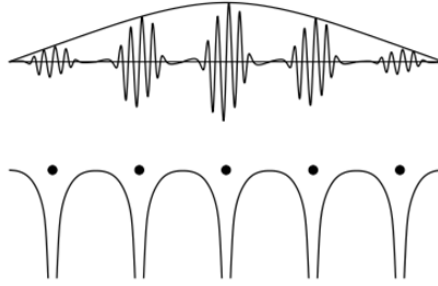


Figura 1.6: Comportamiento de la función de onda bajo la aproximación de la función envolvente. Abajo: se muestran los potenciales periódicos. Arriba: se muestra la función oscilante de Bloch siendo modulada por la función envolvente [5].

donde

$$\vec{P}_{\nu,\nu'} = \langle \nu | \vec{\Pi} | \nu' \rangle,$$

$$\Delta_{\nu,\nu'} = \langle \nu | \left(\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \vec{\Pi} \cdot \vec{\sigma} \times (\nabla V_0) \right) | \nu' \rangle.$$

El hamiltoniano de la función envolvente contiene toda la información del cristal y los campos. Éste se puede obtener a partir del hamiltoniano k-p (1.7) haciendo $\hbar\vec{k} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla} - e\vec{A} = \vec{\Pi}$ y agregando el potencial $V(\vec{r})$ y el término Zeeman en la diagonal. En principio, la suma en (1.20) corre sobre todas las bandas. Por lo tanto, es imposible encontrar el espectro del hamiltoniano de manera exacta; para ello se tendrían que resolver un número infinito de ecuaciones diferenciales acopladas. Al igual que en el caso isotrópico, se obtiene una buena aproximación para las bandas de un semiconductor de brecha directa considerando sólo acoplamientos k-p entre el primer conjunto de bandas de conducción y el último conjunto de bandas de valencia, esto es, considerar como antes el modelo de Kane.

1.3.1. Aproximación de función envolvente en heterouniones

En la mayoría de las heterouniones semiconductoras, como $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As-GaAs}$, se puede aplicar el método de la AFE ya que la diferencia entre las constantes de red es pequeña [6]. Para un electrón o un hueco, la junta representa un pequeño cambio del

potencial cristalino. Las simetrías de las funciones base $u_{\nu 0}(\vec{r})$ se mantienen. El cambio importante viene dado por la energía asociada a dichas funciones. La transición entre las interfaces se toma en cuenta usando una función $h(z)$ que vincula a las funciones base. Por ejemplo, para la heterounión $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}-\text{GaAs}$ con la interfaz en $z = 0$ se tiene

$$\psi = \sum_{\nu'} f_{\nu'} [u_{\nu'0}^{\text{GaAs}} (1 - h(z)) + u_{\nu'0}^{\text{AlGaAs}} h(z)].$$

Si la función de onda penetra suficientemente a ambos semiconductores, los efectos granulares de la función $h(z)$ se pueden despreciar. La transición abrupta se describe con una función escalón unitario $h(z) = H(-z)$, donde,

$$H(z) = \begin{cases} 1 & z \geq 0, \\ 0 & z < 0. \end{cases}$$

Por consiguiente, las energías del borde de las bandas dependientes de la posición a lo largo de la heteroestructura son

$$E_{c/v}(z) = [E_{c/v}^{\text{GaAs}} + \delta_{c/v} H(-z)]$$

donde $\delta_{c/v} = E_{c/v}^{\text{GaAsAl}} - E_{c/v}^{\text{GaAs}}$.

La energía del borde de la banda de conducción de la heteroestructura GaAs-n - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - GaAs se esquematiza en la figura 1.4. El gas de electrones se encuentra en la heterounión $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - GaAs por lo que sólo es necesario considerar la energía del borde de las bandas a lo largo de dicha heterounión. La figura 1.7 esquematiza la energía del borde de las bandas de conducción y de valencia en la heterounión.

Bajo el modelo de Kane, se usa una base reducida de ocho funciones. Dos para el primer conjunto de bandas de conducción tipo s y seis para el último conjunto de bandas de valencia tipo p. Se construye dicha base con la suma de momento angular total tal que (1.10) sea diagonal. Los elementos de la base se muestran en la tabla 1.1. El hamiltoniano resultante es 1.11 con la substitución $\hbar\vec{k} \rightarrow \vec{\Pi}$ y el potencial $V(z)$

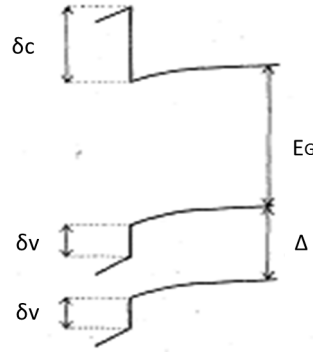


Figura 1.7: Bordes de banda de la heteruni3n AlGaAs-GaAs (adaptado de [6]).

y el t3rmino Zeeman agregados a la diagonal. En este caso, se considera un campo magn3tico $\vec{B} = B_z \hat{k}$ normal a la interfaz. El potencial $V(z)$ engloba a (1.1), (1.2) y (1.3). Definiendo el cero de energ3a en la banda de conducci3n inferior ($E_c^{GaAs} = 0$) se obtienen las energ3as del borde de las bandas

$$E_c(z) = \delta_{c/v} H(-z),$$

$$E_v(z) = -E_G + \delta_v H(-z),$$

$$E_\Delta(z) = -E_G - \Delta + \delta_v H(-z).$$

En el sistema $Al_x Ga_{1-x} As$ -GaAs, la escala energ3tica relevante la dicta la brecha fundamental. Por lo tanto, en las bandas de valencia se desprecia el t3rmino Zeeman ($e\hbar B_z/2m_0$) y el t3rmino cin3tico ($\vec{\Pi}^2/2m_0$). Finalmente se obtiene

$$H_{8 \times 8} =$$

$\langle S \Pi $	$ S \Pi\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle S \Pi $	$U_c(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0}$ $-e\hbar B_z/2m_0$	$-\frac{1}{\sqrt{2}}P\Pi_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\Pi_z$	$\frac{1}{\sqrt{6}}P\Pi_-$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\Pi_z$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\Pi_-$
$\langle S \downarrow $	0	0	$-\frac{1}{\sqrt{6}}P\Pi_+$	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\Pi_z$	$\frac{1}{\sqrt{2}}P\Pi_-$	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\Pi_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}}P\Pi_z$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2} $	$U_c(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0}$ $+e\hbar B_z/2m_0$	0	0	0	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2} $	$-\frac{1}{\sqrt{2}}P\Pi_-$	0	$U_v(z)$	0	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2} $	$\sqrt{\frac{2}{3}}P\Pi_z$	0	$U_v(z)$	0	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2} $	$\frac{1}{\sqrt{6}}P\Pi_+$	0	0	$U_v(z)$	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2} $	0	0	0	0	$U_v(z)$	0	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	$-\frac{1}{\sqrt{3}}P\Pi_z$	0	0	0	0	$U_\Delta(z)$	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} $	$-\sqrt{\frac{2}{3}}P\Pi_+$	0	0	0	0	0	$U_\Delta(z)$

(1.21)

En la ecuación (1.21) $U_c(z)$, $U_v(z)$ y $U_\Delta(z)$ representan los potenciales de la banda de conducción, valencia y desdoblada-en-espín, respectivamente

$$U_c(z) = E_c(z) + V(z) = \delta_c H(-z) + V(z), \quad (1.22)$$

$$U_v(z) = E_v(z) + V(z) = -E_G + \delta_v H(-z) + V(z), \quad (1.23)$$

$$U_\Delta(z) = E_v(z) - \Delta + V(z) = -E_G - \Delta + \delta_v H(-z) + V(z). \quad (1.24)$$

Tomando en cuenta estos resultados podemos reescribir la ecuación independiente del tiempo de Schrödinger $H_{8 \times 8} \vec{f} = E \vec{f}$. Aquí \vec{f} es un vector columna de 8 componentes que representan las funciones envolventes de cada banda

$$\vec{f} = \begin{pmatrix} \vec{f}_{6c} \\ \vec{f}_{8c} \\ \vec{f}_{7c} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_{6c}^1 \\ f_{6c}^2 \\ f_{8c}^1 \\ f_{8c}^2 \\ f_{8c}^3 \\ f_{8c}^4 \\ f_{7c}^1 \\ f_{7c}^2 \end{pmatrix} \quad (1.25)$$

Usando el vector de matrices de Pauli $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ y las matrices $\vec{T} = (T_x, T_y, T_z)$ definidas como

$$T_x = \frac{1}{3\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad T_y = \frac{-i}{3\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix},$$

$$T_z = \frac{\sqrt{2}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

se consigue

$$\begin{pmatrix} \left(\begin{array}{c} U_c(z) \\ + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m_0} - E \end{array} \right) \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar B_z}{2m_0} \sigma_z & \sqrt{3} P \vec{T} \cdot \vec{\Pi} & -1/\sqrt{3} P \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \\ \sqrt{3} P \vec{T}^\dagger \cdot \vec{\Pi} & (U_v(z) - E) \mathbb{I}_{4 \times 4} & 0 \\ -1/\sqrt{3} P \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} & 0 & (U_\Delta(z) - E) \mathbb{I}_{2 \times 2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{f}_{6c} \\ \vec{f}_{8c} \\ \vec{f}_{7c} \end{pmatrix} = 0 \quad (1.26)$$

Usando el hamiltoniano anterior, se construye un hamiltoniano efectivo 2×2 para la banda de conducción \vec{f}_{6c} . De (1.26) se obtienen tres ecuaciones

$$\begin{aligned} \left[\left(U_c(z) + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m_0} - E \right) \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar B_z}{2m_0} \sigma_z \right] \vec{f}_{6c} + \left(\sqrt{3} P \vec{T} \cdot \vec{\Pi} \right) \vec{f}_{8c} - \left(1/\sqrt{3} P \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \right) \vec{f}_{7c} \\ = 0, \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\vec{f}_{8c} = \frac{-\sqrt{3} P \vec{T}^\dagger \cdot \vec{\Pi}}{(U_v(z) - E)} \vec{f}_{6c}, \quad (1.28)$$

$$\vec{f}_{7c} = \frac{1/\sqrt{3} P \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi}}{(U_\Delta(z) - E)} \vec{f}_{6c}. \quad (1.29)$$

Reemplazando (1.28) y (1.29) en (1.27) se obtiene

$$\begin{aligned} - \left[\vec{T} \cdot \vec{\Pi} \left(\frac{3P^2}{E - U_v(z)} \right) \vec{T}^\dagger \cdot \vec{\Pi} + \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \left(\frac{P^2/3}{E - U_\Delta(z)} \right) \vec{\sigma} \cdot \vec{\Pi} \right] \vec{f}_{6c} = \\ \left[\left(U_c(z) + \frac{\vec{\Pi}^2}{2m_0} - E \right) \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar B_z}{2m_0} \sigma_z \right] \vec{f}_{6c}. \end{aligned}$$

En forma matricial esto es

$$\begin{pmatrix} H_0 + H_s - E & H_{12} \\ H_{21} & H_0 - H_s - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_{6c}^1 \\ f_{6c}^2 \end{pmatrix} = 0, \quad (1.30)$$

donde

$$H_0 = U_c(z) + \vec{\Pi} \left[\frac{1}{2m_0} + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E - U_v} + \frac{1}{E - U_\Delta} \right) \right] \vec{\Pi}, \quad (1.31)$$

$$H_s = -\frac{e\hbar B_z}{2m_0} - \frac{P^2}{3} i [\Pi_x, \Pi_y] \left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right), \quad (1.32)$$

$$H_{12} = -\frac{P^2}{3} \Pi_- \Pi_z \left[\left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right) \right] - \left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right) [\Pi_z, \Pi_-], \quad (1.33)$$

$$H_{21} = H_{12}^\dagger. \quad (1.34)$$

Si se escoge un calibre tal que la componente z del vector potencial se anule ($A_z = 0$), por ejemplo el calibre de Landau, entonces $[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar B_z$, $[\Pi_x, \Pi_z] = 0$, $[\Pi_y, \Pi_z] = 0$, y $\Pi_z = -i\hbar\partial_z$. Las expresiones (1.35) y (1.36) se simplifican

$$H_s = -\frac{e\hbar B_z}{2m_0} + \frac{P^2}{3}e\hbar B_z \left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right),$$

$$H_{12} = i\hbar \frac{P^2}{3} \Pi_z \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right) \right].$$

Finalmente se reescribe el hamiltoniano de la siguiente forma

$$H_{3D} = \left(U_c(z) + \vec{\Pi} \frac{1}{2m^*(z)} \vec{\Pi} \right) \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar}{2m_0} \frac{g^*(z)}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \alpha(z) (\sigma_x \Pi_y - \sigma_y \Pi_x). \quad (1.35)$$

En la ecuación (1.35), la masa efectiva $m^*(z)$, el factor giromagnético efectivo $g^*(z)$ y el parámetro $\alpha(z)$ viene dados por

$$\frac{1}{2m^*(z)} = \frac{1}{2m_0} + \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E - U_v} + \frac{1}{E - U_\Delta} \right), \quad (1.36)$$

$$g^*(z) = 2 - \frac{4m_0 P^2}{3} \left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right), \quad (1.37)$$

$$\alpha(z) = \frac{\hbar P^2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[\left(\frac{1}{E - U_v} - \frac{1}{E - U_\Delta} \right) \right]. \quad (1.38)$$

El último término en (1.35) es el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba. Debido a la derivada, el término sólo es relevante cuando se tiene asimetría en el potencial de confinamiento (ver sección 1.1.3).

El hamiltoniano (1.35) depende de la energía y tiene dependencias de z en el denominador. Por lo tanto, el cálculo de sus autovalores necesita técnicas autoconsistentes. Para simplificar el hamiltoniano se nota que en semiconductores como GaAs y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, las brechas E_G y $E_G + \Delta$ son suficientemente mayores que el resto de los términos en los denominadores (1.36), (1.37), (1.38) tal que se pueden desarrollar [5]

$$\frac{1}{E - U_v} \approx \left(\frac{1}{E_G} \right) \left(1 - \frac{E - V(z) - \delta_v H(-z)}{E_G} + \dots \right), \quad (1.39)$$

$$\frac{1}{E - U_\Delta} \approx \left(\frac{1}{E_G + \Delta} \right) \left(1 - \frac{E - V(z) - \delta_v H(-z)}{E_G + \Delta} + \dots \right). \quad (1.40)$$

Así, es posible reducir el hamiltoniano efectivo de los electrones en la banda de conducción de la heterounión a un hamiltoniano efectivo para el GE2D. Para lograr esto se observa que los electrones tienen invariancia de traslación en el plano de la heterounión. Por lo tanto, la función envolvente se descompone en una onda plana para los grados de libertad x e y y un espinor arbitrario para el grado de libertad z

$$\vec{f}_{6c} = e^{i(k_x x + k_y y)} \Phi_n(z).$$

En primer orden de aproximación se desprecian los términos Zeeman y Rashba para calcular las autofunciones $\Phi_n(z)$. De (1.35) se obtiene

$$\left(\vec{\Pi} \frac{1}{2m^*(z)} \vec{\Pi} + U_c(z) \right) \Phi_n(z) = E_n(z) \Phi_n(z).$$

Si el potencial de confinamiento es suficientemente fuerte, tal que $E_1 - E_0 \gg \hbar^2 k_f^2 / 2m^*$, todos los electrones se encuentran en la banda más baja E_0 (ver sección 1.1.3). El hamiltoniano efectivo de los electrones en el GE2D se obtiene evaluando el hamiltoniano 3D en las autofunciones $\Phi_0(z)$ [15]

$$H_{2D} = \langle \Phi_0 | H_{3D} | \Phi_0 \rangle,$$

obteniendo así

$$H_{2D} = \left(\frac{\Pi_x^2 + \Pi_y^2}{2m^*} + E_0 \right) \mathbb{I}_{2 \times 2} - \frac{e\hbar}{2m_0} \frac{g^*}{2} \vec{\sigma} \cdot \vec{B} + \alpha (\sigma_x \Pi_y - \sigma_y \Pi_x). \quad (1.41)$$

En el hamiltoniano (1.41), la masa efectiva m^* , el factor giromagnético efectivo g^* y el parámetro α vienen dados respectivamente por

$$m^* = \langle \Phi_0 | m^*(z) | \Phi_0 \rangle,$$

$$g^* = \langle \Phi_0 | g^*(z) | \Phi_0 \rangle,$$

$$\alpha = \langle \Phi_0 | \alpha(z) | \Phi_0 \rangle.$$

El parámetro Rashba es explícitamente

$$\alpha = \frac{\hbar P^2}{3} \left(\frac{1}{E_G^2} - \frac{1}{(E_G + \Delta)^2} \right) \langle \Phi_0 | \frac{\partial}{\partial z} [V(z) + \delta_v H(-z)] | \Phi_0 \rangle.$$

Cabe notar que después de hacer la aproximación (1.39) y (1.40), se debe definir una nueva función de onda,

$$\Psi \equiv \left(1 + \frac{P^2}{6} \left(\frac{(2\vec{\Pi}^2 + e\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{B})}{E_G^2} + \frac{(\vec{\Pi}^2 - e\hbar\vec{\sigma} \cdot \vec{B})}{(E_G + \Delta)^2} \right) \right) \vec{f}_{6c},$$

para mantener la normalización de (1.25) [5]. Sin embargo, el paso sólo es importante para deducir términos de orden superior.

CAPÍTULO 2

EFEECTO AHARONOV-BOHM Y AHARONOV-CASHER

La geometría del gas de electrones bidimensional que se estudia en el presente trabajo es no-simplemente-conexa lo cual da origen a efectos topológicos interesantes que se manifiestan en entidades físicas como corrientes de carga y espín. En el presente capítulo se estudian dos efectos topológicos asociados a campos de calibre: El efecto Aharonov-Bohm (AB) y Aharonov-Casher (AC). El capítulo empieza con un breve repaso de transformaciones de calibre en electrodinámica clásica y se describe cómo se manifiestan estas en la mecánica cuántica (sección 2.1), en la sección 2.2.1 y 2.2.2 se tratan los efectos AB y AC respectivamente.

2.1. Transformaciones de calibre

En electrodinámica, el interés de estudiar los potenciales electromagnéticos es poder describir matemáticamente cómo las fuentes (ρ y \vec{J}) generan los campos electromagnéticos [16]. En otras palabras, se busca una solución general de las ecuaciones de Maxwell en el vacío

$$\begin{array}{l} \text{Ley de Gauss} \\ \text{para el campo eléctrico} \end{array} \quad \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad , \quad (2.1)$$

$$\begin{array}{l} \text{Ley de Gauss} \\ \text{para el campo magnético} \end{array} \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0, \quad (2.2)$$

$$\text{Ley de Faraday} \quad \nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\text{Ley de Ampère – Maxwell} \quad \nabla \times \vec{B} = \mu_0 \vec{J} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \quad (2.4)$$

donde $\rho(\vec{r}, t)$ es la densidad de carga total, $\vec{J}(\vec{r}, t)$ la densidad de corriente total, $\vec{E}(\vec{r}, t)$ es el campo eléctrico, $\vec{B}(\vec{r}, t)$ el campo magnético, ε_0 la permitividad eléctrica del espacio vacío y μ_0 la permeabilidad magnética del espacio vacío. Según (2.2), el campo magnético no tiene divergencia. De esto se concluye que el campo magnético se puede escribir como el rotor de un potencial vector

$$\vec{B} = \nabla \times \vec{A}. \quad (2.5)$$

Introduciendo (2.5) en (2.3) se obtiene

$$\nabla \times \left(\vec{E} + \frac{\partial \vec{A}}{\partial t} \right) = 0.$$

El rotor de un gradiente siempre es cero por lo que el término en paréntesis se puede expresar como el gradiente de un potencial escalar $-\nabla\phi$. Con esto, el campo eléctrico se puede expresar en términos de los potenciales

$$\vec{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}. \quad (2.6)$$

Substituyendo (2.5) y (2.6) en (2.1) y (2.4), se pueden reducir las cuatro ecuaciones de Maxwell a dos ecuaciones en términos de los potenciales

$$\begin{aligned} \nabla^2 \phi + \frac{\partial}{\partial t} (\nabla \cdot \vec{A}) &= -\frac{\rho}{\varepsilon_0}, \\ \left(\nabla^2 \vec{A} - \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{A}}{\partial t^2} \right) - \nabla \left(\nabla \cdot \vec{A} + \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \phi}{\partial t} \right) &= -\mu_0 \vec{J}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Las ecuaciones (2.5) y (2.6) no definen de forma única a los potenciales electromagnéticos, ellos están definidos salvo las llamadas transformaciones de calibre, las cuales

mantienen invariantes a los campos electromagnéticos, que son los que contienen la información físicamente relevante.

$$\begin{aligned}\vec{A} &\rightarrow \vec{A} + \nabla\Lambda, \\ \phi &\rightarrow \phi - \frac{\partial\Lambda}{\partial t}.\end{aligned}\tag{2.8}$$

En electrodinámica, las transformaciones de calibre se pueden usar para ajustar la divergencia del potencial vector y poder simplificar (2.7). Dos de los calibres usados con mayor frecuencia son el calibre de Coulomb y el calibre de Lorentz. Para una revisión sobre la historia de calibres y su importancia en la física ver [17].

En mecánica cuántica la simetría de calibre se manifiesta como una simetría local que conlleva a efectos físicos interesantes. Procedemos a estudiar cómo integrar las transformaciones de calibres en la mecánica cuántica.

El hamiltoniano que describe a una partícula con carga $e = -|e|$ y masa m en presencia de potenciales electromagnéticos es

$$H = \frac{1}{2m} (\vec{p} - e\vec{A})^2 + e\phi.\tag{2.9}$$

Al igual que los campos electromagnéticos, los observables físicos permanecen invariantes ante transformaciones de calibre. Como requisito adicional, se exige que la norma de la función de onda se preserve; para lograr esto, se construye una transformación que relaciona a las funciones de onda asociadas a dos calibres distintos. Usando (2.9) se escribe explícitamente la ecuación de Schrödinger

$$\left(\frac{(\vec{p} - e\vec{A})^2}{2m} + e\phi \right) \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial\psi(\vec{r}, t)}{\partial t}.\tag{2.10}$$

Al cambiar el calibre según (2.8), se obtiene

$$\left(\frac{(\vec{p} - e\vec{A} - e\nabla\Lambda)^2}{2m} + e\phi - e\frac{\partial\Lambda}{\partial t} \right) \psi'(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial\psi'(\vec{r}, t)}{\partial t}.\tag{2.11}$$

Las ecuaciones (2.10) y (2.11) resultan equivalentes si se toma $\psi' = e^{i\frac{e\Lambda}{\hbar}}\psi$. Para verificar esto, se requiere tomar en cuenta la acción adecuada del operador momento ($e^{-i\frac{e\Lambda}{\hbar}}\vec{p}e^{i\frac{e\Lambda}{\hbar}} = \vec{p} + e\nabla\Lambda$) y aplicarlo dos veces para demostrar

$$e^{-i\frac{e\Lambda}{\hbar}}\left(\vec{p} - e\vec{A} - e\nabla\Lambda\right)^2 e^{i\frac{e\Lambda}{\hbar}} = \left(\vec{p} - e\vec{A}\right)^2.$$

Es necesario notar que el valor medio de momento canónico \vec{p} (el generador de las traslaciones) depende del calibre y por lo tanto no es un observable. En contraste, el valor medio del momento cinético $m\vec{v} = \vec{p} - e\vec{A} = \vec{\Pi}$ sí es invariante de calibre. El momento cinético es el observable físico que traza las trayectorias de las partículas [18].

Cuando Λ es asociado a una transformación de calibre de los potenciales electromagnéticos $A^\mu = (\phi, \vec{A})$ o campo de calibre $U(1)_{EM}$, las transformaciones forman un grupo unitario de grado uno (grupo del círculo). También existen transformaciones de calibre más complejas [19]. Si se asocia Λ con un potencial vector tipo $a^\mu = (-\vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \vec{\sigma} \times \vec{E}/2)$ o campo de calibre $SU(2)_{\text{espin}}$ [20], entonces las transformaciones de calibre forman un grupo especial unitario de grado dos. En dicho caso Λ es una matriz y se requiere especial cuidado con las conmutaciones.

La simetría de fase local $\psi \rightarrow e^{i\frac{e\Lambda}{\hbar}}\psi$ tiene gran importancia en la mecánica cuántica. En las próximas dos secciones se estudiarán efectos de dicha simetría.

2.2. Fases topológicas

En la mecánica cuántica, los efectos topológicos se manifiestan como fases relativas que adquieren las funciones de ondas que describen a partículas moviéndose en una región múltiplemente conexa y libre de fuerzas. En la presente sección se estudiarán dos efectos importantes asociados a fases topológicas: el efecto Aharonov-Bohm (AB) y el efecto Aharonov-Casher (sección AC). El primer efecto se manifiesta sobre partículas cargadas moviéndose en una trayectoria libre de campo y que a su vez encierra a un

flujo magnético constante. El segundo efecto se manifiesta sobre partículas neutras con momento magnético cuando éstas se mueven en presencia de un campo eléctrico constante.

Según la mecánica clásica, el efecto de un campo electromagnético sobre una partícula con carga q y velocidad \vec{v} lo describe la fuerza de Lorentz: $\vec{F} = q(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E})$. Por consiguiente, la mecánica clásica no predice efecto alguno para las situaciones descritas anteriormente. En el primer caso porque los campos son nulos, mientras que en el segundo porque la partícula es neutra. La mecánica cuántica predice que ambas situaciones originan fases topológicas.

2.2.1. Efecto Aharonov-Bohm

En 1959 Yakir Aharonov y David Bohm [21] describieron un interesante efecto cuántico causado por el potencial vector sobre partículas cargadas. En mecánica clásica el potencial escalar y el potencial vector fueron introducidos como ayuda matemática para calcular los campos (ver sección 2.1). A pesar de que la formulación canónica está escrita en términos de los potenciales, las ecuaciones de movimiento siempre se pueden escribir en términos de los campos, en mecánica cuántica este no es el caso, el formalismo canónico es requerido. Sin embargo, se obtiene que los potenciales no son invariantes de calibre, lo cual parece indicar que no tuvieran significado físico. En su publicación, Aharonov y Bohm concluyeron que esto no es necesariamente cierto y que una mejor interpretación era necesaria. Procedemos a explicar el efecto usando el experimento de interferencia de Young siguiendo la línea general de [7].

En el experimento original de doble rendija, se iluminan dos rendijas muy pequeñas con ondas planas. La luz es refractada por cada rendija y la superposición de los nuevos frentes de ondas resulta en un patrón de interferencia. Cuando se repite el experimento substituyendo a los fotones por electrones, se observa un patrón de interferencia similar. Esto es evidencia de la naturaleza cuántica de los electrones.

La interferencia depende de la diferencia de fase entre las ondas asociadas a los caminos tomados por los electrones. Esto es, si al camino uno se le asocia $\psi_1 = C_1 e^{i\Phi_1}$ y al camino dos $\psi_2 = C_2 e^{i\Phi_2}$, entonces la diferencia de fase $\delta = \Phi_1 - \Phi_2$ determina el patrón de interferencia. Al electrón se le asocia la longitud de onda De Broglie $\lambda = h/p$. Si la separación entre las rendijas es d y la distancia entre las rendijas y la pantalla es L , entonces la diferencia de fase entre las funciones de ondas asociadas a los caminos 1 y 2 mostrados en la figura 2.1 es: $\delta = 2\pi a/\lambda$, donde a es la diferencia en longitud entre los dos caminos. Por simplicidad se supone que el detector se encuentra a una distancia $x \ll L$ medida desde el eje de simetría. Esto implica $a = xd/L$ y $\delta = 2\pi xd/\lambda L$. Cuando la diferencia de camino es $\delta = 2n\pi$, con n entero, las ondas se encuentran en fase y se tiene interferencia constructiva. En contraste, cuando la diferencia de camino es $\delta = (2n + 1)\pi$ las ondas se encuentran fuera de fase e interfieren de manera destructiva.

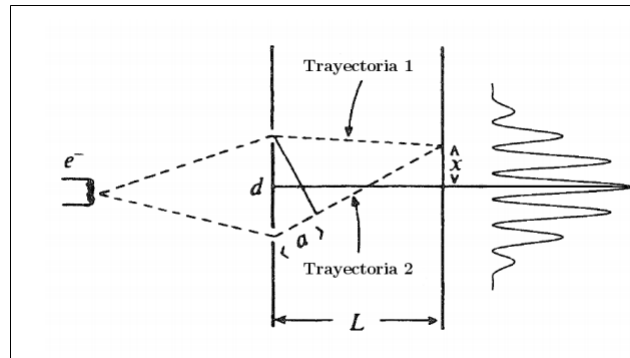


Figura 2.1: Esquema del experimento de doble rendija con electrones. Adaptado de [4]

El paso siguiente será añadir al experimento anterior un solenoide ideal muy delgado de radio r_c colocado de tal manera que los electrones no pasen por la región del campo magnético.

Un solenoide ideal con eje paralelo al eje z tiene un campo magnético uniforme

en la región interior al solenoide y campo cero en la exterior

$$\vec{B} = \begin{cases} B_o \hat{z} & r < r_c \\ 0 & r > r_c \end{cases} .$$

Usando el teorema de Stokes se encuentra $\oint \vec{A} \cdot d\vec{l} = \int (\nabla \times \vec{A}) \cdot \vec{n} dA = \int \vec{B} \cdot \vec{n} dA = \Phi$, donde Φ es el flujo magnético. Por simetría se deduce que el vector potencial tiene dependencia radial y dirección acimutal $\vec{A} = \Phi \hat{\phi} / 2\pi r$. Después de calcular el flujo encerrado, se encuentra (ver figura 2.2)

$$\vec{A} = \begin{cases} \frac{B_o r}{2} \hat{\phi} & r < r_c \\ \frac{B_o r_c^2}{2r} \hat{\phi} = \frac{\Phi}{2\pi r} \hat{\phi} & r > r_c \end{cases} . \quad (2.12)$$

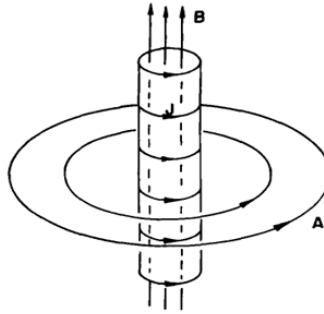


Figura 2.2: Campo magnético y potencial vector de un solenoide infinito [7]

La función de onda del problema sin el solenoide se conoce bien, genera el patrón de interferencia de la figura 2.1, mientras que la función de onda del problema con el solenoide es solución de la ecuación de Schrödinger del problema sin el solenoide pero con un calibre que introduce el potencial vector, de manera que ambos problemas tienen el mismo campo magnético en la región fuera del solenoide. Como se discutió en la sección anterior, la transformación adecuada que elimina el campo de calibre es una transformación unitaria que tiene la información de la fase que adquiere el electrón $\psi(\vec{r}, t) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar} \Lambda(\vec{r}, t)} \psi(\vec{r}, t)$. Para aplicar dicha transformación se nota que $\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = 0$

implica $\vec{A} = \nabla\Lambda$. Usando el teorema del gradiente

$$\int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A} \cdot \vec{dl} = \Lambda(\vec{r}) - \Lambda(\vec{r}_0),$$

y definiendo un sistema de coordenadas tal que $\Lambda(\vec{r}_0) = 0$, se obtiene

$$\psi(\vec{r}, t) \rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{A} \cdot \vec{dl}} \psi(\vec{r}, t).$$

Aplicando la transformación sobre las funciones de onda asociadas con cada camino se tiene

$$\begin{aligned} \psi_1 &\rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \vec{A} \cdot \vec{dl}} \psi_1, \\ \psi_2 &\rightarrow e^{\frac{ie}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_2} \vec{A} \cdot \vec{dl}} \psi_2. \end{aligned}$$

Finalmente, la superposición de las funciones de ondas es

$$\psi_t = \psi_1 + \psi_2 \rightarrow \left(\psi_1 + e^{\frac{ie}{\hbar} \Phi} \psi_2 \right) e^{\frac{ie}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}_1} \vec{A} \cdot \vec{dl}}.$$

El flujo magnético causa una fase relativa $\Delta\delta = e\Phi/\hbar$ entre las funciones de ondas. Dicha fase se conoce como fase AB Φ_{AB} . La fase resulta en un corrimiento $x_0 = L\lambda e\Phi/hd$ periódico en flujo del patrón de interferencia (ver figura 2.3). El período de dicha modulación, $\Phi_0 = \frac{2\pi\hbar}{e} = 4,1 \times 10^{-15} Wb$, se conoce como flujo cuántico fundamental y es una característica importante del efecto AB. La fase AB sólo depende de la conectividad, por lo tanto es topológica.

El efecto AB conduce a pensar que el vector potencial es la entidad fundamental (en vez del campo magnético), sin embargo, el corrimiento depende del flujo magnético y este se escribe en términos del campo. En 1961 Chambers verificó el efecto usando filamentos finos hechos de cristales de hierro magnetizados que actúan como solenoides [22].

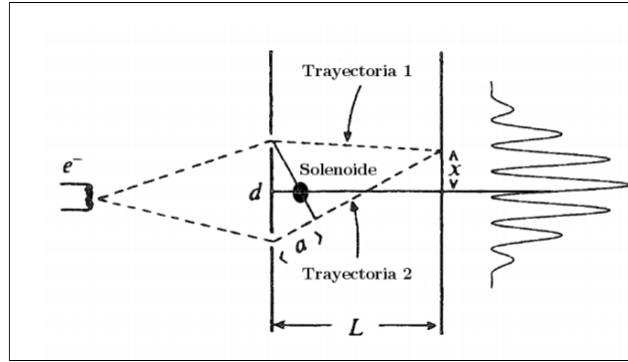


Figura 2.3: Experimento de doble rendija con un solenoide pequeño cuyo campo magnético no interactúa con los electrones. Se observa un corrimiento en el patrón de interferencia. Adaptado de [4]

2.2.2. Efecto Aharonov-Casher

En 1984, Aharonov y Casher [23] encontraron un efecto topológico de espín análogo al AB. Se considera a una partícula neutra de espín $1/2$ cuya trayectoria encierra a una línea infinita de carga uniforme (ver figura 2.4), clásicamente se espera que el campo eléctrico producido por la línea de carga no afecte a la partícula. Para entender

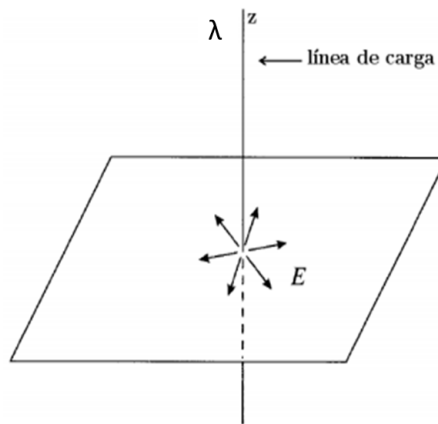


Figura 2.4: Campo eléctrico producido por una línea infinita de carga.

qué pasa desde el punto de vista de la mecánica cuántica, se parte del hamiltoniano que describe al sistema. Tomando el límite no relativista de la ecuación de Dirac [23]

para una partícula neutra se encuentra

$$H = \frac{(\vec{p} + \vec{\mu} \times \vec{E})^2}{2m} - \frac{\vec{\mu}^2 \vec{E}^2}{2m}, \quad (2.13)$$

donde $\vec{\mu} = \mu \vec{\sigma}$ y $\vec{\sigma}$ son las matrices de Pauli. El término $\vec{\mu} \times \vec{E}$ es un campo de calibre $SU(2)_{\text{espin}}$. El segundo factor resulta en un corrimiento de la energía y generalmente se puede despreciar. En el plano, el campo eléctrico producido por la línea de carga es

$$\vec{E} = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon_0} \frac{\hat{r}}{r}.$$

Con esto

$$\vec{\mu} \times \vec{E} = \frac{\lambda\mu_z}{2\pi r\epsilon_0} \hat{\phi},$$

donde μ_z es la componente del momento magnético a lo largo de la línea de carga. Similar al caso AB, se puede aplicar una transformación que elimine el campo de calibre. En este caso, la transformación es [20]

$$\psi(\vec{r}, t) = P e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\vec{r}_0}^{\vec{r}} \vec{\mu} \times \vec{E} \cdot d\vec{l}} \psi'(\vec{r}, t),$$

donde P es el operador de ordenamiento de camino. Si la partícula se mueve en una trayectoria cerrada perpendicular a la línea de carga y encerrando a ésta, la función de onda adquiere una fase relativa

$$\Phi_{AC} = \frac{1}{\hbar} \oint \vec{\mu} \times \vec{E} \cdot d\vec{l} = \frac{\lambda\mu_z}{\hbar\epsilon_0} n_{AC},$$

donde n_{AC} es el número de veces que la partícula encierra a la línea de carga. El efecto AC sólo depende de la conectividad, por lo tanto es topológico. En 1989, Cimmino et al. verificaron el efecto usando un interferómetro de neutrones [24].

Finalmente señalamos que la interacción espín-órbita estudiada en la sección anterior tiene la misma forma que el término $SU(2)_{\text{espin}}$ de (2.13). De hecho, la interacción espín-órbita también es un campo de calibre. La función de onda de un electrón con interacción espín-órbita que se mueve en una trayectoria cerrada también tiene una fase AC asociada a ella (ver capítulo 3). Sin embargo existe una diferencia fundamental entre el efecto AB y AC, el campo de calibre $SU(2)$ depende de un campo físico \vec{E} mientras que el campo de calibre $U(1)$ de AB no.

CAPÍTULO 3

ANILLO SEMICONDUCTOR ACOPLADO A UN RESERVORIO DE ELECTRONES

En el presente capítulo se adapta el modelo de Büttiker para introducir decoherencia en un anillo semiconductor con interacción EO tipo Rashba y flujo magnético en configuración Aharonov-Bohm.

3.1. Autovalores y autofunciones del hamiltoniano

Se considera a un GE2D con geometría polar. Los electrones tienen acoplamiento EO tipo Rashba y un campo magnético en el eje z en configuración AB. En el capítulo 1, se encontró que la expresión del potencial Rashba tiene forma

$$\tilde{V}_{\text{Rashba}} = \alpha (\sigma_x \Pi_y - \sigma_y \Pi_x). \quad (3.1)$$

La interacción se debe a una asimetría en el potencial de confinamiento del GE2D conocida en la literatura como Asimetría de Inversión Estructural (AIE). El parámetro α , conocido como parámetro Rashba, modula la interacción y se puede ajustar mediante una compuerta de voltaje [25].

CAPÍTULO 3: ANILLO SEMICONDUCTOR ACOPLADO A UN RESERVORIO DE ELECTRONES

Para transformar el potencial de Rashba de coordenadas cartesianas a polares, no basta sólo con la transformación $(x, y) \rightarrow (\rho, \varphi)$, ya que esta no preserva la hermiticidad de (3.1). Berche et al. [26] argumentan que el cambio de coordenadas en el término (3.1) debe venir acompañado de una rotación a la base espinorial $|F'\rangle = \exp[i\sigma_z\varphi/2]|F\rangle$. En la base rotada, el potencial toma la forma

$$V_{\text{Rashba}} = \exp[i\sigma_z\varphi/2]\tilde{V}_{\text{Rashba}}\exp[-i\sigma_z\varphi/2] = -\hbar\omega_{SO}\sigma_\rho\left(i\partial_\varphi + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) - i\frac{\hbar\omega_{SO}}{2}\sigma_\varphi, \quad (3.2)$$

donde $\omega_{SO} = \alpha\hbar/a$, siendo a el radio del anillo. Se ha utilizado el flujo cuántico fundamental $\Phi_0 = 2\pi\hbar/e$ para escribir el potencial. En (3.2) se usaron las matrices de Pauli polares $\sigma_\rho = \sigma_x \cos \varphi + \sigma_y \sin \varphi$ y $\sigma_\varphi = -\sigma_x \sin \varphi + \sigma_y \cos \varphi$. El potencial resultante es hermítico bajo condiciones de borde periódicas. Agregando el potencial antes mencionado al operador energía cinética, se obtiene el hamiltoniano de un electrón en el anillo

$$H = \hbar\Omega\left(i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2 - \hbar\omega_{SO}\sigma_\rho\left(i\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) - i\frac{\hbar\omega_{SO}}{2}\sigma_\varphi \quad (3.3)$$

donde $\Omega = \hbar/2ma^2$.

Para que en el hamiltoniano queden explícitamente las dependencias de los campos de calibre, lo escribiremos de la siguiente forma

$$H = \hbar\Omega\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\Phi}{\Phi_0} + \frac{\omega_{SO}}{2\Omega}\sigma_\rho\right)^2. \quad (3.4)$$

En la expresión anterior se ha omitido la constante aditiva $-\hbar\omega_{SO}^2/4\Omega$. Ésta se puede reintroducir luego haciendo el cambio $E \rightarrow E + \hbar\omega_{SO}^2/4\Omega$. Se puede verificar que (3.4) es equivalente a (3.3) aplicando el hamiltoniano sobre un espinor arbitrario ψ . Cabe mencionar que se debe tener cuidado con la conmutación entre el operador derivada y las matrices de Pauli polares [26].

El término Φ/Φ_0 es un campo de calibre $U(1)_{EM}$ mientras que $\omega_{SO}(2\Omega)^{-1}\sigma_\rho$ es un campo de calibre $SU(2)_{\text{espin}}$. Ambas simetrías de calibre fueron tratadas brevemente en el capítulo 2. Se reflejan en el sistema como fases relativas que adquieren las funciones de onda al completar una trayectoria cerrada.

La ecuación de autovalores para el hamiltoniano anterior, resulta

$$\left(-i\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\Phi}{\Phi_0} + \frac{\omega_{SO}}{2\Omega}\sigma_\rho\right)\psi = \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\psi. \quad (3.5)$$

Se propone un espinor asimétrico con dos etiquetas

$$\psi_j^\mu(\varphi) = e^{in_j^\mu\varphi}\chi^\mu(\varphi) = e^{in_j^\mu\varphi} \begin{pmatrix} A^\mu \\ e^{i\varphi}B^\mu \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

donde j identifica la dirección de propagación de la onda ($j = 1$, en sentido anti horario y $j = 2$, en sentido horario) y μ distingue entre autovalores. Como en [27], denominamos μ polarización de espín. Substituyendo (3.6) en (3.5), se obtiene

$$\begin{pmatrix} n_j^\mu - \frac{\Phi}{\Phi_0} - \sqrt{\frac{E_{n_j^\mu}}{\hbar\Omega}} & \frac{\omega_{SO}}{2\Omega}e^{-i\varphi} \\ \frac{\omega_{SO}}{2\Omega}e^{i\varphi} & (n_j^\mu + 1) - \frac{\Phi}{\Phi_0} - \sqrt{\frac{E_{n_j^\mu}}{\hbar\Omega}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{in_j^\mu\varphi}A^\mu \\ e^{i(n_j^\mu+1)\varphi}B^\mu \end{pmatrix} = 0, \quad (3.7)$$

Los autovalores $\sqrt{E_{n_j^\mu}/\hbar\Omega}$ se encuentran resolviendo la ecuación secular, así

$$E_{n_j^\mu} = \hbar\Omega \left(n_j^\mu - \frac{\Phi_{AB}}{2\pi} - \frac{1}{2\pi}\Phi_{AC}^{(\mu)} \right)^2. \quad (3.8)$$

Al introducir los autovalores (3.8) en (3.7), se obtienen las autofunciones

$$\frac{\Omega}{\omega_{SO}} \left(1 + (-1)^\mu \frac{1}{\cos\theta} \right) A^\mu = B^\mu,$$

donde $\cos\theta = 1/\sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2}$. Si se escoge $A^{(1)} = B^{(2)} = \cos[\theta/2]$ y $B^{(1)} = -A^{(2)} = \sin[\theta/2]$ con $\theta = 2\tan^{-1}[\Omega/\omega_{SO} - \sqrt{(\Omega/\omega_{SO})^2 + 1}]$, se obtienen espinores canónicos, normalizados y ortogonales.

Las cuatro autofunciones ψ_j^μ con sus respectivos coeficientes C_j^μ son

$$\begin{aligned} \Psi_1^1(\varphi) &= C_1^1 e^{in_1^1\varphi} \begin{pmatrix} \cos\left[\frac{\theta}{2}\right] \\ e^{i\varphi}\sin\left[\frac{\theta}{2}\right] \end{pmatrix}, & \Psi_1^2(\varphi) &= C_1^2 e^{in_1^2\varphi} \begin{pmatrix} \sin\left[\frac{\theta}{2}\right] \\ -e^{i\varphi}\cos\left[\frac{\theta}{2}\right] \end{pmatrix}, \\ \Psi_2^1(\varphi) &= C_2^1 e^{in_2^1\varphi} \begin{pmatrix} \cos\left[\frac{\theta}{2}\right] \\ e^{i\varphi}\sin\left[\frac{\theta}{2}\right] \end{pmatrix}, & \Psi_2^2(\varphi) &= C_2^2 e^{in_2^2\varphi} \begin{pmatrix} \sin\left[\frac{\theta}{2}\right] \\ -e^{i\varphi}\cos\left[\frac{\theta}{2}\right] \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Un estado electrónico en el anillo viene dado por la superposición de las autofunciones anteriores

$$\Psi(\varphi) = \Psi_1^1(\varphi) + \Psi_1^2(\varphi) + \Psi_2^1(\varphi) + \Psi_2^2(\varphi). \quad (3.10)$$

Comparando (3.9) con la expresión para el número cuántico principal

$$n_j^\mu = (-1)^j \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}} + \frac{1}{2\pi} \Phi_{AB} + \frac{1}{2\pi} \Phi_{AC}^{(\mu)}, \quad (3.11)$$

la cual se obtiene de (3.8), se puede ver que las funciones de onda con los campos de calibre difieren de las funciones de onda del hamiltoniano libre de campo sólo por $\exp[i\Phi_{AB}/2\pi] \exp[i\Phi_{AC}^{(\mu)}2\pi]$. En otras palabras, el espinor $\Psi_j^\mu(\varphi)$ adquiere la fase AB y AC cuando se encierra sobre sí misma en el anillo. Para el anillo desacoplado se tienen condiciones de borde periódicas, lo cual implica que $n_j^\mu \in \mathbb{Z}$. En este caso el espectro viene dado por

$$E_{n_j^\mu} = \hbar\Omega \left((-1)^j n - \frac{\Phi_{AB}}{2\pi} - \frac{1}{2\pi} \Phi_{AC}^{(\mu)} \right)^2 - \frac{\hbar\omega_{SO}^2}{4\Omega}.$$

En la ecuación anterior se ha reintroducido la constante aditiva $-\hbar\omega_{SO}^2/4\Omega$ omitida en (3.4) y se toma $n \in \mathbb{Z}^+$.

3.2. Modelo de decoherencia de Büttiker

Para simular interacciones decoherentes en un anillo semiconductor adaptamos el modelo de decoherencia de Büttiker creado para anillos metálicos normales sin interacción EO.

En el modelo de Büttiker [8] se introduce decoherencia en un anillo metálico acoplado éste a un reservorio de electrones vía un cable ideal que actúa como una prueba de voltaje. El anillo se encuentra penetrado por un flujo magnético en configuración AB (ver figura 3.1). El reservorio emite partículas con energías según la distribución de Fermi

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1},$$

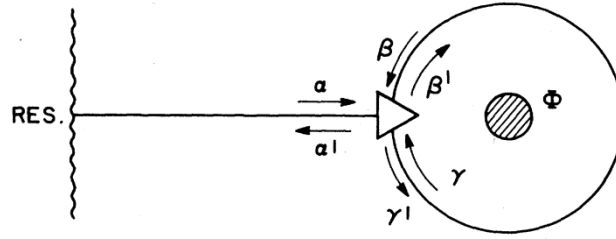


Figura 3.1: Anillo penetrado por un flujo magnético en configuración AB y acoplado a un reservorio de electrones vía un cable ideal [8]

y admite electrones de cualquier energía. En el reservorio, los electrones son dispersados inelásticamente tal que no hay relación de fase entre los electrones absorbidos y los emitidos. Los electrones emitidos viajan por el cable y entran en el anillo. Con cierta probabilidad, los electrones escapan por la junta y regresan al reservorio, por lo tanto, el acople da lugar a estados electrónicos en el anillo con tiempo de vida finita.

El acople entre el cable y el anillo se describe mediante una matriz de dispersión S que relaciona las amplitudes $\vec{\alpha}' = (\alpha', \beta', \gamma')$ de las ondas salientes con las amplitudes $\vec{\alpha} = (\alpha, \beta, \gamma)$ de las ondas entrantes, $\vec{\alpha}' = S\vec{\alpha}$. La matriz S debe ser 3x3 para tomar en cuenta los tres canales de la junta. Si se impone que la matriz sea real, que la corriente se conserve, que haya invariancia ante inversión temporal y simetría entre ambos brazos del anillo, entonces la matriz S es de la forma [28]

$$S = \begin{pmatrix} -(a+b) & \sqrt{\varepsilon} & \sqrt{\varepsilon} \\ \sqrt{\varepsilon} & a & b \\ \sqrt{\varepsilon} & b & a \end{pmatrix}, \quad (3.12)$$

donde $a = (\sqrt{1-2\varepsilon}-1)/2$, $b = (\sqrt{1-2\varepsilon}+1)/2$ y ε es el parámetro de acoplamiento con el reservorio. Dicho parámetro varía entre 0 y 1/2 tal que para $\varepsilon = 0$ el cable y el anillo se encuentran desacoplados, y para $\varepsilon = 1/2$ se tiene máximo acoplamiento.

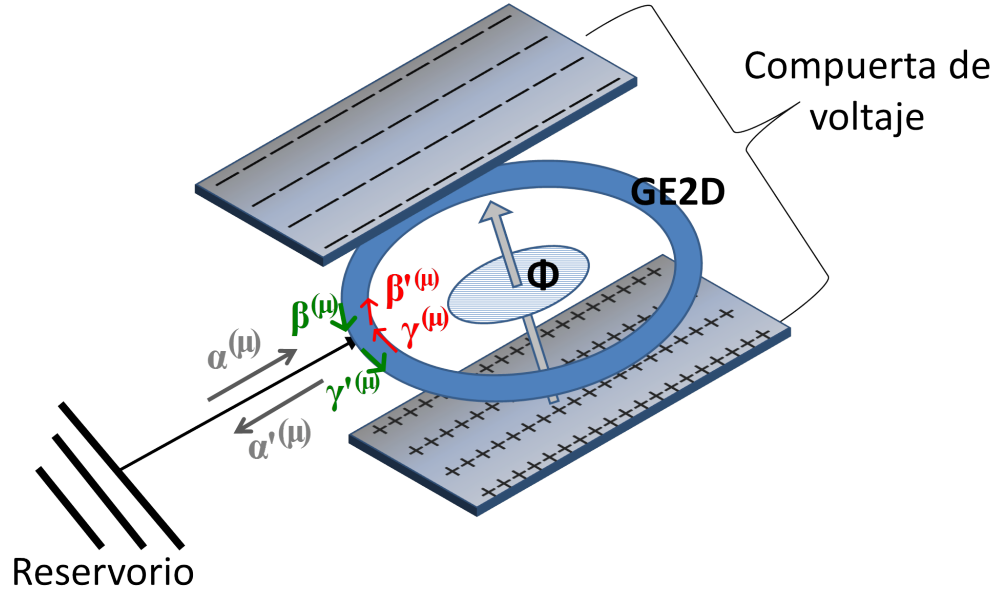


Figura 3.2: Anillo mesoscópico con interacción EO tipo Rashba fabricado de un GE2D. La interacción Rashba se modula mediante una compuerta de voltaje. El anillo se encuentra penetrado por un flujo magnético en configuración AB y acoplado a un reservorio de electrones vía un cable ideal.

3.3. Acople con el reservorio

El modelo de Büttiker está diseñado para anillos metálicos en los cuales la interacción EO del cristal es despreciable [12]. En el anillo semiconductor (ver figura 3.2), la interacción EO rompe la degeneración del espín. Por lo tanto, es necesario escribir los estados en el anillo usando espinores. Para adaptar el modelo de Büttiker al presente caso, se propone hacer un acople entre el espinor del cable y el espinor del anillo por polarización de espín (μ). Para esto, es necesario desarrollar la función de onda del cable en términos de los espinores base del anillo

$$\psi_{cable}(x) = \sum_{\mu=1,2} \phi^{(\mu)}(x) \chi^{(\mu)}(0) \quad x \in (-\infty, 0] . \quad (3.13)$$

Para partículas emitidas por el reservorio con energía $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, los coeficientes del desarrollo vienen dado por

$$\phi^{(\mu)}(x) = \sqrt{\mathcal{N}} (e^{ikx} + C_3^\mu e^{-ikx}) . \quad (3.14)$$

El factor de normalización en (3.14) se determina de la siguiente manera: En un intervalo de energía entre E y $E + dE$, la corriente inyectada por el reservorio al cable es $dI = ev(dN/dE)f(E)dE$, donde $dN/dE = 1/2\pi\hbar v$ es la densidad de estados de un anillo perfecto y $v = \hbar k/m$. La función de onda (3.14) describe la corriente incidente correcta si se toma $\mathcal{N} = f(E)dE/2\pi\hbar v$ [8].

Las función de onda en el anillo viene dado por la superposición (3.10) de las autofunciones del anillo acoplado (3.9) con energías $E = \hbar^2 k^2/2m$. El problema de dispersión se plantea entonces como $\vec{\alpha}'^{(\mu)} = S\vec{\alpha}^{(\mu)}$. Los coeficientes $\alpha^{(\mu)}$ y $\alpha'^{(\mu)}$ se determinan evaluando (3.13) en la junta, la cual tomamos como $x = 0$. Los coeficientes $\beta'^{(\mu)}$ y $\gamma'^{(\mu)}$ se determinan evaluando Ψ_2^μ de (3.9) en $\varphi = 0$ y $\varphi = 2\pi$, respectivamente. Finalmente, se determinan los coeficientes $\beta^{(\mu)}$ y $\gamma^{(\mu)}$ evaluando Ψ_1^μ de (3.9) en $\varphi = 0$ y $\varphi = 2\pi$, respectivamente. Así,

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\mathcal{N}}C_3^\mu \\ C_1^\mu \\ C_2^\mu e^{in_2^\mu 2\pi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(a+b) & \sqrt{\varepsilon} & \sqrt{\varepsilon} \\ \sqrt{\varepsilon} & a & b \\ \sqrt{\varepsilon} & b & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\mathcal{N}} \\ C_2^\mu \\ C_1^\mu e^{in_1^\mu 2\pi} \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

De (3.15) se consiguen tres ecuaciones

$$\sqrt{\mathcal{N}}C_3^\mu = -(a+b)\sqrt{\mathcal{N}} + \sqrt{\varepsilon} \left(C_2^\mu + C_1^\mu e^{in_1^\mu 2\pi} \right), \quad (3.16)$$

$$C_1^\mu = \sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mathcal{N}} + aC_2^\mu + bC_1^\mu e^{in_1^\mu 2\pi}, \quad (3.17)$$

$$C_2^\mu e^{in_2^\mu 2\pi} = \sqrt{\varepsilon}\sqrt{\mathcal{N}} + bC_2^\mu + aC_1^\mu e^{in_1^\mu 2\pi}. \quad (3.18)$$

Usando las dos últimas y haciendo uso de la relación $b - a = 1$, se halla

$$C_1^\mu = \frac{\sqrt{\varepsilon}\mathcal{N}(-1 + e^{in_2^\mu 2\pi})}{b + a^2 e^{in_1^\mu 2\pi} - b^2 e^{in_1^\mu 2\pi} + b e^{in_1^\mu 2\pi} e^{in_2^\mu 2\pi} - e^{in_2^\mu 2\pi}}, \quad (3.19)$$

$$C_2^\mu = \frac{\sqrt{\varepsilon}\mathcal{N}(1 - e^{in_1^\mu 2\pi})}{a^2 e^{in_1^\mu 2\pi} + b - e^{in_2^\mu 2\pi} - b^2 e^{in_1^\mu 2\pi} + b e^{in_1^\mu 2\pi} e^{in_2^\mu 2\pi}}. \quad (3.20)$$

Por otra parte, los módulos de los coeficientes vienen dado por

$$|C_1^\mu|^2 = \frac{2\varepsilon\mathcal{N}}{g^{(\mu)}} (1 - \cos[2\pi n_2^\mu]), \quad (3.21)$$

$$|C_2^\mu|^2 = \frac{2\varepsilon\mathcal{N}}{g^{(\mu)}} (1 - \cos [2\pi n_1^\mu]),$$

donde:

$$g^{(\mu)} = 3 + \sqrt{1 - 2\varepsilon} - 3\varepsilon - 2(1 + \sqrt{1 - 2\varepsilon} - \varepsilon) \cos [2\pi n_1^\mu] + 2\sqrt{1 - 2\varepsilon} \cos [2\pi (n_1^\mu - n_2^\mu)] - 2 \cos [2\pi n_2^\mu] + \cos [2\pi (n_1^\mu + n_2^\mu)] + (\sqrt{1 - 2\varepsilon} - \varepsilon) (-2 \cos [2\pi n_2^\mu] + \cos [2\pi (n_1^\mu + n_2^\mu)]).$$

Substituyendo (3.19) y (3.20) en (3.16) se obtiene

$$C_3^\mu = -a - b + \frac{\varepsilon (1 + e^{i2\pi n_2^\mu} (2a - 2b + e^{i2\pi n_1^\mu}))}{e^{i2\pi n_1^\mu} - a^2 e^{i2\pi n_2^\mu} + b^2 e^{i2\pi n_2^\mu} - b (1 + e^{i2\pi (n_1^\mu + n_2^\mu)})}.$$

Luego, substituyendo las expresiones para a y b y tomado el módulo del coeficiente (3.27), se verifica la condición de corriente nula: $|C_3^\mu|^2 = 1$.

3.4. Densidad de estados

La primera pregunta que surge al acoplar el anillo al reservorio es ¿cómo se modifican los estados electrónicos del anillo? Para responder esto, calculamos la densidad de estados. La densidad de estados del sistema describe el número de estados, en cada nivel de energía, que pueden ser ocupados por electrones. Ésta se define de tal forma que $N(E)\delta E$ sea el número de estados disponibles cuyas energías se encuentran en el rango E y $E + \delta E$. La densidad de partículas en el anillo por intervalo de energía entre E y $E + \delta E$ es

$$dN = |C_1^1|^2 + |C_1^2|^2 + |C_2^1|^2 + |C_2^2|^2.$$

Usando la regla de la cadena, $dN/dk = (dN/dE)(dE/dk)$, se obtiene

$$\frac{dN}{dk} = \frac{f[E]\varepsilon}{\pi} \left(\frac{\sin [2\pi n_1^1]^2 + \sin [2\pi n_2^1]^2}{g^{(1)}} + \frac{\sin [2\pi n_1^2]^2 - \sin [2\pi n_2^2]^2}{g^{(2)}} \right). \quad (3.22)$$

En ausencia de campos (3.22) se reduce a

$$\frac{dN}{dk} = \frac{2f(E)\varepsilon}{\pi \left(-1 + \varepsilon + \sqrt{1 - 2\varepsilon} \cos \left[2\pi \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}} \right] \right)}.$$

3.5. Corrientes persistentes de carga

Las corrientes persistentes de carga se manifiestan cuando se tienen perturbaciones que rompen la simetría de inversión temporal, por ejemplo, la debida a un campo magnético. Se puede obtener la corriente de carga en el anillo desacoplado directamente del espectro de energías [29]

$$I_{\text{carga}} = - \sum_{i \in \text{ocupado}} \frac{dE_i}{d\Phi}.$$

Para el anillo acoplado las energías disponibles no están bien definidas. Por lo tanto, se requiere un método alternativo para calcular las corrientes de carga. Se puede cuantizar a partir de la definición clásica de densidad de corriente de carga $\vec{j}(\vec{r}) = \rho(\vec{r})e\vec{v}$ tomando el valor de medio del operador velocidad \vec{v}

$$\vec{j} = \int_{Vol} d^3\vec{r} \psi^\dagger e \vec{v} \psi.$$

En el presente caso, los estados se encuentran definidos en intervalos de energía. Por lo tanto, se tiene que la corriente en un intervalo E y $E + \delta E$ es

$$dI_{\text{carga}} = \Psi^\dagger e v_\varphi \Psi. \quad (3.23)$$

Se observa que la expresión (3.23) tiene las unidades adecuadas de corriente (carga sobre tiempo). Así, la corriente total se obtiene sumando todas las contribuciones: $I_{\text{carga}} = \int dI_{\text{carga}}$. Debido a la interacción EO, el operador velocidad no es simplemente $v_\varphi = \Pi_\varphi/m$, por lo que se debe partir de la definición del operador velocidad para encontrar

$$v_\varphi = [H, \varphi] = 2a\Omega \left(-i\partial_\varphi - \frac{\Phi}{\Phi_0} + \frac{\omega_{SO}}{2\Omega} \sigma_\rho \right). \quad (3.24)$$

Finalmente, la corriente total viene dada por

$$\begin{aligned} I_{\text{carga}} &= \sum_{j,\mu} \int_{E=0}^{\infty} dI_j^\mu \\ &= \frac{\hbar\Omega}{\Phi_0} 2\varepsilon \sum_{\mu} \int_{E=0}^{\infty} \frac{f(E)}{g^{(\mu)}} \sqrt{\frac{\hbar\Omega}{E}} \frac{dE}{\hbar\Omega} \begin{pmatrix} 1 - \cos[2\pi n_1^\mu] \left(-\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}} + \frac{1}{2\pi} \Phi_{AC}^{(\mu)} \right) \\ - \cos[2\pi n_2^\mu] \left(\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}} + \frac{1}{2\pi} \Phi_{AC}^{(\mu)} \right) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Cuando no hay interacción EO, la expresión explicita de la corriente es

$$I_{carga} = -\frac{8\varepsilon\hbar\Omega}{\Phi_0} \int_0^\infty \frac{dE}{\hbar\Omega} f(E) g^{-1} \sin\left[2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right] \sin\left[2\pi\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right],$$

donde

$$g = \begin{pmatrix} 3 + \sqrt{1-2\varepsilon} - 3\varepsilon + 2(-1 + \varepsilon) \cos\left[2\pi\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} + \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right)\right] \\ + (1 + \sqrt{1-2\varepsilon} - \varepsilon) \left(\cos\left[4\pi\frac{\Phi}{\Phi_0}\right] - 2\cos\left[2\pi\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} - \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right)\right]\right) \\ - 2\sqrt{1-2\varepsilon} \left(\cos\left[2\pi\left(\frac{\Phi}{\Phi_0} + \sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right)\right] - \cos\left[4\pi\sqrt{\frac{E}{\hbar\Omega}}\right]\right) \end{pmatrix}.$$

Cuando no hay flujo magnético se obtienen contriuciones nulas de corriente independiente de la polarización de espín μ .

3.6. Corrientes persistentes de espín

En ausencia de flujo magnético que rompa la simetría de inversión temporal la corriente de carga es nula. Sin embargo, existen corrientes que no rompen la simetría de inversión temporal, a saber, las corrientes de espín. Para obtener corrientes de espín se debe romper la simetría de inversión espacial. Esto lo hace la interacción EO. Al igual que en el caso de las corrientes de carga, se puede partir de la definición clásica de corriente. Esta vez, se cambia la carga por el operador espín $e \rightarrow \hbar\vec{\sigma}/2$, definiendo así un operador de "velocidad de espín"[26]

$$\vec{J}_{espín} = \frac{\hbar}{4} \int_{Vol} d^3\vec{r} \psi^\dagger \{\vec{\sigma}, \vec{v}\} \psi.$$

Usando el operador velocidad azimutal (3.24) y tomando la forma general de los espinores (3.9) se consigue la contribución de cada singlete a la corriente de espín en el eje z

$$dJ_j^\mu = \psi_j^\mu \{\hbar\sigma^z/4, v_\varphi\} \psi_j^\mu = 2a\hbar\Omega |C_j^\mu|^2 \left[\left(n_j^\mu - \frac{\Phi}{\Phi_0}\right) (|A^\mu|^2 - |B^\mu|^2) - |B^\mu|^2 \right].$$

Es de notar que la corriente de espín definida de esta forma tiene unidades de energía. Substituyendo los coeficientes $A^{(\mu)}, B^{(\mu)}$, se consiguen expresiones de corriente dJ_j^μ por polarización de espín μ

$$dJ_j^{\mu=1} = |C_j^1|^2 2a\hbar\Omega \left(\left(n_j^1 - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \cos[\theta] - \sin[\theta/2]^2 \right),$$

$$dJ_j^{\mu=2} = |C_j^2|^2 2a\hbar\Omega \left(- \left(n_j^2 - \frac{\Phi}{\Phi_0} \right) \cos[\theta] - \cos[\theta/2]^2 \right).$$

Finalmente, la corriente de espín total viene dada por las cuatro contribuciones

$$J_{\text{espin}}^z = \sum_{j,\mu} \int dJ_j^\mu.$$

En ausencia de interacción EO se verifica que todas las contribuciones se cancelan a pares.

En este capítulo se presentan los resultados y discusiones de las cantidades físicas encontradas en el capítulo anterior. En la sección 4.1 se estudia el espectro del anillo desacoplado en función del flujo magnético y de la interacción espín-órbita (EO). En la sección 4.2, se compara la densidad de estados del anillo en los casos acoplado y desacoplado. Adicionalmente se calculan tiempos de vida de electrones en el anillo en función del parámetro de acoplamiento al reservorio. En las secciones 4.3 y 4.4 se estudian las corrientes persistentes de carga y de espín respectivamente.

4.1. Espectro del anillo desacoplado

En el capítulo anterior se calculó el espectro del anillo desacoplado

$$E_{(-1)^j n}^\mu = \hbar\Omega \left((-1)^j n - \frac{\Phi}{\Phi_0} - \frac{1}{2\pi} \Phi_{AC}^{(\mu)} \right)^2 - \frac{\hbar\omega_{SO}^2}{4\Omega}, \quad n \in \mathbb{Z}^+, \quad (4.1)$$

donde Φ es el flujo magnético, Φ_0 el flujo cuántico fundamental, $\Phi_{AC}^{(\mu)} = -\pi[1 + (-1)^\mu \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2}]$ la fase Aharonov-Casher y $\Omega = \hbar/2ma^2$, siendo a el radio del anillo. El parámetro ω_{SO} modula la interacción EO. La etiqueta j identifica la dirección de propagación de la onda y μ la polarización de espín.

En la figura 4.1, panel a, se muestra la energía en función del flujo magnético en ausencia de interacción EO. Se tiene que la energía es periódica en el flujo con periodicidad Φ_0 . Para enteros y semi enteros de Φ_0 se recupera la cuádruple degeneración del sistema simétrico. Se observa que para cualquier otro valor del flujo se tiene una doble degeneración $E_{-n}^1 = E_{-(n+1)}^2$ y $E_{+n}^2 = E_{+(n+1)}^1$. En notación más sugerente podemos expresar esto mediante la relación

$$E_{\rightarrow}^{\uparrow(\downarrow)} \neq E_{\leftarrow}^{\downarrow(\uparrow)}.$$

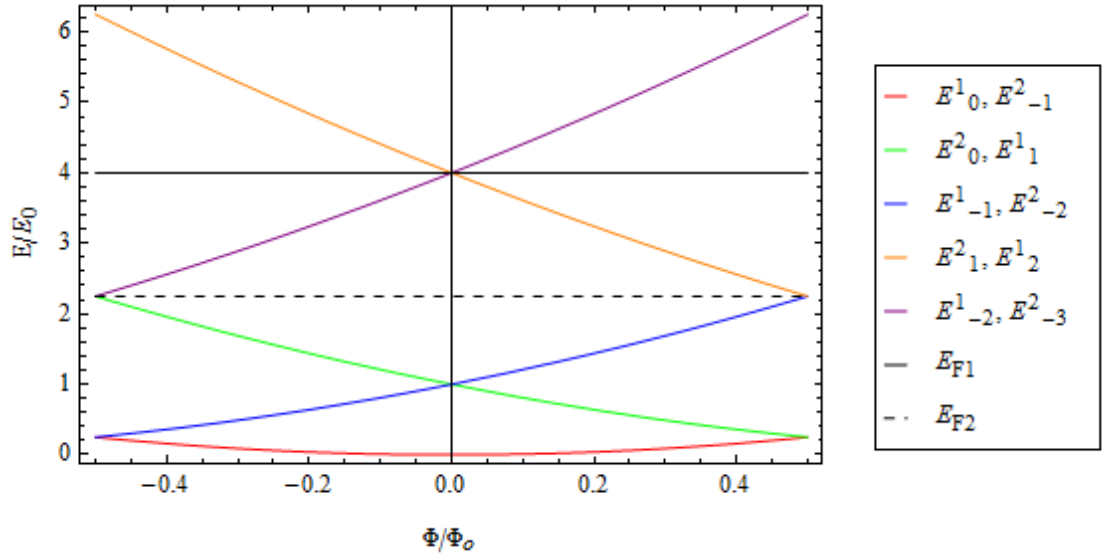
El flujo magnético rompe la degeneración asociada al cambio simultáneo de etiqueta: sentido de propagación y polarización de espín. En otras palabras, el flujo magnético rompe la simetría de inversión temporal. Al considerar la interacción EO (ver figura 4.1 panel b), todos los estados se desdoblan salvo para flujos $\Phi/\Phi_0 = M + (1 \pm \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2})/2$ y $\Phi/\Phi_0 = M$ donde M es un entero o semi entero.

En la figura 4.2, panel a, se muestra la energía en función del parámetro de EO en ausencia de flujo magnético. Para $\omega_{SO}/\Omega = 0$ se recupera la cuádruple degeneración del sistema completamente simétrico. Al considerar la interacción se tiene una doble degeneración $E_{+n}^1 = E_{-(n+1)}^2$ y $E_{+n}^2 = E_{-(n+1)}^1$. Aquí también se considera la notación sugerente anterior

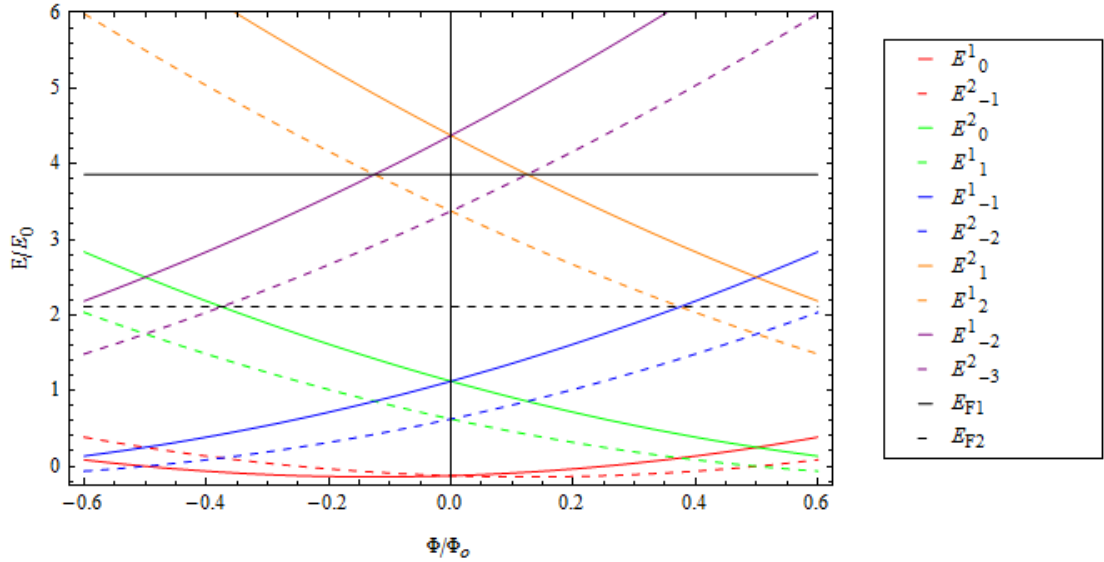
$$E_{\rightarrow}^{\uparrow(\downarrow)} \neq E_{\leftarrow}^{\uparrow(\downarrow)}.$$

La interacción EO rompe la degeneración por cambio de sentido de propagación a polarización de espín fija; esto es asimetría de inversión espacial. Al considerar el campo magnético (ver figura 4.1 panel b), todos los estados se desdoblan salvo para los valores del flujo anteriormente mencionados.

En la figura 4.3 se resumen todos los comportamientos; en ésta se muestra la doble degeneración en ausencia de flujo, la doble degeneración en ausencia de interacción EO y la cuádruple degeneración en ausencia de ambos campos.

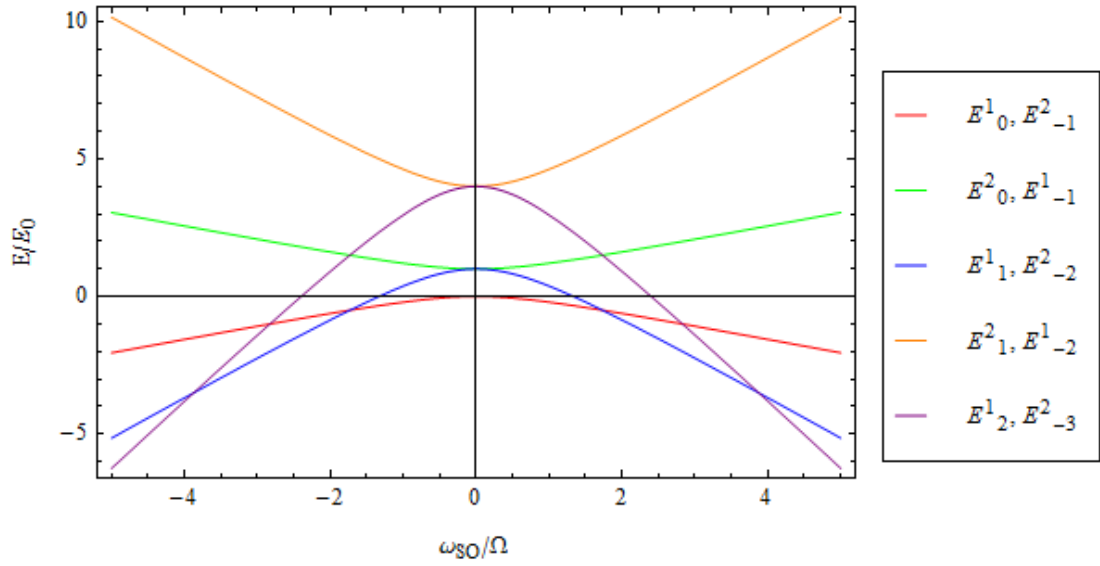


a)

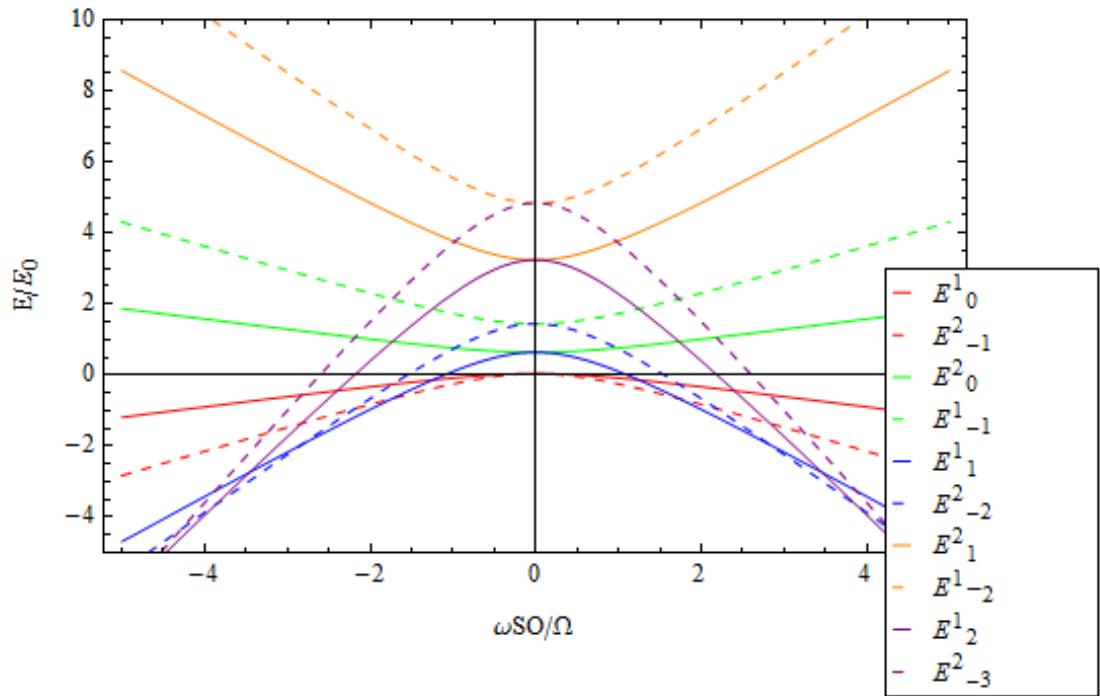


b)

Figura 4.1: Energía de electrones en el anillo desacoplado en función del flujo magnético a) sin interacción EO ($\omega_{SO}/\Omega = 0$) y b) con interacción EO $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$. Adicionalmente, se muestran niveles de Fermi que encierran $4k$ electrones (línea negra sólida) y $4k + 2$ electrones (línea negra discontinua).



a)



b)

Figura 4.2: Energía de electrones en el anillo desacoplado en función de la interacción EO a) sin flujo magnético ($\Phi/\Phi_0 = 0$) y b) con flujo magnético $\Phi/\Phi_0 = 0,2$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$.

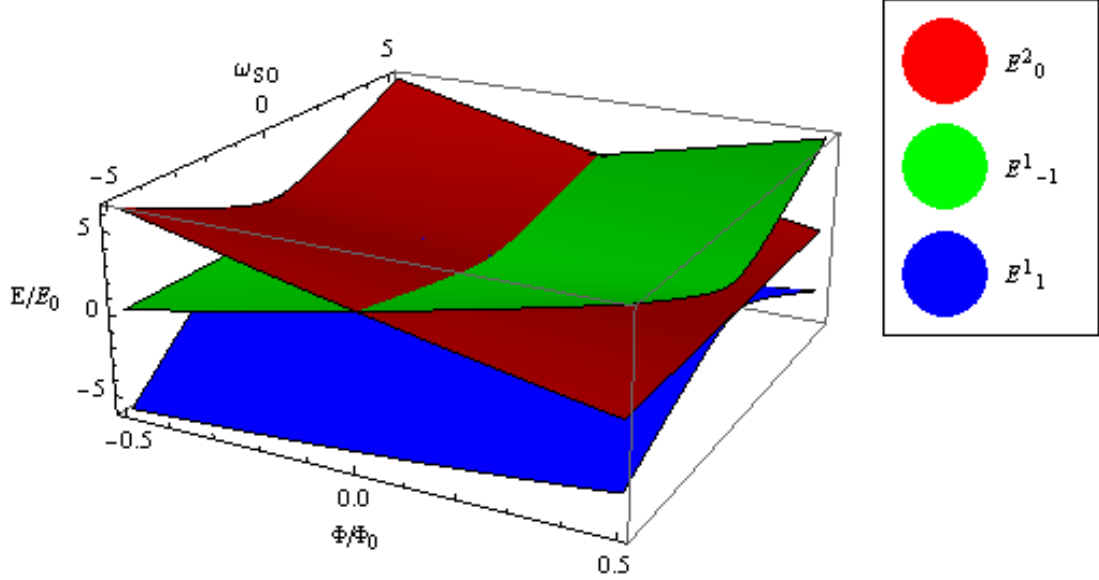


Figura 4.3: Espectro 3D del anillo desacoplado en función del flujo magnético y el parámetro de interacción EO. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$.

4.2. Densidad de estados

Los estados energéticos del anillo desacoplado están cuantizados. La pregunta pertinente es entonces, cuando se acopla el reservorio, ¿cómo se modifican los estados del anillo? Para responder esta pregunta se calcula la densidad de estados.

Cuando se acopla el anillo al reservorio ($\varepsilon = 0,2$ de la figura 4.4), ocurre un ensanchamiento de los niveles energéticos en torno a las energías cuantizadas del anillo desacoplado ($\varepsilon = 0,01$ de la figura 4.4). Se encuentra que los estados energéticos se ajustan a una distribución de Cauchy-Lorentz

$$f_L = I \left[\frac{(\Delta E)^2}{(E - E_l)^2 + (\Delta E)^2} \right]. \quad (4.2)$$

Usando el principio de incertidumbre energía-tiempo ($\Delta E \Delta t = \hbar/2$), calculamos los tiempos de vida de los electrones en el anillo. Se encuentra que, en función del parámetro de acoplamiento al reservorio, la incertidumbre del primer estado energético tiene un comportamiento de ley de potencias dado por $\Delta t = (0,9 \pm 0,1)\varepsilon^{(1,03 \pm 0,01)}/\Omega$ (ver figura 4.5).

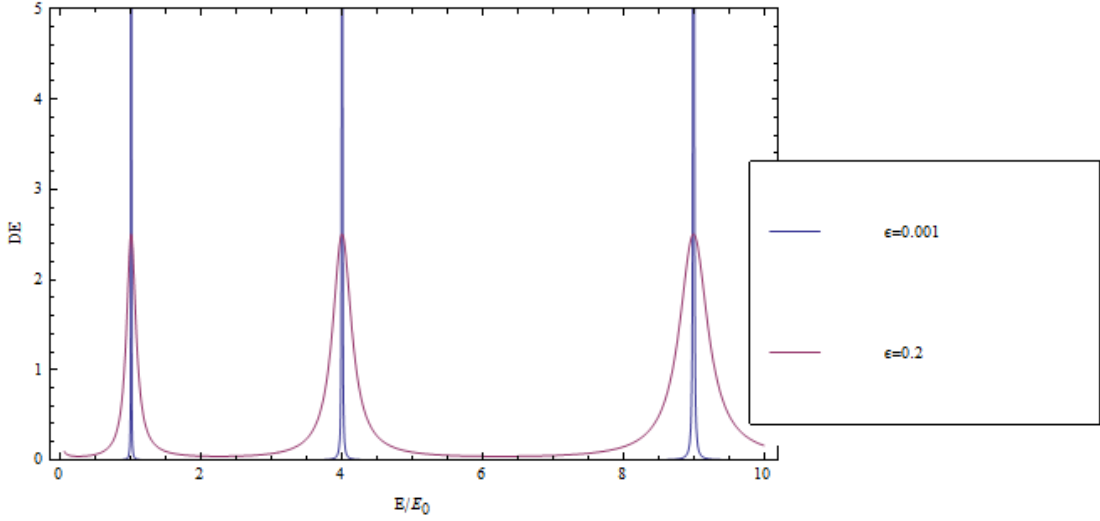


Figura 4.4: Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. La interacción EO y el flujo magnético se encuentran apagados ($\omega_{SO}/\Omega = 0$, $\Phi/\Phi_0 = 0$). La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$.

Se tiene que el campo magnético (figura 4.6 panel a) y la interacción EO (figura 4.6 panel b) desdoblan los niveles energéticos en torno a los niveles del anillo desacoplado. En la figura 4.7 se observa la cuádruple degeneración debido a ambos campos.

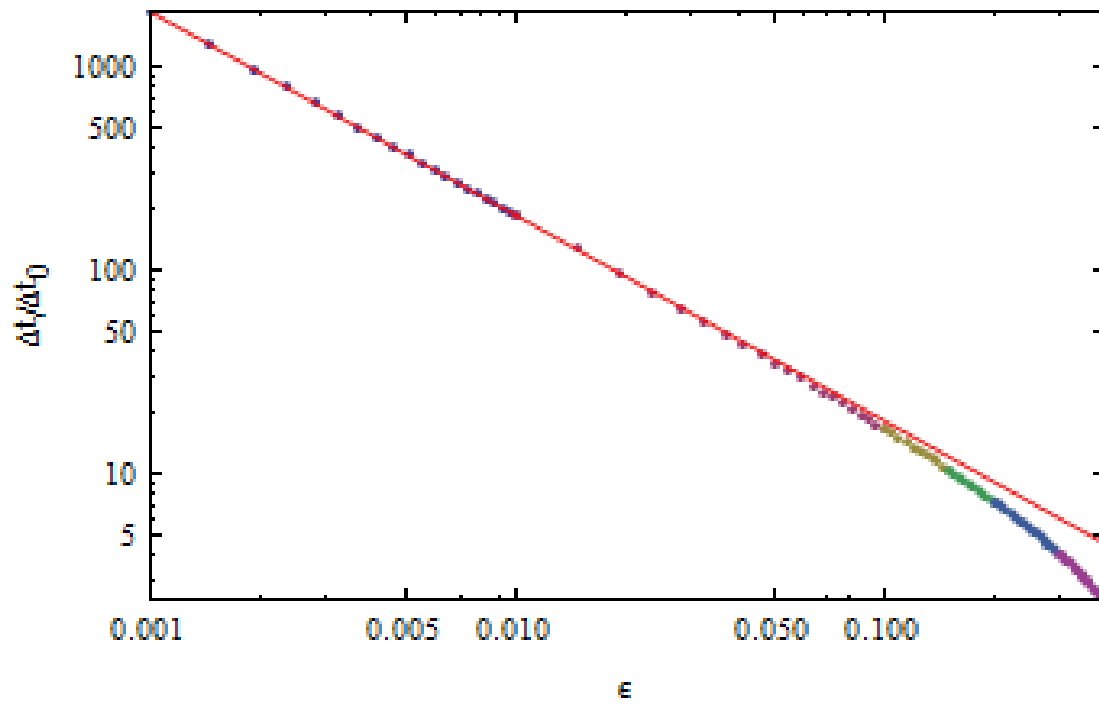


Figura 4.5: Tiempo de vida de electrones en el anillo en función del parámetro de acoplamiento con el reservorio. Los puntos corresponden a tiempos de vida obtenidos mediante el ajuste de la distribución (4.2), mientras que la línea roja es un ajuste de los puntos.

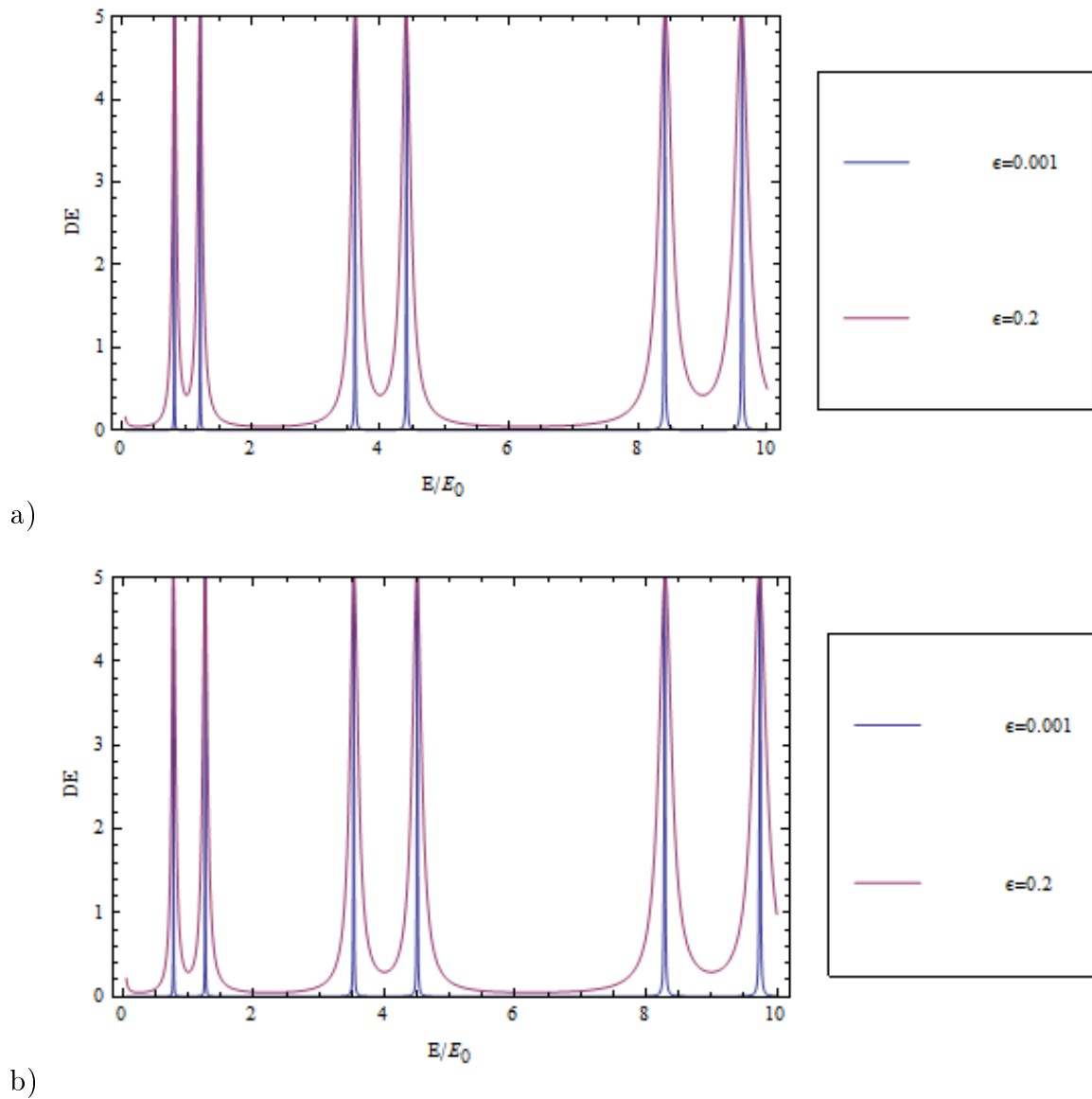


Figura 4.6: Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio . Los parámetros de interacción son a) $\omega_{SO}/\Omega = 0$, $\Phi/\Phi_0 = 0,1$ y b) $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$, $\Phi/\Phi_0 = 0$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$.

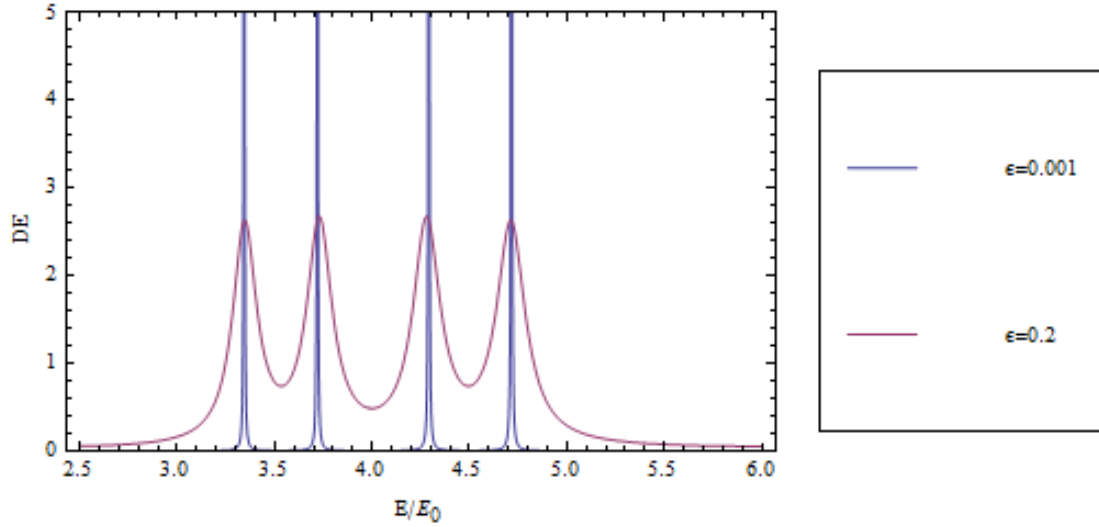


Figura 4.7: Densidad de estados del anillo en función de la energía para dos valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. La interacción EO es $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$ mientras que el flujo magnético es $\Phi/\Phi_0 = 0,05$. La energía se expresa en unidades $E_0 = \hbar\Omega$ y la energía de Fermi es $E_F = 12E_0$.

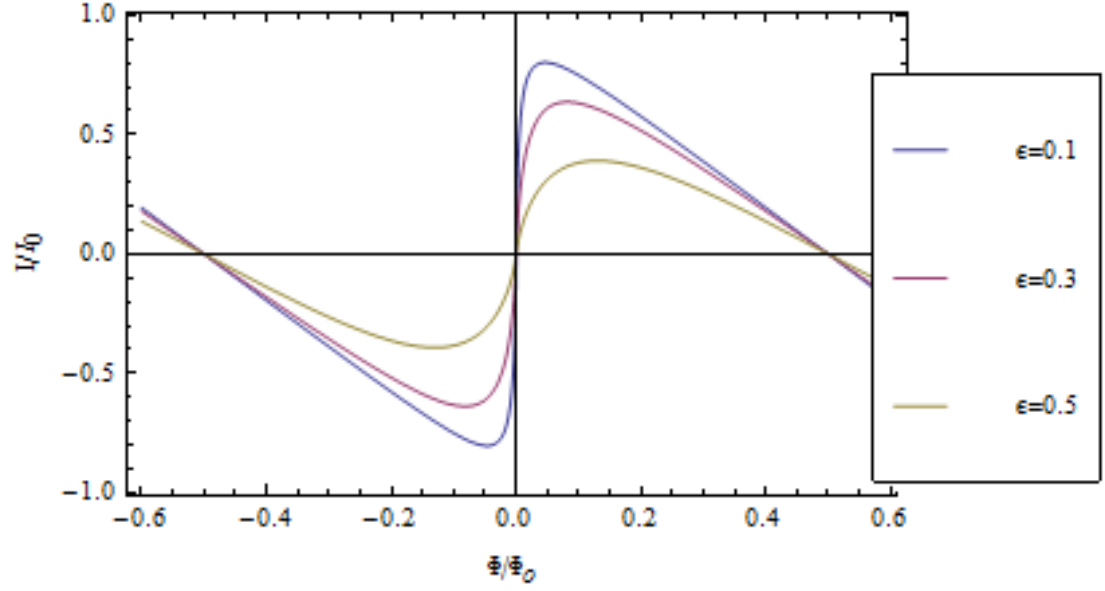
4.3. Corrientes persistentes de carga

Para el anillo desacoplado a temperatura cero, las corrientes persistentes de carga vienen dadas por

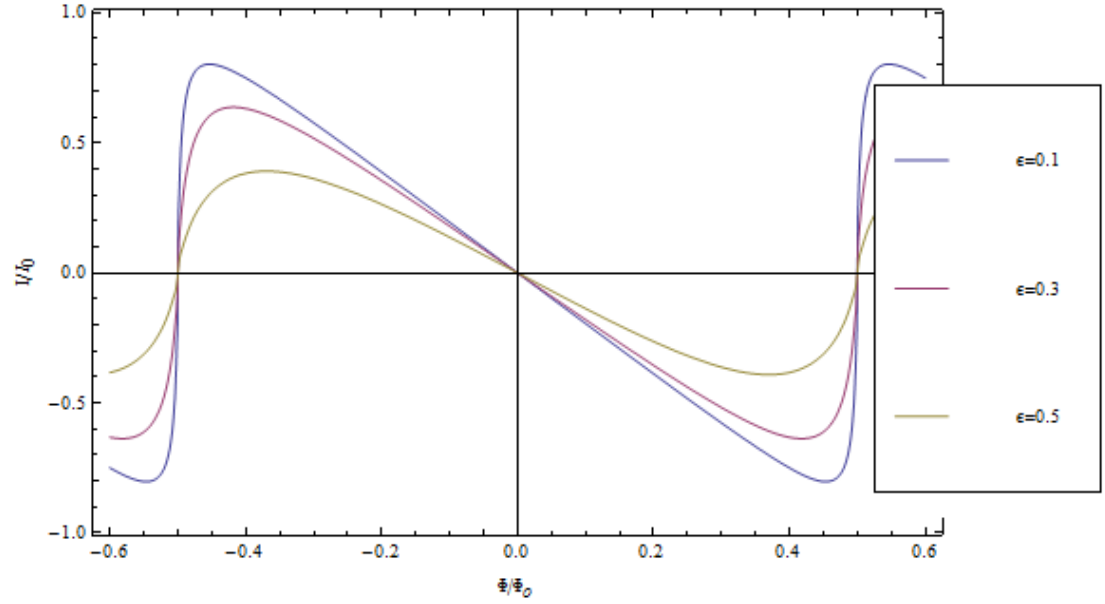
$$I_{\text{carga}} = - \sum_{i \in \text{ocupado}} \frac{dE_i}{d\Phi},$$

donde i representa los estados ocupados. La corriente es periódica en Φ/Φ_0 con período 1. Al sumar las contribuciones de los estados ocupados se alternan los signos de la corriente y se obtiene una cancelación fuerte de la corriente. La contribución más grande la proporciona el estado más próximo al nivel de Fermi. Existen tres casos: I) el nivel de Fermi fija $N=4k$ electrones, II) $N=4k+2$ electrones y III) un número variable de electrones en función del flujo, donde $k \in \mathbb{Z}^+$. Se tiene que sin interacción EO, en el caso I), donde $N=4k$ (ver figura 4.8 panel a), hay dos electrones con polarización de espín $\mu = 1$ y $\mu = 2$ en cada banda. En el nivel de Fermi, dos bandas cuyos electrones tienen sentido de propagación distintos se cruzan en enteros del flujo cuántico fundamental lo

cual resulta en un salto y cambio de signo de la corriente en estos valores. En el caso II) (ver figura 4.8 panel b), se tiene un número impar de electrones con polarización $\mu = 1$ y $\mu = 2$ por banda. En el nivel de Fermi, dos bandas cuyos electrones tienen sentido de propagación distinto se cruzan en semi enteros del flujo cuántico fundamental lo cual resulta en un salto y cambio de signo de la corriente en estos valores. Se puede obtener el caso I) del caso II) haciendo el cambio $\Phi/\Phi_0 \rightarrow \Phi/\Phi_0 + 1/2$. El caso I) y II) resultan un caso particular de III) donde el cruce entre bandas queda dictado por el nivel de Fermi. En los tres casos, el acoplamiento al reservorio suaviza los saltos ya que se cruzan niveles energéticos con incertidumbre. Las corrientes persistentes se manifiestan cuando la función de onda del electrón se encierra sobre sí misma en el anillo y adquiere la fase Aharonov-Bohm. Al acoplar el reservorio, los electrones pierden memoria de fase con una probabilidad finita y la fase Aharonov-Bohm adquirida es aleatoria degradando así la corriente.



a)



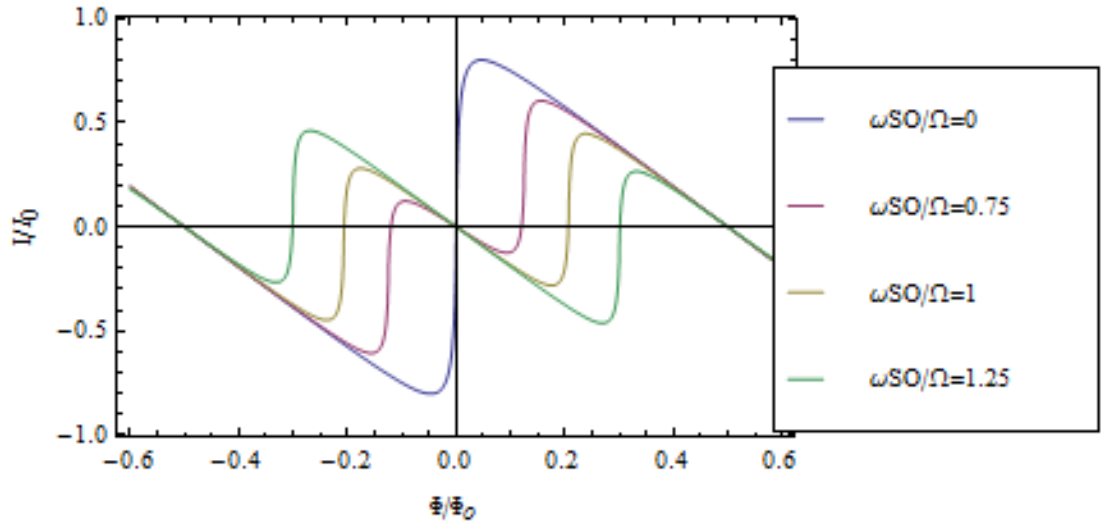
b)

Figura 4.8: Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. La interacción EO se encuentra apagada y la corriente persistente de carga se mide en unidades $I_0 = ev_f/2\pi a$.

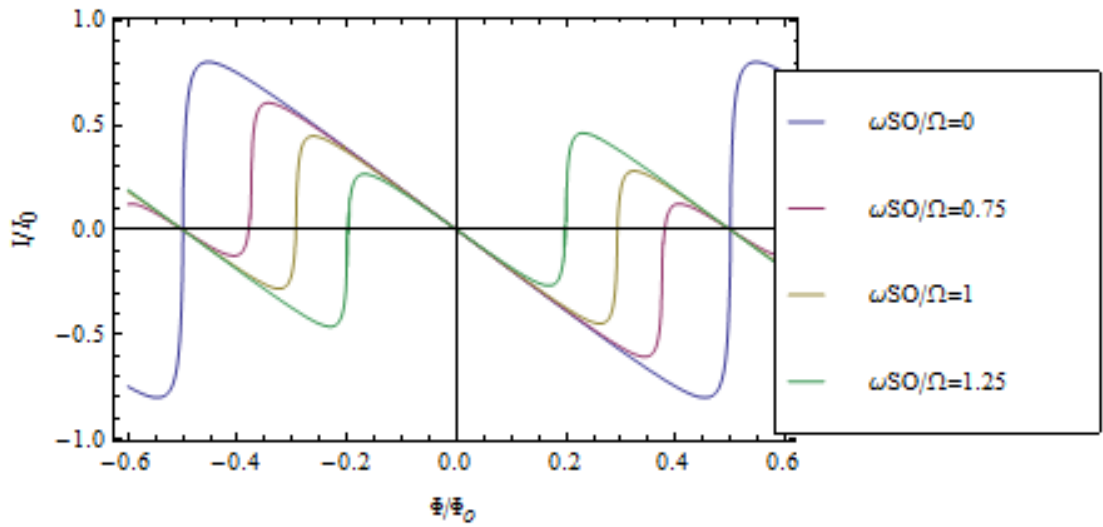
Al considerar la interacción EO los cruces entre bandas en el nivel de Fermi suceden en $\Phi/\Phi_0 = M + (1 \pm \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2})/2$ donde $M \in \mathbb{Z}^+$ para el caso I) y

CAPÍTULO 4: RESULTADOS Y DISCUSIONES

$\Phi/\Phi_0 = M \pm \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2}/2$ para el caso II). Esto desplaza los saltos en la corriente (ver figura 4.9 panel a y b) a los valores previamente mencionados. Con interacción EO, el caso III) (ver figura 4.10) acepta un número impar de electrones a lo largo de una región del flujo lo que crea un desnivel en la corriente.



a)



b)

Figura 4.9: Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para distintas interacciones EO y acoplamiento $\varepsilon = 0,1$ con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$.

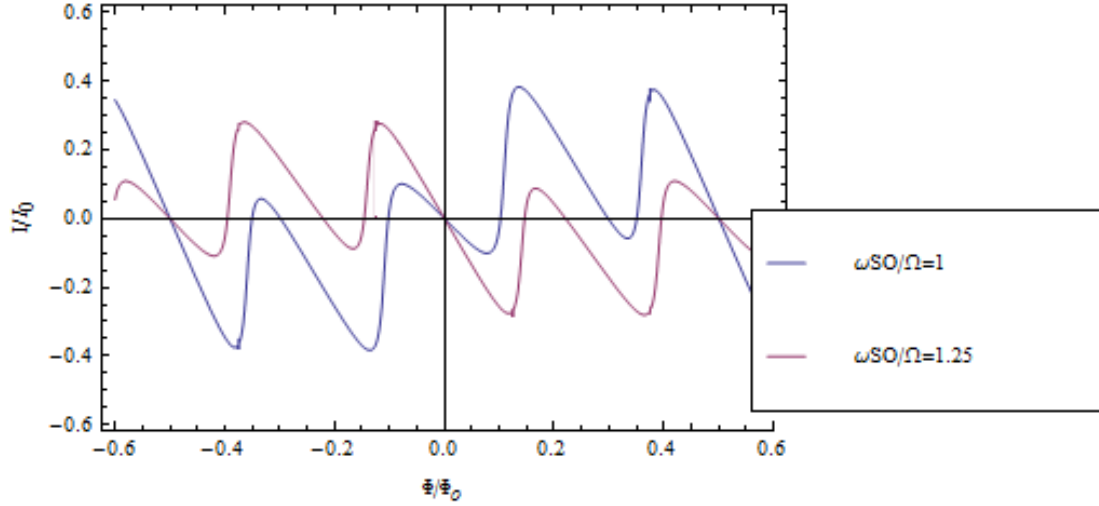
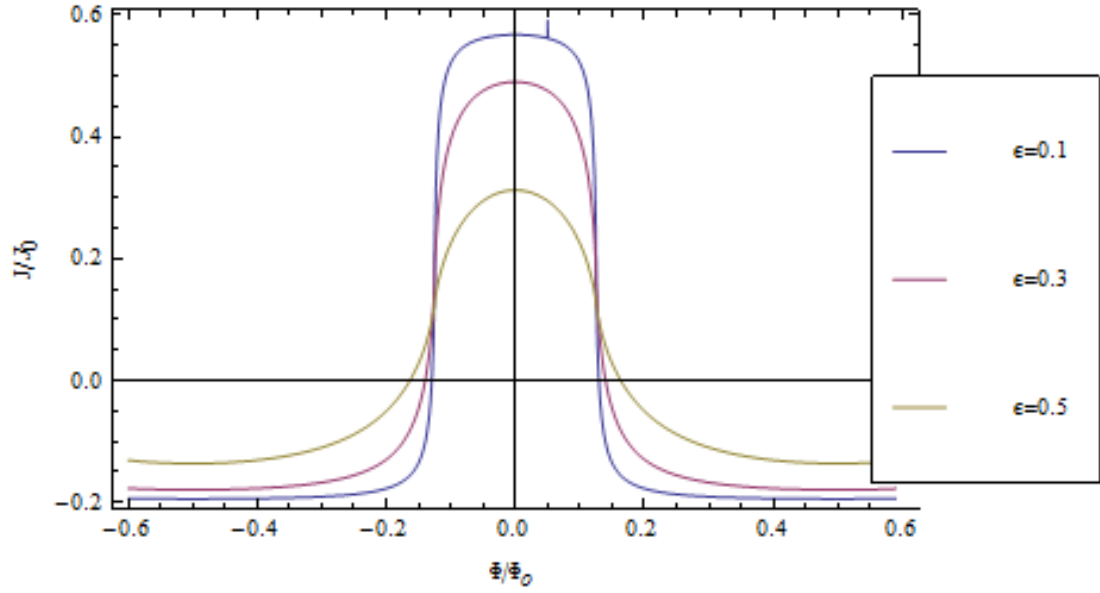


Figura 4.10: Corriente persistente de carga en función del flujo magnético para distintas interacciones EO y acoplamiento $\varepsilon = 0,1$ con el reservorio. El número de electrones cambia en función del flujo de $4k$ a $4k+1$ (curva azul) y $4k$ a $4k+3$ (curva púrpura).

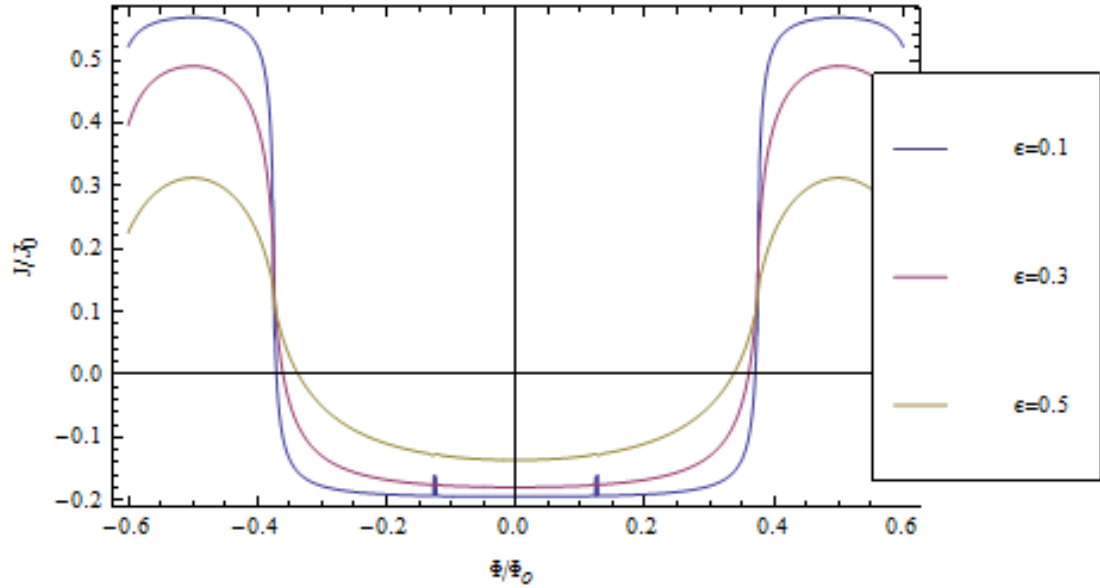
4.4. Corrientes persistentes de espín

En ausencia de flujo magnético se tiene simetría de inversión temporal, por lo tanto, no hay corrientes de carga. Sin embargo, se pueden tener corrientes de espín porque éstas no rompen dicha simetría. Para obtener corrientes de espín es necesario romper la asimetría de inversión espacial.

Para enteros o semi enteros del flujo magnético se tiene en cada cruce de bandas dos electrones con igual energía, sentidos de propagación opuestos y polarización de espín contraria. En este caso la magnitud de la corriente de espín es máxima (ver figura 4.11). Cabe notar que para estos valores la corriente es de espín pura (no hay corriente de carga). Al igual que en las corrientes persistentes de carga, se tiene un salto abrupto y cambio de signo de la corriente en $\Phi/\Phi_0 = M + (1 \pm \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2})/2$ donde $M \in \mathbb{Z}^+$ para el caso I) y $\Phi/\Phi_0 = M \pm \sqrt{1 + (\omega_{SO}/\Omega)^2}/2$ para el caso II) debido al cruce de bandas.



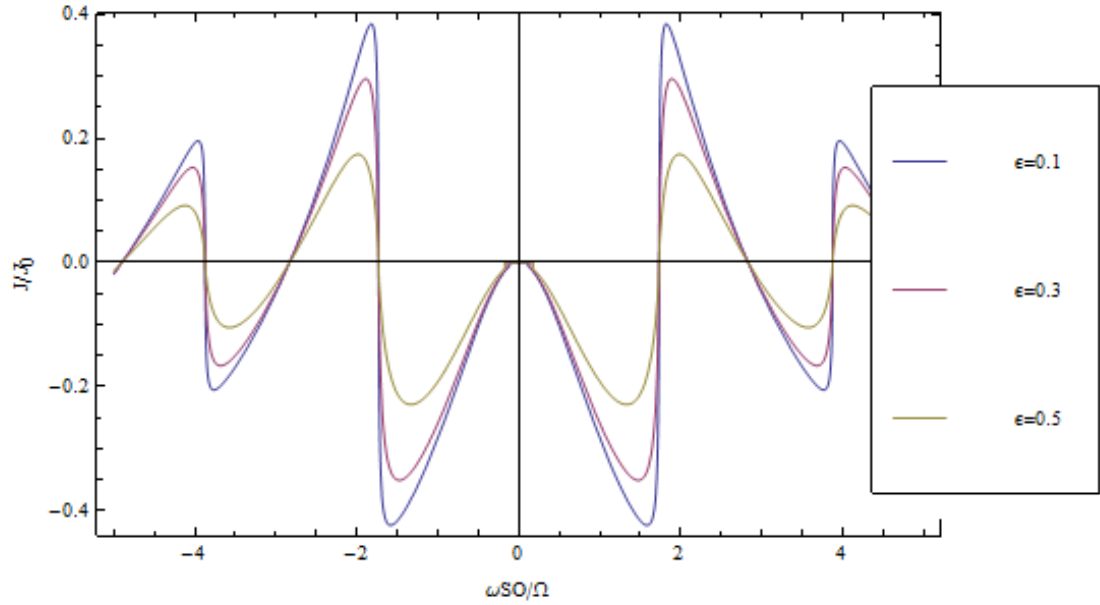
a)



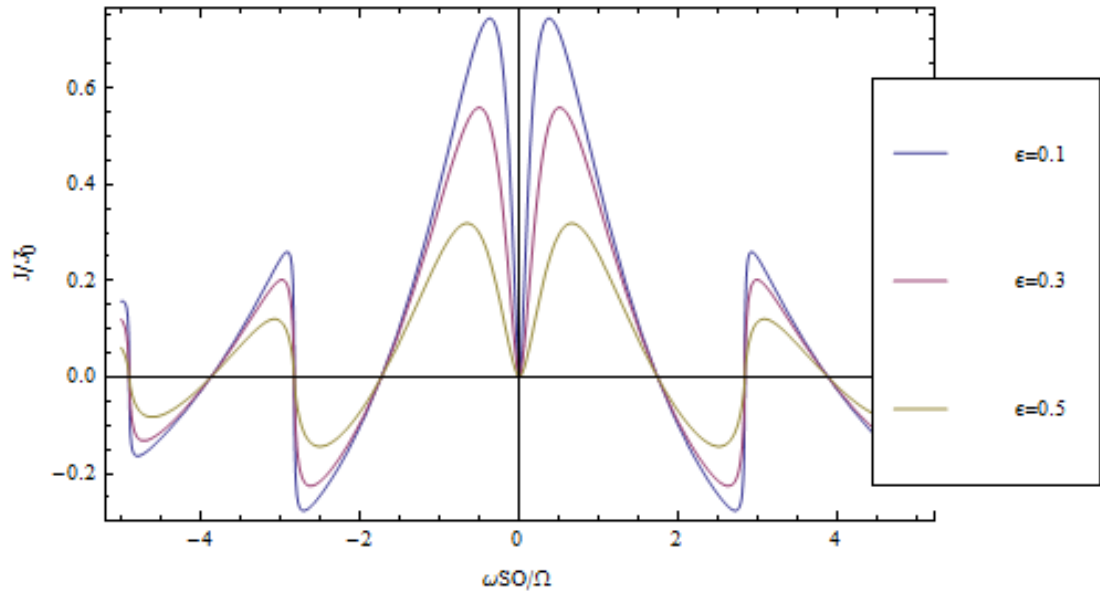
b)

Figura 4.11: Corriente persistente de espín en función del flujo magnético para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. La interacción EO es $\omega_{SO}/\Omega = 0,75$. La corriente se mide en unidades $J_0 = \hbar v_f/4\pi a$.

Al quitar la interacción EO se recupera la simetría de inversión espacial y la corriente de espín resultante es nula (ver figura 4.12). Al igual que las corrientes de carga, el reservorio degrada las corrientes de espín.



a)



b)

Figura 4.12: Corriente persistente de espín en función del parámetro de EO para tres valores del parámetro de acoplamiento con el reservorio. El número de electrones es a) $4k$ y b) $4k+2$. El flujo magnético se encuentra apagado ($\Phi/\Phi_0 = 0$). La corriente de espín se mide en unidades $J_0 = \hbar v_f / 4\pi a$.

CONCLUSIONES

- Se describió la interacción espín-órbita tipo Rashba para un gas de electrones bidimensional formado en una heterounión de semiconductores III-V con asimetría en el potencial de confinamiento. En este sentido se realizó una derivación consistente y comparativamente simple del término Rashba que recoge nociones dispersas en la literatura actual.
- Estudiamos los estados de electrones en un anillo mesoscópico usando una formulación simétrica entre las fases Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher. La función de onda del electrón se cierra sobre sí misma en una geometría no-simplemente conexa (anillo) y adquiere ambas fases. La condición de que la función de onda sea univaluada conlleva a la existencia de corrientes persistentes. Se analizó el espectro de energías en términos de las simetrías del sistema y se observaron las consecuencias del rompimiento de simetría de reversión temporal provocada por el flujo magnético, responsable de la fase Aharonov-Bohm. También se analizaron las consecuencias del rompimiento de simetría de reversión espacial provocada por la interacción espín-órbita de Rashba, responsable de la fase Aharonov-Casher. Por separado, estas interacciones rompen la degeneración cuádruple original en dos pares doblemente degenerados. La aplicación de ambas interacciones elimina

toda degeneración salvo por situaciones de degeneración accidental al variar la interacción espín-órbita.

- Se desarrolló un modelo simple, basado en el modelo de Büttiker [8], para introducir decoherencia en el anillo. El modelo consiste en conectar el anillo a un reservorio de electrones de energía de Fermi y temperatura dada. Se encontró que el reservorio introduce estados electrónicos en el anillo con tiempos de vida finita. Se calcularon dichos tiempos y se encontró que como función del parámetro de acoplamiento con el reservorio, los tiempos de vida siguen una ley de potencia. El reservorio provoca un ensanchamiento de los niveles energéticos lo cual disminuye la coherencia del sistema vía la pérdida de relación de fase entre los electrones que ingresan al reservorio y los que permanecen en el anillo. Esta pérdida de coherencia degrada las corrientes persistentes de carga y espín.
- Se calcularon las corrientes persistentes de carga y espín y se obtuvieron resultados consistentes con los de Buttiker [8] para anillos metálicos y los de Molnar et al. [27] para anillos semiconductores. Se tiene que ambas corrientes se degradan como función del parámetro de acoplamiento, sin embargo no se consigue decoherencia total. Resulta interesante la comparación con el procedimiento de Molnar et al. en el que se introduce una impureza que abre brechas en las zonas de Brillouin. Esto a su vez degrada las corrientes por efectos de interferencia. Otra diferencia es que Molnar et al. considera el número de partículas en el anillo como fijo lo cual no resulta conveniente al acoplar el reservorio de electrones.
- Direcciones futuras:
 - Estudiar la transición entre el anillo acoplado y desacoplado que bajo el modelo desarrollado resulta poco clara.
 - Desarrollar un modelo de acople con el reservorio que pueda incluir los efectos temporales que son omitidos en la formulación con matriz de dispersión.

CONCLUSIONES

- Estudiar los efectos de disipación real por escape de corrientes al reservorio como los propuestos por González et al. [30]

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Wikipedia. Gallium arsenide — wikipedia, the free encyclopedia. http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Gallium_arsenide&oldid=487706985, 2012. [En línea 20-abril-2012].
- [2] Wikipedia. Brillouin zone — wikipedia, the free encyclopedia. http://en.wikipedia.org/w/index.php?title=Brillouin_zone&oldid=491553212, 2012. [En línea 20-abril-2012].
- [3] J. H. Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors : an introduction*. Cambridge University Press, 1998.
- [4] Benjamín Santos. Análisis de interferometría de espín mediante la aproximación tight-binding en gases de electrones bidimensionales. Trabajo Especial de Grado, Escuela de Física, Universidad Central de Venezuela. Tutor: Ernesto Medina, 2010.
- [5] Roland Winkler. *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems (Springer Tracts in Modern Physics)*. Springer, 2003.

BIBLIOGRAFÍA

- [6] R. Lassnig. k-p theory, effective-mass approach, and spin splitting for two-dimensional electrons in GaAs-GaAlAs heterostructures. *Phys. Rev. B*, 31:8076–8086, 1985.
- [7] R. P. Feynman, R. B. Leighton y M. L. Sands. *The Feynman lectures on physics*. Addison-Wesley, 1989.
- [8] M. Büttiker. Small normal-metal loop coupled to an electron reservoir. *Phys. Rev. B*, 32:1846–1849, 1985.
- [9] R. Eisberg y R. Resnick. *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles*. Wiley, segunda edición, 1985.
- [10] N. W. Ashcroft y N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Brooks Cole, primera edición, 1976.
- [11] Shun L. Chuang. *Physics of Optoelectronic Devices (Wiley Series in Pure and Applied Optics)*. Wiley-Interscience, 1995.
- [12] Charles Kittel. *Introduction to Solid State Physics*. John Wiley & Sons, Inc., New York, sexta edición, 1986.
- [13] E O Kane. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 1(4):249–261, 1957.
- [14] G. Bastard. *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*. EDP Sciences, 1992.
- [15] Emmanuel I. Rashba y Bertrand I. HalperinHans-Andreas, Engel. Theory of Spin Hall Effects in Semiconductors. *arXiv*, cond-mat.m(May):37, 2006.
- [16] John D. Jackson. *Classical Electrodynamics*. Wiley, tercera edición, 1998.
- [17] J. D. Jackson y L. B. Okun. Historical roots of gauge invariance. *Reviews of Modern Physics*, 73(3):34, 2000.

- [18] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. Addison Wesley, primera edición, 1993.
- [19] Vanesa Torres Montilla. Efectos topológicos y cuantización en corrientes de espín. Trabajo Especial de Grado, Escuela de Física, Universidad Central de Venezuela. Tutor: Ernesto Medina, 2010.
- [20] Sangchul Oh y Chang-Mo Ryu. Persistent spin currents induced by the Aharonov-Casher effect in mesoscopic rings. *Phys. Rev. B*, 51:13441–13448, 1995.
- [21] Y. Aharonov y D. Bohm. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. *Phys. Rev.*, 115:485–491, 1959.
- [22] R. G. Chambers. Shift of an Electron Interference Pattern by Enclosed Magnetic Flux. *Phys. Rev. Lett.*, 5:3–5, 1960.
- [23] Y. Aharonov y A. Casher. Topological Quantum Effects for Neutral Particles. *Phys. Rev. Lett.*, 53:319–321, 1984.
- [24] A. Cimmino, G. I. Opat, A. G. Klein, H. Kaiser, S. A. Werner, M. Arif y R. Clothier. Observation of the topological Aharonov-Casher phase shift by neutron interferometry. *Phys. Rev. Lett.*, 63:380–383, 1989.
- [25] U. Ekenberg y D. M. Gvozdic. Analysis of electric-field-induced spin splitting in wide modulation-doped quantum wells. *Physical Review B*, 78(20):10, 2007.
- [26] B. Berche, C. Chatelain y E. Medina. Mesoscopic rings with spin-orbit interactions. *European Journal of Physics*, 31(5):1267–1286, 2010.
- [27] B. Molnár, F. M. Peeters y P. Vasilopoulos. Spin-dependent magnetotransport through a ring due to spin-orbit interaction. *Phys. Rev. B*, 69:155335, 2004.
- [28] M. Büttiker, Y. Imry y M. Ya. Azbel. Quantum oscillations in one-dimensional normal-metal rings. *Phys. Rev. A*, 30:1982–1989, 1984.

BIBLIOGRAFÍA

- [29] Yoseph Imry. *Introduction to mesoscopic physics*. Mesoscopic Physics and Nanotechnology. Oxford University Press, New York, 1997.
- [30] Luis A. González Árraaga. Interferometría y efectos decoherentes en la producción de pares enredados y polarizados de espín. Tesis de Maestría, Centro de Física, Intituto Venezolano de Investigaciones Científicas. Tutor: Ernesto Medina, 2012.

