

*Análisis de Interferometría de Espín*  
*Mediante la Aproximación*  
*Tight-Binding en Gases de Electrones*  
*Bidimensionales*

*Br. Benjamín Santos*

Tutor: Dr. Ernesto Medina D.

Trabajo Especial de Grado



Caracas, 14 de septiembre del año 2010





Universidad Central de Venezuela

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

**ANÁLISIS DE INTERFEROMETRÍA DE ESPÍN  
MEDIANTE LA APROXIMACIÓN  
TIGHT-BINDING EN GASES DE ELECTRONES  
BIDIMENSIONALES**

Br. Benjamín Santos

Dr. Ernesto Medina D., Tutor

Caracas, 14 de septiembre del año 2010

ANÁLISIS DE INTERFEROMETRÍA DE ESPÍN MEDIANTE LA  
APROXIMACIÓN TIGHT-BINDING EN GASES DE ELECTRONES  
BIDIMENSIONALES

Br. Benjamín Santos

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

---

Quienes suscriben, miembros del Jurado que examinó el trabajo presentado por el **Br. Benjamín Santos**, titulado: “**Análisis de Interferometría de Espín Mediante la Aproximación Tight-Binding en Gases de Electrones Bidimensionales**” para optar al título de Licenciado en Física, consideramos que dicho trabajo cumple con los requisitos exigidos por los reglamentos respectivos y por lo tanto lo declaramos APROBADO en nombre de la Universidad Central de Venezuela.

---

Dr. Ernesto Medina D., Tutor

Fecha

---

Dr. Félix Marín

Fecha

---

Dr. Salvatore De Vincenzo

Fecha

Caracas, 14 de septiembre del año 2010

A mi familia. . .

## Agradecimientos

Le doy las gracias a aquellos familiares y amigos, profesores y compañeros, que han estado presentes en la consecución de todos mis logros pero también de mis fracasos académicos.

También agradezco a la Universidad Central de Venezuela y al Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas por ser las instituciones que me han hecho posible parte de mi enriquecimiento intelectual y humano.

Agradezco a Alexánder y Ernesto por su paciencia, confianza demostrada y apoyarme para conseguir este logro, a Nelson por las discusiones y fungir como mi enlace con la Escuela, y a Emilio por su ayuda en la construcción de este documento.

Mi agradecimiento especial para las familias Alson y Martínez, sin ellos no hubiese podido llegar hasta aquí; y en especial a Vanessa por animarme, acompañarme y darle más sentido a todo esto.

Este trabajo contó con ayuda económica por parte del Instituto Venezolano de Investigaciones Científicas.

# Resumen

## **Análisis de Interferometría de Espín Mediante la Aproximación Tight-Binding en Gases de Electrones Bidimensionales**

Benjamín Santos

Dr. Ernesto Medina D., Tutor

*Universidad Central de Venezuela*

Se presentan resultados de aplicar la aproximación Tight-Binding a gases de electrones bidimensionales (2DEG) para un arreglo de interferometría de espín Mach-Zender (MZI) considerando interacción espín-órbita (EO) [1]. Se hallan condiciones de filtraje efectivo de espín para los dispositivos propuestos siguiendo el arreglo MZI mediante la definición de la asimetría de transmisión. Adicionalmente, discutimos y comparamos nuestros resultados con propuestas realizadas anteriormente en la literatura [28, 31], que manipulan los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher para desarrollar un filtro de espín. Encontramos que el método de las asimetrías de transmisión es igual de eficiente pero más sencillo para analizar el filtrado, por lo que puede resultar conveniente para implementaciones en sistemas de mayor complejidad✠



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>vi</b>
<b>Índice general</b>	<b>vii</b>
<b>Índice de figuras</b>	<b>ix</b>
<b>Índice de cuadros</b>	<b>xiv</b>
<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>1. Interacción Espín-Órbita</b>	<b>4</b>
1.1. La Ecuación de Dirac y la de Pauli . . . . .	4
1.2. Semiconductores . . . . .	9
1.2.1. ¿Qué es un semiconductor? . . . . .	10
1.2.2. Estructura cristalina en los semiconductores . . . . .	11
1.2.3. Estructura de bandas . . . . .	15
1.2.4. Heteroestructura GaAs/AlGaAs . . . . .	20
1.3. Asimetrías de inversión . . . . .	21
1.3.1. Asimetría de inversión de bulto . . . . .	22
1.3.2. Asimetría de inversión de estructura . . . . .	24
<b>2. Efecto AB y AC</b>	<b>26</b>
2.1. Efecto Aharonov-Bohm . . . . .	26
2.2. Efecto Aharonov-Casher . . . . .	30

<b>3. Método Tight-Binding</b>	<b>32</b>
3.1. Hamiltoniano Tight-Binding . . . . .	33
3.2. Diferencias Finitas . . . . .	35
3.3. Funciones de Green y Autoenergía . . . . .	37
3.4. Función de Transmisión . . . . .	42
3.5. “Cable” semi-infinito . . . . .	43
3.6. Sistemas con espín . . . . .	46
<b>4. Filtro de espín Hatano-Chen</b>	<b>47</b>
4.1. Hamiltoniano en el caso continuo . . . . .	47
4.2. Efecto AB y AC . . . . .	49
4.3. Filtro Perfecto de Espín de Hatano . . . . .	51
4.3.1. Condición de filtrado . . . . .	52
4.3.2. Autoenergías y Transmisión . . . . .	54
<b>5. Resultados Modelo de Hatano-Chen</b>	<b>56</b>
<b>6. Modelo MZI</b>	<b>59</b>
6.1. Modelo Tight-Binding MZI Simétrico . . . . .	60
6.1.1. Autoenergías y Transmisión . . . . .	62
6.2. Modelo Tight-Binding MZI Asimétrico . . . . .	62
6.2.1. Autoenergías y Transmisión . . . . .	63
<b>7. Resultados Modelos MZI</b>	<b>65</b>
7.1. Modelo Tight-Binding MZI Simétrico . . . . .	65
7.2. Modelo Tight-Binding MZI Asimétrico . . . . .	79
<b>8. Discusión y Conclusiones</b>	<b>92</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>95</b>

# Índice de figuras

1.1.	Densidad de niveles (eje horizontal) vs Energía (eje vertical) en un metal [2], la región sombreada indica los niveles ocupados por electrones. . . . .	10
1.2.	Densidad de niveles vs Energía en un aislante [2], la región sombreada indica los niveles ocupados por electrones. . . . .	10
1.3.	(a) Diagrama de Laue de espectroscopía de rayos X de la estructura cristalina del silicio. (b) Estructura del silicio mapeada por un microscopio de fuerza atómica [23] . . . . .	12
1.4.	Red bidimensional, las direcciones $\mathbf{a}$ y $\mathbf{b}$ no necesariamente son perpendiculares y las distancias $a$ y $b$ pueden ser diferentes. . . . .	13
1.5.	Red bidimensional invariante bajo rotaciones de múltiplos enteros de 180 grados. . . . .	14
1.6.	La estructura zinc-blenda del arseniuro de galio. Adaptado de [26] . . . . .	14
1.7.	Enlaces tetrahédricos en el arseniuro de galio. Adaptado de [26] . . . . .	14
1.8.	Estructura de bandas parabólicas. Basado en [37] . . . . .	15
1.9.	Detalle de la estructura de bandas cerca del punto $\Gamma$ ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) para el GaAs según el modelo de Kane extendido [16, 37]. Aquí la banda de conducción mostrada se denomina $\Gamma_{6c}$ . Adaptado de [30]. . . . .	19
1.10.	Heteroestructura GaAs/AlGaAs. El eje $z$ es la dirección de confinamiento. Adaptado de [16]. . . . .	20
1.11.	Relación entre el ancho de banda prohibido mayor y menor para el compuesto GaAs(1)/AlGaAs(2), cuando coinciden de esta manera se denomina <i>straddling</i> [29]. . . . .	20

1.12.	(a) configuración con simetría de inversión, (b) la operación muestra que el arreglo no tiene simetría de inversión [36]. . . . .	22
1.13.	Relación de dispersión para dos estados de espín diferentes, $E_-(\mathbf{k})$ (paraboloide exterior) y $E_+(\mathbf{k})$ . La separación de bandas es debido a la ruptura de la simetría de inversión. Adaptado de [30]. . . . .	23
2.1.	Experimento de doble rendija con electrones. Adaptado de [5, 24]. . . . .	28
2.2.	Efecto Aharonov-Bohm. Adaptado de [5, 24]. . . . .	28
2.3.	Línea con densidad constante de carga. Adaptado de [5]. . . . .	31
3.1.	Potencial tight-binding. Adaptado de [17, 20] . . . . .	32
3.2.	“Cables” $p$ y $q$ conectados a un conductor. . . . .	37
3.3.	Esquema de la función de Green retardada en una dimensión. Adaptado de [35] . . . . .	39
3.4.	Esquema de la función avanzada de Green en una dimensión. Adaptado de [35] . . . . .	39
3.5.	“Cables” $p$ conectados a un conductor, caracterizados por $H_p$ y $H_C$ . El punto $p_i$ en el “cable” indica que es adyacente al punto $i$ en el conductor. Adaptado de [35] . . . . .	40
3.6.	“Cable” semi-infinito conectado a un conductor. Adaptado de [6]. . . . .	44
4.1.	El circuito es penetrado por un flujo magnético, los sitios sobre el circuito son afectados por la interacción Rashba, mientras que los “cables” conectados a la izquierda y a la derecha no. Adaptado de [28] . . . . .	51
5.1.	Coeficientes de transmisión, desde el “cable” izquierdo al derecho. . . . .	58
6.1.	Esquema del interferómetro Mach-Zehnder y micrografía de barrido electrónico del dispositivo [40]. . . . .	59
6.2.	Interferómetro electrónico Mach-Zehnder [40]. . . . .	60
6.3.	El circuito es penetrado por un flujo magnético, los dos sitios sobre las esquinas son los únicos afectados por la interacción espín-órbita, los “cables” están conectados en la entrada (izquierda) y en los detectores D1 y D2. La distancia entre sitios adyacentes es $a$ . . . . .	60

6.4.	Los “cables” están conectados en la entrada (izquierda) y en los detectores D1 y D2, en la esquina inferior. . . . .	63
7.1.	Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 1, $E/t = 1$ . . . . .	66
7.2.	Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 2, $E/t = 1$ . . . . .	67
7.3.	Asimetría para el detector 1 con $\alpha$ y $\beta$ variables para $\phi = 0,95$ , con $E/t = 1$ . . . . .	68
7.4.	Asimetría para el detector 2 con $\alpha$ y $\beta$ variables para $\phi = 0,95$ , con $E/t = 1$ . . . . .	68
7.5.	Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1, con $E/t = 1$ . . . . .	69
7.6.	Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	70
7.7.	Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con $E/t = 1$ (notar los valores de los parámetros). . . . .	70
7.8.	Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\beta$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	71
7.9.	Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\beta$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	72
7.10.	Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\alpha$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	72
7.11.	Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\alpha$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	73
7.12.	Asimetría para el detector 1, con $E/t = 1$ . Para flujos magnéticos cercanos a cero la asimetría desaparece. . . . .	74
7.13.	Asimetría para el detector 2, con $E/t = 1$ . Para flujos magnéticos cercanos a cero la asimetría desaparece. . . . .	74
7.14.	Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 1: $\alpha = -1,787$ , $\beta = 4,353$ y $\phi = 0,953$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	75
7.15.	Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 1: $\alpha = -1,787$ , $\beta = 4,353$ y $\phi = 0,953$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	76
7.16.	Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 2: $\alpha = -1,787$ , $\beta = 4,353$ y $\phi = 0,984$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	77

7.17.	Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 2: $\alpha = -1,787$ , $\beta = 4,353$ y $\phi = 0,984$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	77
7.18.	Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano: $\alpha = 1,997$ , $\beta = 0$ y $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	78
7.19.	Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano: $\alpha = 1,997$ , $\beta = 0$ y $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	79
7.20.	Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 1, $E/t = 1$ . . . . .	80
7.21.	Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 2, $E/t = 1$ . . . . .	81
7.22.	Asimetría para el detector 1 con $\alpha$ y $\beta$ variables para $\phi = 0,25$ , con $E/t = 1$ . . . . .	82
7.23.	Asimetría para el detector 2 con $\alpha$ y $\beta$ variables para $\phi = 0,25$ , con $E/t = 1$ . . . . .	82
7.24.	Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	83
7.25.	Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\beta$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	84
7.26.	Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para $\alpha$ fijo, con $E/t = 1$ . . . . .	84
7.27.	Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 1: $\alpha = 0,01$ , $\beta = 5,496$ y $\phi = 0,2565$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	85
7.28.	Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 1: $\alpha = 0,01$ , $\beta = 5,496$ y $\phi = 0,2565$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	86
7.29.	Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 2: $\alpha = 2,4$ , $\beta = 0$ y $\phi = -3,95$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	87
7.30.	Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 2: $\alpha = 2,4$ , $\beta = 0$ y $\phi = -3,95$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	87
7.31.	Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano: $\alpha = 1,997$ , $\beta = 0$ y $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	88
7.32.	Para el detector 2 en la condición de filtrado de Hatano: $\alpha = 1,997$ , $\beta = 0$ y $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	88
7.33.	Asimetría para el detector 1 en ausencia de flujo magnético, con $E/t = 1$ . . . . .	89

7.34.	Asimetría para el detector 2 en ausencia de flujo magnético, con $E/t = 1$ . . . . .	90
7.35.	Para el detector 1 en la condición de asimetría máxima en ausencia de flujo magnético; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	91
7.36.	Para el detector 2 en la condición de asimetría máxima en ausencia de flujo magnético; con el parámetro de salto $t = 1$ . . . . .	91

# Índice de cuadros

1.1.	Semiconductores típicos . . . . .	11
5.1.	Elementos matriciales . . . . .	57



# Introducción

Recientes trabajos resaltan el interés que existe en la manipulación del espín del electrón [1, 28, 31, 35], éstos forman parte del área de investigación conocida como *espíntrónica*; su principal motivación es la construcción de dispositivos, electrónicos o no, que aprovechen el espín como parte primordial de su funcionamiento.

En este trabajo se presenta un estudio sobre dispositivos propuestos para el filtraje de estados de espín. Primero deduciremos el término de acoplamiento espín-órbita partiendo de la ecuación de Dirac, luego se hallarán los hamiltonianos para gases de electrones bidimensionales con interacción espín-órbita detallando los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher derivados de dichas interacciones. Finalmente desarrollar el método Tight-Binding aplicado al circuito propuesto por Hatano et al. [28] y el interferómetro propuesto por Medina et al [1].

Se justifica el hecho de enfocarnos en el estudio de gases de electrones bidimensionales con interacción espín-órbita, Rashba y Dresselhaus, debido a que existen técnicas bien establecidas de litografía que permiten desarrollar dispositivos que trabajen bajo estas condiciones. Adicionalmente se han realizado manipulaciones de espín experimentalmente en semiconductores aprovechando la interacción espín-órbita, como es el efecto Hall de Espín [18, 38].

En este documento se sigue el siguiente esquema:

En el capítulo 1, se deduce el término de interacción espín-órbita a partir del límite no relativista de la ecuación de Dirac. Luego se hace una breve introducción a los semiconductores y los efectos de la interacción espín-órbita en ellos, donde vemos que esta interacción es notablemente más fuerte que en el vacío. Se escriben los hamiltonianos Rashba y Dresselhaus para los gases de electrones bidimensionales.

El objetivo del capítulo 2 es introducir los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher que luego serán obtenidos en la descripción del filtro de espín de Hatano [28], donde estos efectos se presentan en los gases de electrones bidimensionales bajo ciertas condiciones.

Luego en el capítulo 3 se introduce la aproximación Tight-Binding (TB) [15,20,35], como relacionar los hamiltonianos TB con sistemas abiertos mediante la definición de la autoenergía y la función de transmisión [6, 35].

Seguidamente en los capítulos 4 y 5 se desarrolla analítica y numéricamente el filtro de espín propuesto por Hatano [28,31]. Aquí se obtienen los resultados publicados. Es interesante resaltar que la propuesta de Hatano aprovecha el efecto Aharonov-Bohm y el efecto Aharonov-Casher derivado de la interacción espín-órbita en sistemas 2DEG para filtrar una componente de espín, aquí debemos mencionar que el mecanismo de Hatano se ha estudiado parcialmente y su funcionamiento no se entiende con claridad.

En el capítulo 6, se proponen dos modelos TB (simétrico y asimétrico) para el interferómetro Mach-Zender de espín [1]; posteriormente en el capítulo 7 se reflejan los resultados obtenidos para ambos modelos. Las condiciones de filtrado para estos modelos se obtienen numéricamente bajo el enfoque de la asimetría de transmisión, este enfoque es más sencillo que el propuesto por Hatano y con él se logra el filtraje efectivo de una componente de espín entre la entrada y la salida del dispositivo. También encontramos que para un arreglo asimétrico se puede prescindir del campo magnético para encontrar una condición de filtrado.

Los objetivos propuestos para este trabajo se desglosan de la siguiente manera.

## **Objetivo general**

Estudiar, mediante simulaciones y herramientas de cálculo numérico, procesos de transporte, generación y manipulación de corrientes de espín en sistemas bidimensionales.

## **Objetivos específicos**

1. Desarrollar la aproximación Tight-Binding para describir el transporte de corrientes de espín en sistemas fermiónicos restringidos a geometrías bidimensionales, considerando variaciones de la interacción espín-órbita.
2. Analizar las modificaciones introducidas al modelo anterior como: sitios sin interacción espín-órbita, ausencia de campo magnético, reflexiones y transmisiones.
3. Modelar, numericamente, los fenómenos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher, derivados del acoplamiento espín-órbita en semiconductores sin simetrías de inversión.

# Interacción Espín-Órbita en Semiconductores

Para comprender la aparición de la interacción Espín-Órbita (EO) en semiconductores, es útil derivar el origen de este término EO a partir de límite no-relativista de la ecuación de Dirac, esto es, obtener la ecuación de Pauli. La analogía nos ayudará a entender el origen y magnitud de este término y sus propiedades de simetría. Una vez hecho esto, se dará una breve introducción a los semiconductores y en especial al arseniuro de galio, su estructura de bandas y simetrías. Posteriormente se procederá a escribir los Hamiltonianos del gas bidimensional de electrones (2DEG) con las interacciones espín-órbita que nos interesan en nuestro estudio para semiconductores sin simetría de inversión, como el compuesto por arseniuro de galio/arseniuro de galio-aluminio (GaAs/AlGaAs).

## 1.1. La Ecuación de Dirac y la Ecuación de Pauli

A fin de obtener la ecuación de Pauli, primero comenzaremos con la ecuación de Dirac independiente del tiempo y se seguirá el procedimiento de las referencias [37] y [32].

La ecuación de Dirac independiente del tiempo describe la física cuántica relativista

para una partícula fermiónica, y viene dada por la expresión:

$$(c\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\Pi} + \beta m_0 c^2 + V)\psi = E\psi, \quad (1.1)$$

donde  $c$  es la velocidad de la luz en el vacío;  $\boldsymbol{\Pi}$  es el *momentum* que en presencia de un campo magnético externo  $\mathbf{B}$ , se escribe en unidades SI, como  $\boldsymbol{\Pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ , tal que  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ ;  $m_0$  es la masa de la partícula en reposo y  $V$  el potencial, además:

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix},$$

$$\beta = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2 \times 2} & 0 \\ 0 & -\mathbb{I}_{2 \times 2} \end{pmatrix},$$

en la representación de Dirac; con  $\mathbb{I}_{2 \times 2}$  la matriz identidad  $2 \times 2$  y  $\sigma^j, j = \{x, y, z\}$ , son las matrices de Pauli [33]:

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

La ecuación (1.1) la escribimos de la siguiente manera:

$$(\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\Pi})\psi = \frac{1}{c}(E - \beta m_0 c^2 - V)\psi. \quad (1.2)$$

Donde  $\psi$  es un espinor de cuatro componentes y está normalizado. A continuación reescribimos este espinor como función de dos espinores de 2 componentes,  $\psi_A$  y  $\psi_B$ :

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_A \\ \psi_B \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Haciendo uso de estas dos ecuaciones (1.2) y (1.3) y realizando el siguiente cambio:  $\tilde{E} = E - m_0 c^2$ , obtenemos las siguientes ecuaciones acopladas:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \psi_B = \frac{1}{c}(\tilde{E} - V)\psi_A, \quad (1.4)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \psi_A = \frac{1}{c}(\tilde{E} - V + 2m_0 c^2)\psi_B, \quad (1.5)$$

despejando  $\psi_B$  de (1.5) se obtiene:

$$\psi_B = \frac{c}{\tilde{E} - V + 2m_0c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi})\psi_A, \quad (1.6)$$

introduciendo este resultado (1.6) en (1.4) se tiene que:

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi}) \frac{c^2}{\tilde{E} - V + 2m_0c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi})\psi_A = (\tilde{E} - V)\psi_A. \quad (1.7)$$

A fin de obtener la ecuación de Pauli como el límite no-relativista de la ecuación de Dirac, consideramos que  $m_0c^2$  es la mayor contribución a la energía por lo que podemos realizar la siguiente expansión en serie para  $\frac{\tilde{E}-V}{2m_0c^2} \ll 1$ :

$$\frac{c^2}{\tilde{E} - V + 2m_0c^2} = \frac{\frac{1}{2m_0}}{\frac{\tilde{E}-V}{2m_0c^2} + 1} \approx \frac{1}{2m_0} \left[ 1 - \frac{\tilde{E} - V}{2m_0c^2} + \dots \right]. \quad (1.8)$$

Esta aproximación se justifica por el hecho de que:  $\frac{\tilde{E}-V}{2m_0c^2} \approx v^2/c^2 \ll 1$ , es decir, que consideramos velocidades pequeñas comparadas con la velocidad de la luz. Esto es válido en semiconductores y metales donde la velocidad de Fermi es del orden de  $10^6 m/s$ , dos órdenes menor a la velocidad de la luz. Se tomarán en cuenta los primeros dos términos de la serie (1.8) para lo que sigue. La condición de normalización para el espinor  $\psi$  exige que:

$$\int d^3r \psi^\dagger \psi = \int d^3r (\psi_A^\dagger \psi_A + \psi_B^\dagger \psi_B) = 1, \quad (1.9)$$

de la ecuación (1.6) y utilizando la aproximación (1.8) se tiene:

$$\psi_B \approx \frac{1}{2m_0c}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi})\psi_A, \quad (1.10)$$

usando (1.10) y la condición de normalización (1.9), podemos escribir:

$$1 \approx \int d^3r \left( \psi_A^\dagger \psi_A + \psi_A^\dagger \frac{1}{4m_0^2c^2}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi})^2 \psi_A \right). \quad (1.11)$$

El producto  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2$  se puede reescribir de la siguiente manera <sup>1</sup> [12, 13, 32, 33]:

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) &= \boldsymbol{\Pi}^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\boldsymbol{\Pi} \times \boldsymbol{\Pi}), \\
&= (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \times (\mathbf{p} - e\mathbf{A})], \\
&= (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [-e(\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p})], \\
&= (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot [-e(-i\hbar(\nabla \times \mathbf{A}))], \\
&= \boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B},
\end{aligned} \tag{1.12}$$

con este resultado (1.12) la condición de normalización (1.11) queda:

$$\begin{aligned}
1 &\approx \int d^3r \left( \psi_A^\dagger \psi_A + \psi_A^\dagger \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{4m_0^2c^2} \psi_A \right), \\
&\approx \int d^3r \psi_A^\dagger \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{4m_0^2c^2} \right) \psi_A.
\end{aligned} \tag{1.13}$$

Ahora, si se define una nueva función de onda de la siguiente manera:

$$\Psi \equiv \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right) \psi_A, \tag{1.14}$$

su condición de normalización implica:

$$\begin{aligned}
\int d^3r \Psi^\dagger \Psi &= \int d^3r \psi_A^\dagger \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right)^\dagger \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right) \psi_A, \\
&= \int d^3r \psi_A^\dagger \left( 1 + 2 \left( \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right) + \left( \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right)^2 \right) \psi_A, \\
&\approx \int d^3r \psi_A^\dagger \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{4m_0^2c^2} \right) \psi_A \approx 1,
\end{aligned}$$

donde hemos utilizado el resultado previo (1.13) en el último paso. Entonces se comprueba que para el límite no-relativista, la función de onda propuesta (1.14) está normalizada. Para obtener la ecuación de Pauli, sólo nos falta sustituir  $\psi_A$  en (1.7).

Para ello necesitamos despejar  $\psi_A$  de (1.14):

$$\begin{aligned}
\psi_A &= \left( 1 + \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right)^{-1} \Psi, \\
\psi_A &\approx \left( 1 - \frac{\boldsymbol{\Pi}^2 + e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}}{8m_0^2c^2} \right) \Psi, \\
\psi_A &\equiv \Omega \Psi,
\end{aligned} \tag{1.15}$$

<sup>1</sup>primero usando la siguiente propiedad:  $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b})$ .

de (1.7) tenemos hasta orden  $v^2/c^2$ :

$$\left( (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) \frac{1}{2m_0} \left[ 1 - \frac{\tilde{E} - V}{2m_0 c^2} \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) - V \right) \psi_A = \tilde{E} \psi_A. \quad (1.16)$$

Sustituyendo (1.15) en (1.16) y multiplicando por  $\Omega$  por la izquierda:

$$\Omega \left( (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) \frac{1}{2m_0} \left[ 1 - \frac{\tilde{E} - V}{2m_0 c^2} \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) - V \right) \Omega \Psi = \tilde{E} \Omega^2 \Psi,$$

de manera explícita tenemos:

$$\begin{aligned} \left( 1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{8m_0^2 c^2} \right) \left( (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) \frac{1}{2m_0} \left[ 1 - \frac{\tilde{E} - V}{2m_0 c^2} \right] (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) - V \right) \left( 1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{8m_0^2 c^2} \right) \Psi \\ = \tilde{E} \left( 1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{8m_0^2 c^2} \right)^2 \Psi = \tilde{E} \left( 1 - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{4m_0^2 c^2} \right) \Psi, \end{aligned}$$

la cual podemos reescribir de esta manera:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{2m_0} + V - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^4}{8m_0^3 c^2} + \frac{1}{8m_0^2 c^2} \left( \{ (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2, \tilde{E} - V \} - 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})(\tilde{E} - V)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}) \right) \right] \Psi \\ = \tilde{E} \Psi, \end{aligned}$$

ahora usamos la identidad  $\{A^2, B\} - 2ABA = [A, [A, B]]$ , con  $A = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}$  y  $B = \tilde{E} - V$ :

$$\begin{aligned} \left[ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{2m_0} + V - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^4}{8m_0^3 c^2} + \frac{1}{8m_0^2 c^2} \left[ \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, \tilde{E} - V] \right] \right] \Psi \\ = \tilde{E} \Psi. \quad (1.17) \end{aligned}$$

Los conmutadores que aparecen en (1.17) se resuelven de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, \tilde{E} - V] &= -\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} V + V \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, \\ &= ie\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V = -ie\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}, \quad (1.18) \end{aligned}$$

donde se usa  $\mathbf{E} = (-1/e)\nabla V$ , ya que estamos en el caso electrostático puesto que nuestra deducción parte de la ecuación de Dirac independiente del tiempo, y el vector potencial  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  sólo será función de la posición. Este resultado (1.18) nos sirve para calcular el siguiente conmutador doble:

$$\begin{aligned} [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, \tilde{E} - V]] &= [\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi}, -ie\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E}], \\ &= -e\hbar^2 \nabla \cdot \mathbf{E} - 2e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \times \mathbf{E}, \quad (1.19) \end{aligned}$$



usando  $\nabla \times \mathbf{E} = 0$ ; sustituyendo (1.19) en (1.17) se tiene:

$$\left[ \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^2}{2m_0} + V - \frac{(\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi})^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar^2 \nabla \cdot \mathbf{E}}{8m_0^2c^2} - \frac{e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \times \mathbf{E}}{4m_0^2c^2} \right] \Psi = \tilde{E} \Psi, \quad (1.20)$$

finalmente escribimos esta ecuación (1.20) usando el resultado (1.12) se obtiene la ecuación de Pauli [32]:

$$\left[ \frac{\boldsymbol{\Pi}^2}{2m_0} + V + \frac{e\hbar}{2m_0} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \times \mathbf{E}}{4m_0^2c^2} - \frac{e\hbar^2}{8m_0^2c^2} \nabla \cdot \mathbf{E} - \frac{\boldsymbol{\Pi}^4}{8m_0^3c^2} - \frac{e\hbar \boldsymbol{\Pi}^2}{4m_0^3c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{(e\hbar \mathbf{B})^2}{8m_0^3c^2} \right] \Psi = \tilde{E} \Psi. \quad (1.21)$$

El tercer término de la ecuación de Pauli es el término de Zeeman, interacción entre espín y campo magnético. El cuarto es el término de acoplamiento espín-órbita<sup>2</sup>, corresponde a la interacción que siente el electrón en movimiento en el campo eléctrico. Se puede reescribir este término de tal manera que aparezca como un electrón en un campo magnético efectivo dado por  $\mathbf{E} \times (\mathbf{v}/c)$ . El quinto se llama término de Darwin, que da origen al llamado Zitterbewegung u oscilaciones cuánticas rápidas del electrón. Los últimos términos son las correcciones a segundo orden del momento cinético<sup>3</sup> y al término de Zeeman.

## 1.2. Semiconductores

Una vez hecha la derivación de la ecuación de Pauli, vamos a proceder a hacer una breve digresión en torno a otro aspecto de relevancia para nuestro estudio, a saber, dar las ideas esenciales en la descripción de los materiales semiconductores. Luego, describiremos los efectos en los materiales semiconductores debidos al término de acoplamiento espín órbita presente en la ecuación de Pauli, y posteriormente describiremos los hamiltonianos de sistemas bidimensionales cuando existe ruptura de simetría de inversión de bulto y estructural.

<sup>2</sup>o término de Thomas [32]

<sup>3</sup>por ejemplo [32]:  $\sqrt{(m_0c^2)^2 + \boldsymbol{\Pi}^2c^2} \approx \boldsymbol{\Pi}^2/2m_0 - \boldsymbol{\Pi}^4/8m_0^3c^2$

### 1.2.1. ¿Qué es un semiconductor?

Semiconductor es el nombre dado a un grupo de materiales cuya conductividad está entre los metales y los aislantes [29]. En un aislante todas las bandas, rangos de energías permitidas para los portadores de carga, están completamente llenas o vacías; al menos una banda semillena en el caso de metales [2]. Esto lo podemos representar en un gráfico de la energía contra la densidad de niveles energéticos para un metal y un aislante, (1.1) y (1.2) respectivamente.

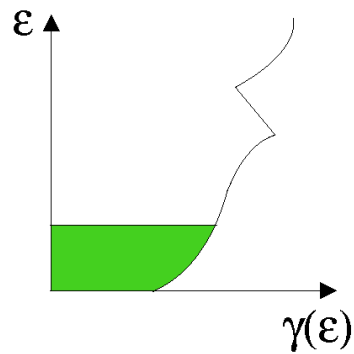


Figura 1.1: Densidad de niveles (eje horizontal) vs Energía (eje vertical) en un metal [2], la región sombreada indica los niveles ocupados por electrones.

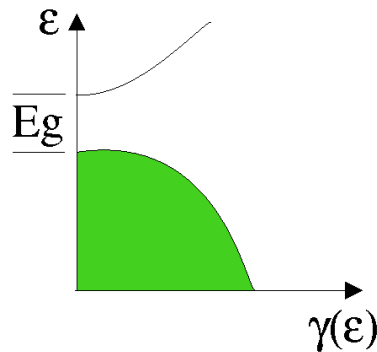


Figura 1.2: Densidad de niveles vs Energía en un aislante [2], la región sombreada indica los niveles ocupados por electrones.

Podemos caracterizar a los aislantes por la brecha de energía prohibida  $E_g$  (ver figura 1.2), que se encuentra entre la banda ocupada y la desocupada. Ahora a temperatura  $T = 0$  un sólido con una banda de energía prohibida será no conductor [2], a

Elementales	
Si	Silicio
Ge	Germanio
Compuestos	
<b>GaAs</b>	Arseniuro de Galio
<b>AlGaAs</b>	Arseniuro de Galio-Aluminio
AlP	Fosfuro de Aluminio

Cuadro 1.1: Semiconductores típicos

medida que aumentamos la temperatura existirá una probabilidad no nula de que los electrones excitados térmicamente superen esta banda prohibida y exista conducción, en este contexto decimos que los electrones pasan de la banda de valencia a la banda de conducción. Esto nos permite definir a los semiconductores como aquellos sólidos que al ser excitados térmicamente pasan de un estado aislante a un estado de conducción. En otras palabras los semiconductores son aislantes a  $T = 0$  que al ser calentados por debajo de su punto de fusión alcanzan un estado de conducción, y que la brecha de energía típica que tienen que superar los electrones para pasar a la banda de conducción no es mayor de  $2eV$  [2].

En la tabla (1.1) se presentan algunos semiconductores, en este trabajo en particular estaremos interesados en el arseniuro de galio (AsGa) y el arseniuro de galio-aluminio (AlGaAs) por ciertas propiedades que explicaremos luego.

### 1.2.2. Estructura cristalina en los semiconductores

Los sólidos pueden ser clasificados en tres tipos [29]: amorfos, cristalinos y policristalinos; en los primeros no existe un orden que predomine en el material a una escala mayor a la molecular, aquí orden significa que los átomos y/o moléculas tienen un arreglo geométrico y/o periódico particular. En los sólidos cristalinos el orden está presente en un alto nivel y se manifiesta de manera constante en todo el material. Los

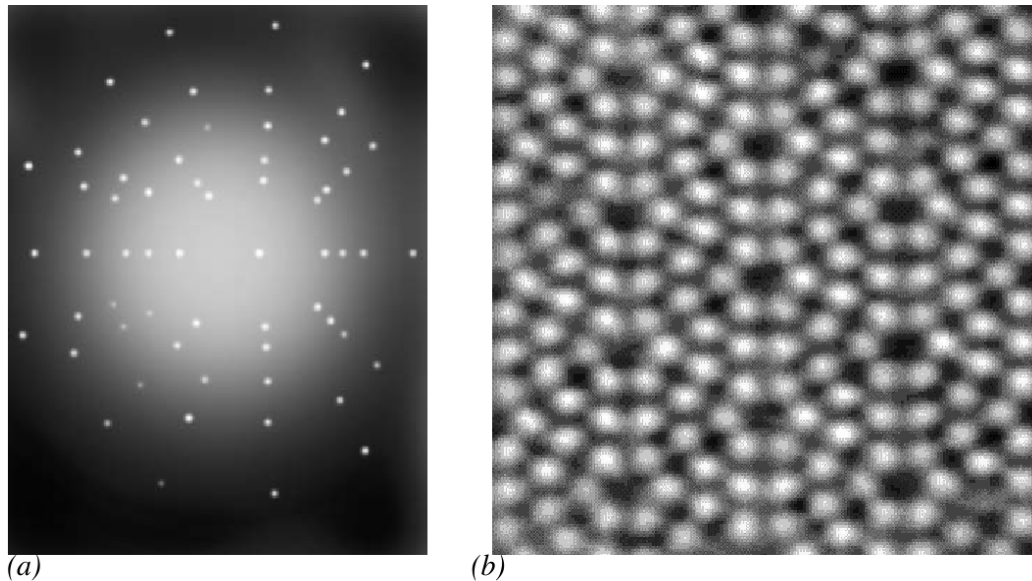


Figura 1.3: (a) Diagrama de Laue de espectroscopía de rayos X de la estructura cristalina del silicio. (b) Estructura del silicio mapeada por un microscopio de fuerza atómica [23]

policristalinos también cuentan con orden en determinadas regiones y en cada una de éstas varía de geometría y/u orientación, es decir, están a su vez diferentes cristales de cada uno con una orientación aleatoria respecto al otro [23].

La estructura cristalina de los sólidos es determinada mediante cristalografía de rayos X [23](fig. 1.3a), observando los patrones de difracción de aquellos fotones que traspasan el material, de allí se obtienen los planos de reflexión para finalmente obtener las posiciones relativas de los átomos de la red. Adicionalmente se puede usar un microscopio de fuerza atómica (fig. 1.3b) para “mapear” la fuerza ejercida por los átomos en la superficie del cristal, de estas mediciones se puede reconstruir la estructura del cristal y obtener los parámetros de la red.

### 1.2.2.1. Simetrías en cristales: invariancia traslacional discreta

Supongamos que tenemos una red cristalina bidimensional cuyos átomos están ordenados en dos direcciones  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  (fig. 1.4), se define el vector de Bravais de la

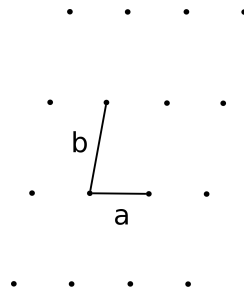


Figura 1.4: Red bidimensional, las direcciones  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$  no necesariamente son perpendiculares y las distancias  $a$  y  $b$  pueden ser diferentes.

siguiente manera:

$$\mathbf{R} = n\mathbf{a} + m\mathbf{b},$$

si tenemos  $m$  y  $n$  con valores enteros, entonces cualquier posición de la red se le puede asociar un vector de Bravais y en este caso es evidente la invariancia traslacional dado que si nos posicionamos en cualquier punto de la red podremos alcanzar otro punto moviéndonos en unidades enteras de  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{b}$ , en cada una de esas direcciones siempre veremos a una distancia  $a$ (ó  $b$ ) otro sitio (átomo). Este razonamiento puede ser extendido a tres dimensiones y por ende el vector de Bravais asociado.

### 1.2.2.2. Simetrías en cristales: invariancia rotacional

En este caso si nos colocamos en cualquier punto de la red y realizamos una rotación de la misma en múltiplos enteros de 60 ó 90 ó 180 grados y como resultado obtenemos la misma red, se dice que la red es invariante a rotaciones de 60 ó 90 ó 180 grados. Por ejemplo, la red anterior (fig. 1.4) permanece inalterada si aplicamos una rotación de 180 grados (fig. 1.5).

### 1.2.2.3. Caso concreto: Arseniuro de Galio

El arseniuro de galio se clasifica dentro del sistema cristalográfico cúbico y su estructura se llama cristal de zinc-blenda (ZnS) [23], podemos verla representada en la

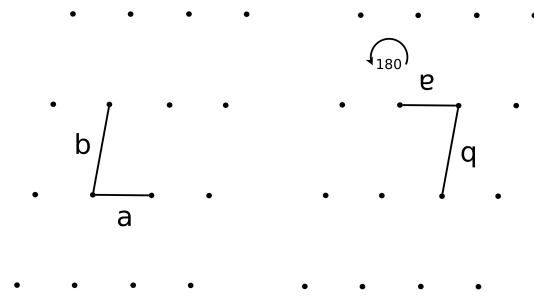


Figura 1.5: Red bidimensional invariante bajo rotaciones de múltiplos enteros de 180 grados.

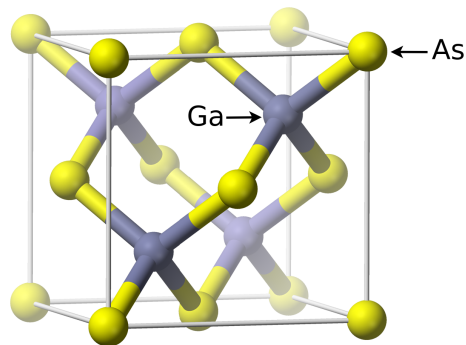


Figura 1.6: La estructura zinc-blenda del arseniuro de galio. Adaptado de [26]

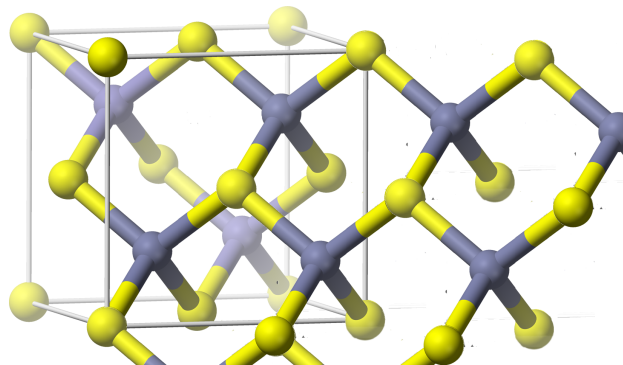


Figura 1.7: Enlaces tetrahédricos en el arseniuro de galio. Adaptado de [26]

figura (1.6). Cuando tenemos una de estas estructuras enlazada con otra, el arsénico y el galio forman la red periódica que se muestra en la figura (1.7).

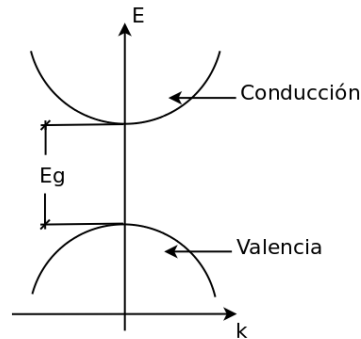


Figura 1.8: Estructura de bandas parabólicas. Basado en [37]

### 1.2.3. Estructura de bandas en los semiconductores

Anteriormente indicamos que en los semiconductores existen dos bandas relevantes en procesos de conducción, la de valencia y la de conducción, pero en realidad el esquema es un poco más complicado. El modelo más sencillo utilizado para describir las bandas es la idealización de que las bandas son parabólicas e isotrópicas de la forma [2, 37], partiendo de un modelo de electrón libre (donde sí son parabólicas):

$$E_{c/v} = \pm \left( \frac{E_g}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{c/v}^*} \right).$$

Donde  $c$  y  $v$  indican la banda de conducción y valencia respectivamente,  $\mathbf{k}$  es el vector de onda,  $E_g$  es la banda no permitida (“gap”) y  $m_c^*$  ó  $m_v^*$  la masa efectiva para las bandas de conducción y de valencia, respectivamente.

Aunque este modelo (fig. 1.8) provee cierta información sobre las propiedades electrónicas de los semiconductores, no es adecuado para caracterizar los casos en que las bandas no son parábolicas o existe separación de las bandas por acoplamiento espín-órbita [37]; para ello se introduce el llamado *método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$* .

### 1.2.3.1. Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

Este método nos permitirá calcular la estructura de bandas con precisión arbitraria alrededor de un punto de interés en el espacio recíproco [37]. Para ello primero introducimos el teorema de Bloch [2]:

**Teorema 1.** *Los autoestados  $\psi$  del hamiltoniano  $H = \mathbf{\Pi}^2/2m_0 + V_0(\mathbf{r})$ , donde  $V_0(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = V_0(\mathbf{r})$  para todo vector de Bravais  $\mathbf{R}$ , se pueden escoger de tal manera que tengan la forma del producto de una onda plana por una función periódica en  $\mathbf{R}$ :*

$$\psi_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \equiv e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | \nu\mathbf{k} \rangle, \quad (1.22)$$

donde

$$u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

para todo vector de Bravais  $\mathbf{R}$  en la red.

Usando (1.22) junto con la ecuación de Schrödinger se tiene [37]:

$$\left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | \nu\mathbf{k} \rangle = E_\nu(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | \nu\mathbf{k} \rangle, \quad (1.23)$$

$$\left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{\Pi} \right] |\nu\mathbf{k}\rangle = E_\nu(\mathbf{k}) |\nu\mathbf{k}\rangle, \quad (1.24)$$

donde aplicamos que  $V_0(\mathbf{r})$  conmuta con  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} |$ , pero  $\mathbf{\Pi}^2$  actúa sobre él como el operador diferencial  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  más  $-e\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , que es sólo función de la posición, y con  $m_0$  la masa en reposo del electron,  $V_0$  el potencial periódico en la red y  $\nu$  denota el índice de la banda. La ventaja es que ahora obtenemos una ecuación que sólo depende de la parte periódica  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  de las funciones de Bloch. Adicionalmente podríamos haber tomado en cuenta la interacción espín-órbita de la ecuación de Pauli (1.21) en la



ecuación (1.23), en ese caso se obtiene:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) - \frac{e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi} \times \mathbf{E}}{4m_0^2c^2} \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle &= E_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle, \\ \left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Pi} \times \nabla V_0 \right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle &= E_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \langle \mathbf{r} | n\mathbf{k} \rangle, \\ \left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0}{4m_0^2c^2} \right] |n\mathbf{k}\rangle &= E_n(\mathbf{k}) |n\mathbf{k}\rangle, \end{aligned} \quad (1.25)$$

donde

$$\boldsymbol{\pi} = \mathbf{\Pi} + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0,$$

y aquí la parte periódica de las funciones de Bloch  $|n\mathbf{k}\rangle$  son espinores de dos componentes. Tenemos que el índice  $n$  sirve para caracterizar simultáneamente el movimiento orbital y el grado de libertad del espín [37]. Es necesario construir una expansión en términos de la base ortonormal  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  de la ecuación 1.24 para representar las funciones  $|n\mathbf{k}\rangle$  [27]. Esto es posible porque para cada vector fijo  $\mathbf{k}_0$  los conjuntos de funciones periódicas  $|\nu\mathbf{k}_0\rangle$  y  $|n\mathbf{k}_0\rangle$  constituyen una base completa y ortonormal para 1.24 y 1.25 respectivamente; entonces procedemos a expandir las funciones  $|n\mathbf{k}\rangle$  de la siguiente manera:

$$|n\mathbf{k}\rangle = \sum_{\substack{\nu' \\ \sigma'=\uparrow,\downarrow}} c_{n\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) |\nu'\sigma'\rangle, \quad (1.26)$$

con

$$|\nu'\sigma'\rangle \equiv |\nu'0\rangle \otimes |\sigma'\rangle.$$

Ahora tenemos la ventaja de que podemos tratar la interacción espín-órbita como una pequeña perturbación, dado que podemos escribir el hamiltoniano (1.25) como función de los kets  $|\nu\mathbf{k}\rangle$ ; para ello multiplicamos<sup>4</sup>  $\langle \nu\sigma |$  por la ecuación (1.25) y usando (1.26)

---

<sup>4</sup>por la izquierda necesariamente

tenemos:

$$\begin{aligned}
& \langle \nu\sigma | \left[ \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi} + \frac{\hbar \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0}{4m_0^2 c^2} \right] \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} c_{\nu\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) |\nu'\sigma'\rangle \\
&= \langle \nu\sigma | E_n(\mathbf{k}) \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} c_{\nu\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) |\nu'\sigma'\rangle, \\
& \sum_{\sigma'=\uparrow,\downarrow} \left\{ \left[ E_{\nu'}(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right] \delta_{\nu\nu'} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{P}_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} + \Delta_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} \right\} c_{\nu\nu'\sigma'}(\mathbf{k}) \\
&= E_n(\mathbf{k}) c_{\nu\nu\sigma}(\mathbf{k}), \tag{1.27}
\end{aligned}$$

con:

$$\begin{aligned}
E_{\nu'}(\mathbf{0}) &= \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}), \\
\mathbf{P}_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} &\equiv \langle \nu\sigma | \boldsymbol{\pi} | \nu'\sigma' \rangle, \\
\Delta_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'} &\equiv \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle \nu\sigma | \mathbf{\Pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0 | \nu'\sigma' \rangle.
\end{aligned}$$

Los elementos de matriz asociados al acoplamiento espín-órbita  $\Delta_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'}$  separan los niveles energéticos a  $\mathbf{k} = \mathbf{0}$  [37], pero debido a consideraciones de simetría muchos de esos elementos son cero [16]. Los elementos fuera de la diagonal del término  $\mathbf{P}_{\nu\nu'}_{\sigma\sigma'}$  mezclan los extremos de las bandas  $|\nu\mathbf{0}\rangle$ , y si no consideramos la interacción espín-órbita nos permite introducir el concepto de la masa efectiva [16]; por ejemplo, la diagonalización de las ecuaciones acopladas (1.27) despreciando el término de acople espín-órbita nos da la relación entre la energía y el vector de onda, i.e. la estructura electrónica de bandas, y una definición para la masa efectiva<sup>5</sup> [37]:

$$E_\nu(\mathbf{k}) = E_\nu(\mathbf{0}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\nu^*},$$

con  $m_\nu^*$  la masa efectiva en la banda definida por [34, 37]:

$$\frac{m_0}{m_\nu^*} = 1 + \frac{2}{m_0} \sum_{\substack{\nu' \\ \nu \neq \nu'}} \frac{P_{\nu\nu'}^2}{E_\nu(\mathbf{0}) - E_{\nu'}(\mathbf{0})}.$$

<sup>5</sup>utilizando teoría de perturbaciones hasta segundo orden y la transformación canónica [27]

El denominador de esta suma se hace más pequeño para las bandas cercanas, por tanto, se puede realizar la siguiente aproximación, entre la banda de conducción y la banda de valencia [25, 37]:

$$\frac{m_0}{m_{c/v}^*} \approx \frac{2}{m_0} \frac{P_{c/v}^2}{E_c - E_v} = \frac{2}{m_0} \frac{P_{c/v}^2}{E_g}.$$

Entonces las masas efectivas  $m_c^* \approx m_v^*$  son proporcionales al ancho fundamental  $E_g$ ; que está entre 1 y  $2eV$ , esto nos dice que la interacción EO puede ser mayor que en el caso de Dirac (ver ec. 1.5) en un factor de  $10^6$ .

Utilizando el método demostrado en esta sección y con ayuda de la teoría de invariantes es posible construir un hamiltoniano  $14 \times 14$ , conocido como modelo de Kane extendido, para el arseniuro de galio. Sin embargo, la discusión realizada anteriormente nos permitirá caracterizar la estructura electrónica de bandas y ver los efectos del acoplamiento espín-órbita que discutiremos luego. En la figura (1.9) vemos un detalle de la estructura de bandas para el GaAs, nos interesaremos en los hamiltonianos que describen la interacción en la banda de conducción denominada  $\Gamma_{6c}$ . En esta banda  $\Delta_{\nu\nu'} = 0$ , sin embargo, para la banda de valencia  $l = 1$  y está tres veces degenerado que con la inclusión del espín, el acoplamiento espín-órbita separa estos estados y se obtiene  $j = 3/2$  para los huecos pesados (HP) y huecos ligeros (HL) y otra banda de valencia con  $j = 1/2$  [37] (ver fig.1.9).

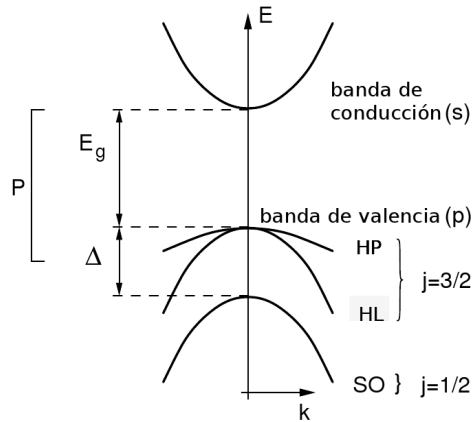


Figura 1.9: Detalle de la estructura de bandas cerca del punto  $\Gamma$  ( $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ ) para el GaAs según el modelo de Kane extendido [16, 37]. Aquí la banda de conducción mostrada se denomina  $\Gamma_{6c}$ . Adaptado de [30].

### 1.2.4. Heteroestructura Arseniuro de Galio/ Arseniuro de Galio-Aluminio GaAs/AlGaAs

El concepto de heteroestructura o heterounión proviene de acoplar dos semiconductores diferentes, por ejemplo GaAs y AlGaAs (fig. 1.10); la idea es que como dichos semiconductores tienen un ancho de banda prohibido o “gap” diferente, la banda de energía sufrirá una discontinuidad en la interfaz. Esto permite diseñar el ancho de banda prohibido, para que esto sea posible las constantes de la red entre ambos materiales no deben ser muy diferentes (para esta heteroestructura la diferencia no es mayor al 0,14 % [29]).

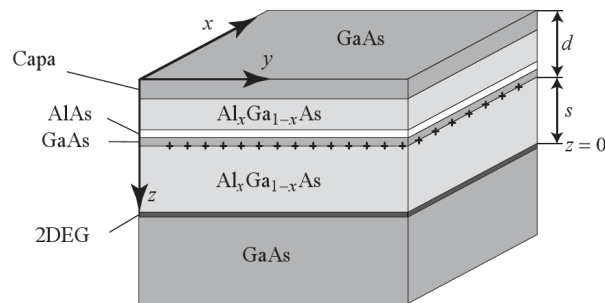


Figura 1.10: Heteroestructura GaAs/AlGaAs. El eje  $z$  es la dirección de confinamiento. Adaptado de [16].

Para esta heterounión en particular, los gaps de ambos semiconductores están centrados y uno de ellos “cabe” en el otro (ver fig. 1.11).

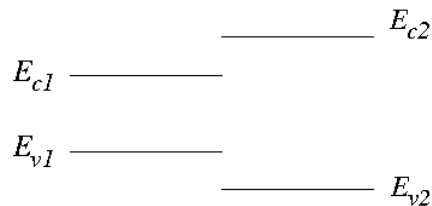


Figura 1.11: Relación entre el ancho de banda prohibido mayor y menor para el compuesto GaAs(1)/AlGaAs(2), cuando coinciden de esta manera se denomina *straddling* [29].

Entre la capa de fondo del GaAs y el  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  se forma el gas bidimensional de electrones (2DEG, ver fig. 1.10). Bajo estas condiciones se obtiene el pozo cuántico, con el requerimiento de que en la interfaz el tipo de dopaje sea el mismo para ambos semiconductores, o bien uno de ellos no esté dopado. La relación de dispersión en el pozo viene dada por:

$$E_n(k_x, k_y) = \frac{\hbar^2 n^2}{8m^* d^2} + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2).$$

Con  $m^*$  la masa efectiva y  $d$  el ancho del pozo. Esta ecuación nos sirve para definir el gas bidimensional de electrones (2DEG), que existe cuando los electrones tienen niveles de energía cuantizados en una dirección espacial (en nuestro caso el confinamiento es a lo largo de  $z$ ) pero son libres para moverse en las otras dos direcciones [29].

### 1.3. Asimetrías de inversión

En un semiconductor la degeneración de los estados de espín del electrón es causada por las simetrías bajo las operaciones de inversión del espacio y del tiempo [37], el efecto combinado de estas operaciones dejan invariante el vector de onda  $\mathbf{k}$ , mientras que cada una de ellas por separado transforma el vector  $\mathbf{k}$  en  $-\mathbf{k}$  [9]; la inversión temporal además cambia la orientación del espín [9, 16].

En otras palabras, la simetría de inversión temporal implica que el vector de onda y el espín cambian signos [27]:

$$E_+(\mathbf{k}) = E_-(-\mathbf{k}).$$

Este resultado es conocido como degeneración de Kramers [8, 37]. Adicionalmente, si se tiene simetría de inversión espacial el estado de espín permanece de  $\mathbf{k}$  a  $-\mathbf{k}$  [27]:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = E_{\pm}(-\mathbf{k}).$$

Combinando estos dos resultados se obtiene la degeneración de espín [27]:

$$E_+(\mathbf{k}) = E_-(\mathbf{k}). \quad (1.28)$$

Lo que significa que la relación de dispersión para los semiconductores con simetría de inversión<sup>6</sup> no contiene potencias impares de  $\mathbf{k}$  que separen las bandas cerca del punto  $\Gamma$ ; otra posibilidad para que no se degeneren los estados de espín es que se rompa la simetría de inversión estructural.

### 1.3.1. Asimetría de inversión de bulto (AIB) en GaAs

La estructura zinc-blenda del arseniuro de galio no tiene un centro de inversión [22] y se dice no centrosimétrico. Esto quiere decir que no posee un centro de simetría en la celda unitaria, por ende, no es posible asignar un punto en la estructura tal que al unir cada elemento con una recta y este punto se obtenga el mismo elemento al otro lado de este centro y de manera equidistante, ver figura 1.12. Cuando el material es no centrosimétrico simplemente es que no existe un punto que pueda invertir la estructura a través de una línea recta.

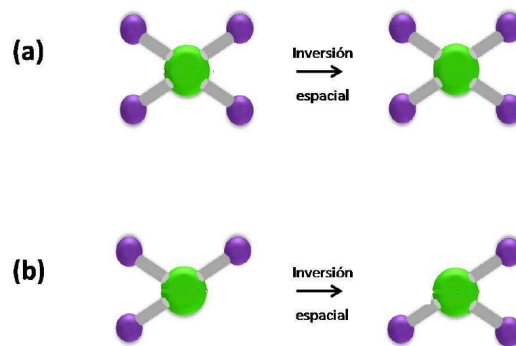


Figura 1.12: (a) configuración con simetría de inversión, (b) la operación muestra que el arreglo no tiene simetría de inversión [36].

En este sentido, la degeneración de espín (1.28) desaparece cerca del punto  $\Gamma$  y aparecerán potencias pares e impares de  $\mathbf{k}$  aún en ausencia de campo magnético. Este

<sup>6</sup>centrosimétricos

efecto ocurre en el bulto de los semiconductores y es conocido como efecto Dresselhaus [8] o asimetría de inversión de bulto (AIB) [27, 37]. Para este caso en contraste con (1.28) tenemos:

$$E_+(\mathbf{k}) \neq E_-(\mathbf{k}).$$

La no degeneración de los estados la podemos representar gráficamente en la figura 1.13. A cada estado de espín le corresponde una energía diferente dada por su relación de dispersión.

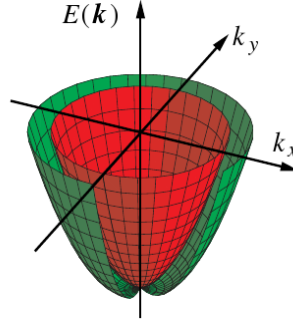


Figura 1.13: Relación de dispersión para dos estados de espín diferentes,  $E_-(\mathbf{k})$  (paraboloide exterior) y  $E_+(\mathbf{k})$ . La separación de bandas es debido a la ruptura de la simetría de inversión. Adaptado de [30].

### 1.3.1.1. AIB para la banda de conducción $\Gamma_{6c}$ del GaAs

Usando el modelo de Kane extendido apoyado en el método  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  y la teoría de perturbaciones es posible escribir el hamiltoniano Dresselhaus para la banda de conducción  $\Gamma_{6c}$  [14, 16, 17, 25, 27, 30, 34, 37]:

$$H_D^{(3d)} \equiv \mathfrak{B}[k_x(k_y^2 - k_z^2)\sigma_x + \text{p.c.}].$$

Donde se indica que es el hamiltoniano en tres dimensiones y p.c. se entiende como los términos que resulten de las permutaciones cíclicas de los subíndices de  $k$  y  $\sigma$ . El valor de la constante  $\mathfrak{B}$  para el arseniuro de galio es [37]:

$$\mathfrak{B} = 27,58 \text{ eV}\text{\AA}^3.$$

Cuando el sistema es cuasi-bidimensional<sup>7</sup>, 2DEG, con confinamiento en  $z$  (dirección [001]) [14, 17, 30, 37] podemos promediar en la dirección de confinamiento:

$$\begin{aligned}\langle k_z \rangle &= 0, \\ \langle k_z^2 \rangle &\approx (\pi/d)^2, \\ \beta &\approx -\mathfrak{B}(\hbar\pi/d).\end{aligned}$$

Donde  $\beta$  aumenta mientras sea más pequeño el confinamiento  $d$ . Finalmente obtenemos la contribución AIB para el sistema cuasi-bidimensional [14, 17, 30, 37]:

$$H_D^{(2D)} \equiv \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y) + \mathcal{O}(k^3), \quad (1.29)$$

donde los términos de orden cúbico  $\mathfrak{B}k_xk_y(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y)$  son despreciables comparados con las contribuciones lineales en  $k$  de (1.29) cuando el confinamiento es fuerte  $\pi/d \gg k_F$ , con  $k_F$  el vector de onda de Fermi [14].

### 1.3.2. Asimetría de inversión de estructura

Otra manifestación de la separación de los estados de espín en los semiconductores, aparte de AIB, es la asimetría de inversión de estructura (AIE) [14, 37]. Ésta se produce cuando el potencial de confinamiento  $V(z)$  a lo largo del eje  $z$  es asimétrico [9, 14]. El término de acoplamiento espín-órbita de la ecuación de Pauli (1.21) nos da una relación explícita con el potencial:

$$H_{\text{SO}} = -\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Pi} \times \mathbf{E} = \frac{e\hbar^2}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} \times \nabla V = \frac{e\hbar^2}{4m_0^2c^2}\nabla V \cdot \mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma},$$

para el caso cuasi-bidimensional, obtenemos el que se denomina hamiltoniano Rashba [14, 37]:

$$H_R^{(2D)} \equiv \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y),$$

---

<sup>7</sup>caso pozo cuántico



aquí la constante  $\alpha$  es proporcional a la componente  $z$  del campo eléctrico para nuestro sistema y es ajustable debido a que es posible controlar la intensidad del campo aplicando un voltaje de compuerta en la cara plana de la estructura de la figura 1.10. Finalmente, si tomamos en cuenta las dos interacciones, Rashba y Dresselhaus, podemos escribir el hamiltoniano como [29]:

$$H_{\text{R-D}}^{(2\text{DEG})} \equiv \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) + \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y). \quad (1.30)$$

# Capítulo 2

## Efecto Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher

En este capítulo trataremos dos efectos cuánticos importantes en los cuales la función de onda una partícula adquiere una fase bajo las siguientes condiciones: si es una partícula cargada moviéndose alrededor de un solenoide infinito que produce un flujo magnético en su interior [5, 39] o si es una partícula con momento magnético moviéndose alrededor de una línea infinita de carga uniforme [39].

### 2.1. Efecto Aharonov-Bohm

En electrodinámica clásica los potenciales eléctrico y magnético ( $\phi$  y  $\mathbf{A}$ ) son cantidades que no se pueden medir directamente [7], las cantidades físicas son el campo eléctrico y magnético:

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad (2.2)$$

y se verifica que  $\phi$  y  $\mathbf{A}$  no son únicos ya que pueden ser cambiados por medio de la transformación de calibre [5, 7, 24]:

$$\phi \rightarrow \phi - \frac{1}{c} \frac{\partial \chi}{\partial t}, \quad (2.3)$$

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla \chi, \quad (2.4)$$

donde  $\chi$  es una función arbitraria del espacio y del tiempo [7], y estos nuevos potenciales (2.3),(2.4) no cambian los campos eléctrico (2.1) y magnético (2.2). Entonces clásicamente el único efecto físico de un campo electromagnético sobre una carga es la fuerza de Lorentz<sup>1</sup> [24]:

$$\mathbf{F} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} \mathbf{v} \times \mathbf{B} \right),$$

con  $\mathbf{v}$  la velocidad de la partícula con carga  $q$ . Esta fuerza sólo existe en regiones donde  $\mathbf{E}$  y/o  $\mathbf{B}$  son diferentes de cero. En mecánica cuántica esto no es necesariamente así, pueden ocurrir efectos físicos aún cuando  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{B}$  son nulos pero el potencial magnético  $\mathbf{A}$  no [24]. En 1959 Aharonov y Bohm demostraron que el potencial magnético puede cambiar el comportamiento cuántico de una partícula cargada aún cuando se mueve en una región donde el campo es cero [7]. Mediante el siguiente procedimiento obtendremos este efecto, tal como se obtuvo en las referencias [5, 24].

Un experimento popular en mecánica cuántica es el experimento de doble rendija con electrones (ver fig. 2.1). Debido a la naturaleza ondulatoria del electrón se produce un patrón de interferencia característico [24]. Si la longitud de onda del electrón es  $\lambda$ , la diferencia de fase entre las ondas de las dos rendijas es:

$$\delta = 2\pi \frac{a}{\lambda}.$$

Si  $x \ll L$ , entonces  $a \approx (x/L)d$  y la diferencia de fase queda:

$$\delta = 2\pi \frac{x d}{L \lambda}. \quad (2.5)$$

Los máximos ocurren cuando  $\delta = 2n\pi$  y los mínimos en  $(2n + 1)\pi$ , y se obtiene el patrón de interferencia (ver fig. 2.1).

---

<sup>1</sup>en unidades CGS

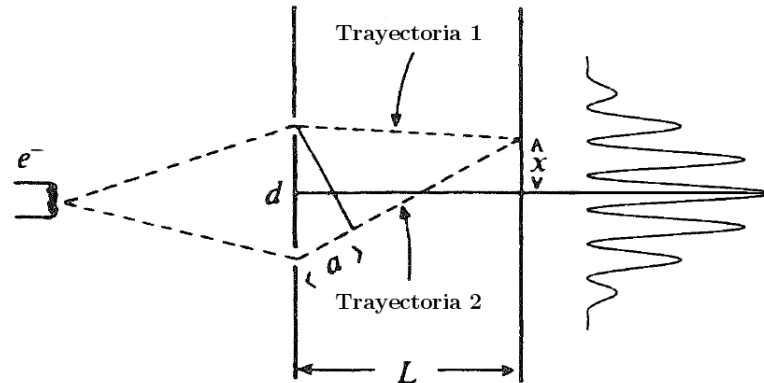


Figura 2.1: Experimento de doble rendija con electrones. Adaptado de [5, 24].

Ahora supongamos que tenemos un solenoide infinito a lo largo del eje  $z$  con radio  $b$  en el plano  $x-y$  (ver fig. 2.2) con flujo magnético  $\Phi_B = \pi b^2 B_z$ , donde el campo magnético  $\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$  existe solamente en el interior del solenoide. Cabe destacar que  $b$  es lo suficientemente pequeño para que el campo esté localizado de manera tal que el haz de electrones no interactúa con él.

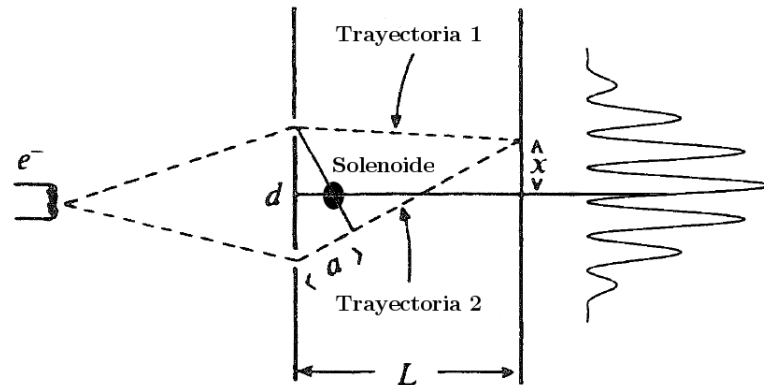


Figura 2.2: Efecto Aharonov-Bohm. Adaptado de [5, 24].

El vector potencial en coordenadas cilíndricas lo podemos escribir como [5]:

$$A_\phi = \begin{cases} \frac{rB_z}{2}, & r < b \\ \frac{\Phi_B}{2\pi r}, & r > b \end{cases},$$

Donde las otras componentes son cero,  $A_r = 0$  y  $A_z = 0$ . El hamiltoniano clásico para la región externa al solenoide es [5]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \\ &= \frac{1}{2m} \left[ p_r^2 + \frac{1}{r^2} \left( p_\phi - \frac{e\Phi_B}{2\pi c} \right)^2 + p_z^2 \right]. \end{aligned}$$

La siguiente transformación canónica [5]:

$$p_\phi \rightarrow p_\phi - \frac{e\Phi_B}{2\pi c},$$

elimina el término de flujo magnético del hamiltoniano y esto nos dice que el solenoide no influye en el movimiento de la carga cuando está fuera de él [5]. En el régimen cuántico la situación es diferente, bajo las mismas condiciones  $\mathbf{B} = \mathbf{0}$  y  $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$  se puede demostrar que la función de onda  $\psi$  [32]:

$$\psi = \psi_0 \exp \left[ \frac{ie}{hc} \int_{\mathcal{O}}^{\mathbf{r}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}' \right], \quad (2.6)$$

es solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo<sup>2</sup>:

$$\frac{1}{2m} \left[ \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 \psi = E\psi \quad (2.7)$$

y  $\psi_0$  es la solución de (2.7) cuando  $\mathbf{A} = \mathbf{0}$ . En (2.6) se escoge un origen  $\mathcal{O}$  para el camino arbitrario hasta  $\mathbf{r}$ . La ecuación (2.6) sólo tiene sentido si  $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{0}$  fuera del solenoide, que es nuestro caso, sino la integral de línea dependería del camino escogido [7]. Retornando a la descripción del experimento (ver fig. 2.2) y tomando en

---

<sup>2</sup>con el potencial  $V = 0$

cuenta (2.6), el cambio en la fase para las trayectorias 1 y 2 es [5, 24, 32]:

$$\begin{aligned}
 \Delta\delta &= \frac{e}{hc} \int_1 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} - \frac{e}{hc} \int_2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \\
 &= \frac{e}{hc} \oint_{2-1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} \\
 &= \frac{e}{hc} \int_{2-1} \nabla \times \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} \\
 &= \frac{e}{hc} \int_s \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} \\
 &= \frac{e}{hc} \Phi_B
 \end{aligned}$$

Esta diferencia de fase cambia la posición  $x$  de los máximos y mínimos (2.5) de la siguiente manera [24](ver fig. 2.2):

$$\delta x = \frac{L\lambda}{2\pi d} \Delta\delta = \frac{L\lambda}{2\pi d} \frac{e}{hc} \Phi_B,$$

por tanto, a nivel cuántico vemos que aún en regiones donde no existe campo magnético el hecho de que el potencial magnético sea diferente de cero provoca un cambio en la función de onda del electrón mediante una fase.

## 2.2. Efecto Aharonov-Casher

Este fenómeno puede ser visto como el efecto “dual” al efecto Aharonov-Bohm, donde cambiamos la carga de la partícula por el momento magnético y el solenoide por una línea con densidad constante de carga [39].

Ahora tenemos una línea de carga en el eje  $z$  (ver fig. 2.3) bajo esta condición el campo eléctrico estático que reside en el plano  $x$ - $y$  es:

$$\mathbf{E}(x, y) = \frac{Q}{2\pi r^2}(x, y).$$

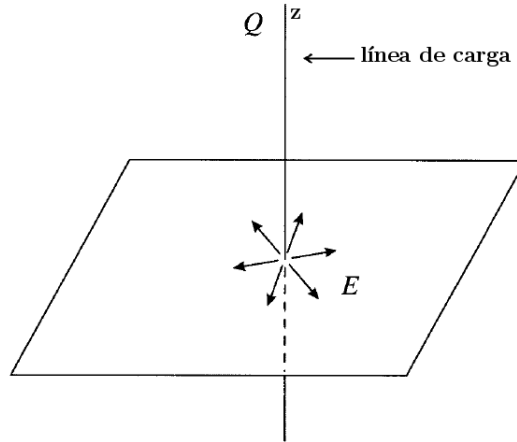


Figura 2.3: Línea con densidad constante de carga. Adaptado de [5].

Una partícula con espín  $1/2$  tiene el siguiente momento magnético:

$$\mu_s = \frac{2\mu}{\hbar} \boldsymbol{\sigma},$$

con  $\mu = e\hbar/2m_e c$  el magnetón de Bohr, donde  $m_e$  es la masa del electrón. En este caso el hamiltoniano no relativista es [39]:

$$H = \frac{(\boldsymbol{\Pi} + \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{E})^2}{2m} - \frac{\mu^2 E^2}{2m}.$$

Ahora si la partícula neutra se mueve en una trayectoria cerrada en el plano perpendicular a la línea de carga, ésta adquiere la fase [39]:

$$\phi_{AC} = \frac{1}{\hbar c} \oint \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{E} \cdot d\mathbf{r}.$$

De igual manera, en este caso la fuerza de Lorentz es cero. Ambos efectos, Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher, pueden ser vistos como efectos de “fuerza nula” [39].

# Capítulo 3

## Método Tight-Binding

Supongamos que tenemos un electrón y un átomo libre con potencial  $V_a(r)$ , tal que se satisface la ecuación de Schrödinger [20]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_a(r) \right] \phi(r) = E_a \phi(r),$$

donde  $E_a$  representan los niveles de energía atómica de este electrón. Cuando los átomos forman un cristal, los potenciales de los átomos individuales se solapan (ver fig. 3.1). En el método tight-binding, se asume que el electrón alrededor de la celda unitaria  $R_j$  solamente es afectado por el átomo localizado en  $R_j$  [20].

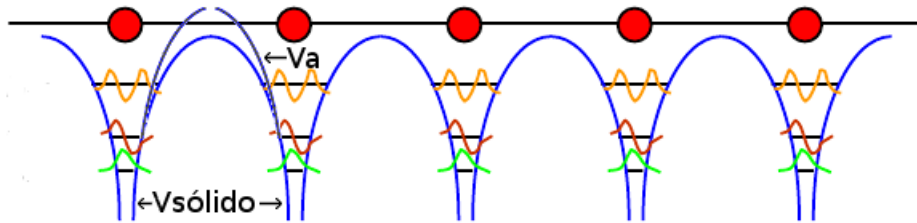


Figura 3.1: Potencial tight-binding. Adaptado de [17,20]

Esta aproximación tiene sentido cuando el traslape de las funciones de onda atómicas es tal que se requieren correcciones para el caso del átomo aislado, pero no tanto



como para descartar completamente la descripción atómica [2].

En este caso, la función de onda en la celda será cercana a la función de onda atómica  $\phi(r - R_j)$ , y su energía  $E_a$ . Entonces, se puede realizar una combinación lineal de orbitales atómicos como un intento para describir la función de onda en el sólido [2, 20, 22]:

$$\psi_k(r) = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \phi(r - R_j),$$

y se puede probar que esta nueva función de onda satisface el teorema de Bloch [2, 20, 22].

### 3.1. Hamiltoniano Tight-Binding en segunda cuantización

Nos basaremos en la referencia [20] para obtener el hamiltoniano en términos de los operadores de creación y destrucción.

Supongamos que un sistema de electrones libres es descrito por el siguiente hamiltoniano [20]:

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k c_k^\dagger c_k, \quad (3.1)$$

con  $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ , la energía cinética. Bajo la influencia de un potencial periódico  $V(r) = \sum_K V_K e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ , podemos escribir la energía potencial de los electrones como:

$$H' = \sum_{k,K} V_K c_{k+K}^\dagger c_k. \quad (3.2)$$

Los operadores que crean y destruyen electrones en el sitio  $\mathbf{R}_n^0$ ,  $c_n^\dagger$  y  $c_n$ , se definen a través de:

$$c_n \equiv \frac{1}{N^{1/2}} \sum_k c_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n^0},$$

con la transformación inversa:

$$c_k \equiv \frac{1}{N^{1/2}} \sum_n c_n e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_n^0}. \quad (3.3)$$

Estos operadores cumplen la relación de anticonmutación que describe a fermiones:  $\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'}$  [11]. Ahora sí sustituimos esta definición(3.3) en el hamiltoniano (3.1), obtenemos:

$$H_0 = \sum_{nm} T_{nm} c_n^\dagger c_m, \quad (3.4)$$

definiendo  $T_{nm}$  como:

$$T_{nm} \equiv \frac{1}{N} \sum_k \varepsilon_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_m^0)}.$$

Regresando al hamiltoniano (3.2), si usamos (3.3) obtenemos:

$$\begin{aligned} H' &= \sum_{k,K} V_K \frac{1}{N} \sum_{nm} c_n^\dagger e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}) \cdot \mathbf{R}_n^0} c_m e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_m^0} \\ &= \sum_{Knm} \left[ \sum_k \frac{1}{N} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_m^0)} \right] V_K e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_n^0} c_n^\dagger c_m, \end{aligned}$$

dado que  $\frac{1}{N} \sum_k e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_n^0 - \mathbf{R}_m^0)} = \delta_{nm}$ , entonces:

$$H' = \sum_{K,n} V_K e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_n^0} c_n^\dagger c_n, \quad (3.5)$$

pero  $\sum_K V_K e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_n^0} = V(R_n^0)$ , por tanto (3.5) queda:

$$H' = \sum_n V(R_n^0) c_n^\dagger c_n. \quad (3.6)$$

Sumando ambos hamiltonianos  $H_0$ (3.4) y  $H'$ (3.6), finalmente obtenemos la representación, en segunda cuantización, del hamiltoniano tight-binding:

$$\begin{aligned} H &= \sum_n (T_{nn} + V(R_n^0)) c_n^\dagger c_n + \sum_{n \neq m} T_{nm} c_n^\dagger c_m \\ &= \sum_n \varepsilon_n c_n^\dagger c_n + \sum_{n \neq m} T_{nm} c_n^\dagger c_m, \end{aligned}$$

donde  $\varepsilon = T_{nn} + V(R_n^0)$ , es la energía del sitio  $n$  y  $T_{nm}$  es el término de salto (“hopping”) del sitio  $m$  al  $n$ .

### 3.2. Diferencias Finitas

En esta sección usaremos el procedimiento descrito en las referencias [35], [6] y [15] para discretizar el hamiltoniano de la ecuación de Schrödinger mediante el enfoque de las diferencias finitas.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo en una dimensión se escribe como [10]:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (3.7)$$

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

La idea consiste en escribir el operador diferencial  $H$ , i.e. el hamiltoniano, discretizando la coordenada continua  $x$  como una serie de puntos equiespaciados  $na$ , con  $n$  entero [15, 35]:

$$\psi_n \rightarrow \psi(x = na) \quad (3.8)$$

$$V_n \rightarrow V(x = na) \quad (3.9)$$

$$\Delta x \rightarrow (n+1)a - na = a,$$

y escribir las derivadas como diferencias [6, 15, 35]:

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d}{dx} \psi(x) \right]_{x=na} &\rightarrow \frac{1}{a} [\psi_{n+1} - \psi_n] \\ \left[ \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) \right]_{x=(n+\frac{1}{2})a} &\rightarrow \frac{1}{a} \left\{ \left[ \frac{d}{dx} \psi(x) \right]_{x=(n+\frac{1}{2})a} - \left[ \frac{d}{dx} \psi(x) \right]_{x=(n-\frac{1}{2})a} \right\} \\ &\rightarrow \frac{1}{a^2} \{ \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} \} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Se supone que  $a$  es muy pequeño [35], en otras palabras, las funciones  $\psi(x)$  y  $V(x)$  varían muy lentamente en el entorno  $\Delta x$  [6]. Usando (3.10) junto con (3.8) y (3.9) podemos reescribir (3.7) como:

$$[H\psi(x)]_{x=na} = \left[ -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \{ \psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1} \} + V_n \right], \quad (3.11)$$

es posible desarrollar la ecuación (3.11) de forma matricial usando [6, 35]:

$$\begin{aligned}
 [H\psi(x)]_{x=na} &= \sum_m H_{mn}\psi_n && \text{donde:} \\
 H_{mn} &= V_n + 2t_0 && \text{si } m = n \\
 &= -t_0 && \text{si } |m - n| = 1, \text{ son primeros vecinos} \\
 &= 0 && \text{en cualquier otro caso,}
 \end{aligned} \tag{3.12}$$

donde:

$$t_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2},$$

finalmente obtenemos la siguiente representación matricial para  $H$  [6, 35]:

$$H = \begin{bmatrix} \cdots & -t_0 & 0 & 0 & 0 \\ -t_0 & V_{-1} + 2t_0 & -t_0 & 0 & 0 \\ 0 & -t_0 & V_0 + 2t_0 & -t_0 & 0 \\ 0 & 0 & -t_0 & V_1 + 2t_0 & -t_0 \\ 0 & 0 & 0 & -t_0 & \cdots \end{bmatrix},$$

y los autoestados [15]:

$$\psi = \begin{bmatrix} \vdots \\ \psi_{-1} \\ \psi_0 \\ \psi_1 \\ \vdots \end{bmatrix}.$$

Concluimos que los sitios vecinos están conectados a través del término de salto  $t_0$  y  $V_0 + 2t_0$  es la energía en el sitio, resultados similares obtuvimos en la sección anterior bajo otras suposiciones.

### 3.3. Funciones de Green y Autoenergía

Como vimos anteriormente, la aproximación tight-binding nos permite escribir el hamiltoniano en una base de “posiciones”, en esta sección se desarrollará un método a partir de las funciones de Green y la definición de la autoenergía para introducir los efectos de los contactos en un conductor, esto supone tomar en cuenta la interacción de los cables con el sistema (ver fig. 3.2). La utilidad está en que podremos “conectar” el sistema cerrado descrito por la aproximación tight-binding junto con un sistema “abierto” compuesto de “cables”. Además este método de las autoenergías es importante porque mediante él podemos hallar la transmisión entre dos o más contactos que se conecten a un sistema.

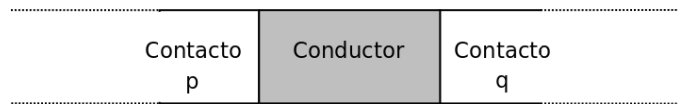


Figura 3.2: “Cables”  $p$  y  $q$  conectados a un conductor.

En general, en mecánica cuántica se utiliza la matriz de “scattering” que considera las amplitudes reflejadas y transmitidas parcialmente para obtener la respuesta de una excitación en  $q$  dada en  $p$  (por ejemplo ver fig. 3.2). Sin embargo, la función de Green es un concepto más poderoso que la matriz de “scattering” puesto que nos da la respuesta en cualquier punto, dentro o fuera del conductor, debido a una excitación en otro punto [35]. Para nuestro estudio, consideraremos el transporte sin interacciones fonón-fonón ni electrón-electrón y, en este caso, el formalismo de las funciones de Green resulta innecesario [35] pero a la vez simplifica el cálculo de las transmisiones, como veremos en la próxima sección. Seguiremos el método explicado en las referencias [35] y [6] para dar una breve introducción a las funciones de Green.

En el caso en que una respuesta  $R$  puede ser relacionada a la excitación  $S$  a través de

un operador diferencial  $\mathcal{D}$  como sigue

$$\mathcal{D}R = S,$$

se puede definir una función de Green

$$G \equiv \mathcal{D}^{-1},$$

tal que:

$$R = GS.$$

Por ejemplo para la ecuación de Schrödinger (3.7), con potencial constante  $V(x) = V_0$ , la función de Green es:

$$G = \left[ E + V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right]^{-1},$$

por tanto:

$$\left( E + V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) G(x, x') = \delta(x - x'). \quad (3.13)$$

Que se parece a la ecuación de Schrödinger excepto por el término de fuente  $\delta(x - x')$ , que representa ahora “un pulso unitario”:

$$\left( E + V_0 + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \right) \psi(x) = 0. \quad (3.14)$$

Entonces si comparamos, 3.13 con 3.14 podemos ver a la función de Green  $G(x, x')$  como una función de respuesta en  $x$  como resultado de una excitación unitaria en  $x'$  [35]. Físicamente se espera que debido a tal excitación se generen dos ondas propagándose en direcciones opuestas con amplitudes  $A^+$  y  $A^-$  (ver fig. 3.3). En este caso hablamos de la función de Green retardada.

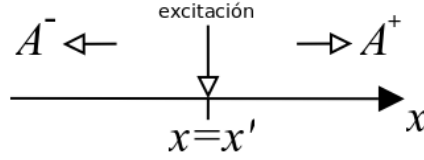


Figura 3.3: Esquema de la función de Green retardada en una dimensión. Adaptado de [35]

También existe otra solución, la cual describe la situación en que dos ondas entrantes desaparecen en el punto de excitación, corresponde a la función de Green avanzada.

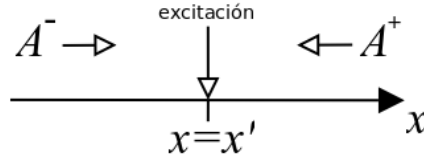


Figura 3.4: Esquema de la función avanzada de Green en una dimensión. Adaptado de [35]

Denotando con  $G^R$  y  $G^A$  la función de Green retardada y adelantada, respectivamente, se puede demostrar que [35]:

$$G^A = (G^R)^*. \quad (3.15)$$

De ahora en adelante denotaremos simplemente con la letra  $G$  a la función de Green retardada  $G^R$  (y la llamaremos función de Green), y (3.15) nos permite obtener la función de Green adelantada  $G^A$ .

Para poder resolver una ecuación diferencial a través de funciones de Green es necesario incluir las condiciones de contorno del problema, para ello se puede demostrar que para integrar estas condiciones se requiere añadir una parte infinitesimal  $\eta$  a la función de Green [35], tal que:

$$G = [E - H + \eta]^{-1}, \quad (3.16)$$

donde  $\eta \rightarrow 0^+$ . Anteriormente vimos que el hamiltoniano via diferencias finitas lo podemos escribir en representación matricial, para este caso (3.16) queda [35]:

$$G = [(E + i\eta)\mathbb{I} - H]^{-1},$$

el problema está en que debemos invertir una matriz infinito dimensional para obtener la función de Green, debido a que los “cables” son sistemas abiertos [6,21,35]. La idea consiste en truncar la matriz en determinado sitio donde se describa el sistema cerrado contando con el efecto de los contactos, para ello seguimos el procedimiento indicado en [6,35].

Supongamos que tenemos un conductor conectado solamente a un contacto  $p$  (ver fig. 3.5), ahora particionamos la representación matricial de la función de Green total en submatrices que describan a las funciones de Green para el conductor aislado ( $G_C$ ) y el “cable” aislado ( $G_p$ ):

$$\begin{bmatrix} G_p & G_{pC} \\ G_{pC} & G_C \end{bmatrix} \equiv \begin{bmatrix} (E + i\eta)\mathbb{I} - H_p & \tau_p \\ \tau_p^\dagger & E\mathbb{I} - H_C \end{bmatrix}^{-1}, \quad (3.17)$$

donde, la matriz  $G_p = [(E + i\eta)\mathbb{I} - H_p]$  representa el “cable” aislado, mientras que  $G_C = [E\mathbb{I} - H_C]$  será la correspondiente al conductor aislado<sup>1</sup>. La matriz de acoplamiento  $\tau$  es diferente de cero solamente para los puntos adyacentes  $i$  y  $p_i$  (ver fig. 3.5):

$$\tau_p(p_i, i) = t \quad (3.18)$$

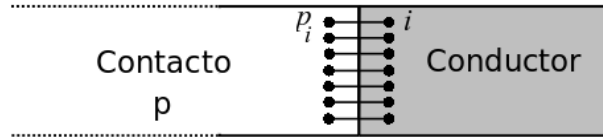


Figura 3.5: “Cables”  $p$  conectados a un conductor, caracterizados por  $H_p$  y  $H_C$ . El punto  $p_i$  en el “cable” indica que es adyacente al punto  $i$  en el conductor. Adaptado de [35]

<sup>1</sup>No es necesario añadir el término infinitesimal ( $i\eta$ ) [35]



Como estamos interesados en encontrar una expresión para la función de Green del conductor, resolvemos (3.17) para  $G_C$ :

$$G_C = [E\mathbb{I} - H_C - \tau_p^\dagger g_p \tau_p]^{-1}, \quad (3.19)$$

con  $g_p$  la función de Green (retardada) para el “cable” semi-infinito aislado:

$$g_p = [(E + i\eta)\mathbb{I} - H_p]^{-1}. \quad (3.20)$$

En (3.19) las matrices son finitas dependiendo del número de puntos considerados dentro del conductor, las contribuciones del cable infinito están tomadas en cuenta en  $\tau_p^\dagger g_p \tau_p$ , ahora para obtener  $g_p$  pareciera que hay que invertir una matriz infinita (3.20), sin embargo, esto no es necesario porque en general la función de Green para el contacto aislado puede obtenerse analíticamente [6, 35].

Ahora si hacemos uso de la ecuación 3.18 junto con  $\tau_p^\dagger g_p \tau_p$  obtenemos:

$$\Sigma_p(i, j) \equiv t^2 g_p(p_i, p_j),$$

y  $\Sigma$  la definimos como la autoenergía (retardada), que toma en cuenta los efectos del “cable”  $p$ . Sí asumimos que tenemos varios “cables” independientes, por lo que sus efectos son aditivos, tenemos que la autoenergía de tal sistema de “cables” será [6, 35]:

$$\Sigma \equiv \sum_p \Sigma_p. \quad (3.21)$$

Finalmente obtenemos para la función del Green del conductor (3.19), usando (3.21):

$$G_C = [E\mathbb{I} - H_C - \Sigma]^{-1}.$$

El concepto de la autoenergía es bastante útil porque describe las condiciones de contorno impuestas por los contactos sobre el sistema considerado, y una vez obtenida ella, sólo nos resta hallar la función de Green del conductor (3.19), que requiere la inversión de una matriz finita y puede ser calculada numéricamente. Simplemente, la autoenergía  $\Sigma$  puede verse como un hamiltoniano efectivo que toma en cuenta exactamente la interacción del conductor con los “cables” [35], enfatizando que hasta ahora

no se ha hecho ninguna aproximación para obtener la expresión de la autoenergía. En la próxima sección veremos cómo la función de Green sirve para calcular la transmisión, pero primero discutiremos el concepto de la matriz de ensanchamiento<sup>2</sup> que se define como [6]:

$$\Gamma \equiv i[\Sigma - \Sigma^\dagger].$$

La traza de esta matriz es proporcional al inverso del tiempo de vida de los estados [6]; ahora podemos escribir la suma del hamiltoniano del conductor más los efectos de los “cables” en función de  $\Gamma$  y su contraparte hermítica  $\Sigma_H$ :

$$H_C + \Sigma = \left\{ H_C + \frac{1}{2}[\Sigma + \Sigma^\dagger] \right\} - \frac{i\Gamma}{2} = \{H_C + \Sigma_H\} - \frac{i\Gamma}{2},$$

donde se puede ver que la matriz hermítica  $\Sigma_H$  es una corrección al hamiltoniano  $H_C$  y la matriz  $\Gamma$  describe el acoplamiento del “cable” con el conductor [35] y el ensanchamiento de la densidad de estados<sup>3</sup> [6].

### 3.4. Función de Transmisión, fórmula de Fisher-Lee

En la sección anterior se introdujeron los conceptos de función de Green, autoenergía y matriz de ensanchamiento; aquí los utilizaremos para definir la función de transmisión entre dos contactos  $p$  y  $q$  conectados a un conductor (ver fig. 3.2):

$$\bar{T}_{pq} = \text{Tr}[\Gamma_p G \Gamma_q G^\dagger], \quad (3.22)$$

la cual nos da la rata en la cual los electrones son transmitidos desde el contacto con la fuente al contacto con el sumidero, debido a su propagación a través del conductor [6]; en otras palabras, nos da la “facilidad” con la cual los electrones pueden pasar a través del conductor, de esta manera, la corriente es proporcional a la función de transmisión [35]. Este resultado proviene de relacionar la transmisión amparada en

---

<sup>2</sup>del inglés *broadening matrix* [6]

<sup>3</sup>o el inverso del tiempo de vida de los estados [6]

la matriz de “scattering” y el formalismo de las funciones de Green [4, 6, 15, 35], a la ecuación (3.22) la llamaremos fórmula de Fisher-Lee. Se puede demostrar que la función de transmisión es real:

$$\begin{aligned}\bar{T}_{pq}^* &= \text{Tr} \left\{ \left[ \Gamma_p G \Gamma_q G^\dagger \right]^\dagger \right\} = \text{Tr} \left[ G \Gamma_q^\dagger G^\dagger \Gamma_p \right] \\ &= \text{Tr} \left[ G \Gamma_q G^\dagger \Gamma_p \right] = \text{Tr} \left[ \Gamma_p G \Gamma_q G^\dagger \right] = \bar{T}_{pq}.\end{aligned}$$

La función de transmisión está relacionada con los coeficientes de transmisión  $\mathbf{t}$  de la siguiente manera [4, 6, 35]:

$$\bar{T} = \text{Tr}[\mathbf{t}^\dagger \mathbf{t}],$$

y haciendo uso de la fórmula de Fisher-Lee (3.22) obtenemos para el coeficiente de transmisión  $\mathbf{t}$  [3]:

$$\mathbf{t}_{pq} = \Gamma_p^{1/2} G \Gamma_q^{1/2}. \quad (3.23)$$

Aquí podemos observar la ventaja de utilizar el formalismo de Green y las autoenergías, la ecuación (3.23) nos permitirá calcular el coeficiente de transmisión independientemente de la forma de los “cables”, ya que ellos estarán tomados en cuenta a través de las autoenergías, que algunas veces podremos obtener de forma analítica, por ejemplo para el “cable” semi-infinito.

### 3.5. “Cable” semi-infinito

Supongamos que tenemos un “cable” semi-infinito conectado a un conductor como se muestra en la figura 3.6, nos interesa calcular la autoenergía de este “cable” y para ello seguimos el procedimiento de la referencia [6, 35]. El punto 0, el contacto, lo consideraremos como parte del conductor y los demás puntos como parte del “cable” semi-infinito (ver fig. 3.6) y los etiquetamos con la letra  $n$  tal que  $n < 0$  representa al “cable”.

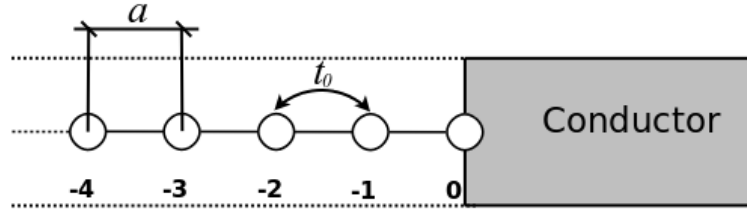


Figura 3.6: “Cable” semi-infinito conectado a un conductor. Adaptado de [6].

La ecuación para el conductor aislado es:

$$E\psi = (E_C + 2t_0)\psi,$$

ahora si consideramos el contacto tenemos:

$$E\psi = (E_C + 2t_0)\psi - t_0\phi_{-1}, \quad (3.24)$$

las funciones de onda  $\phi$  satisfacen la siguiente serie infinita (ver (3.12)):

$$E\phi_n = -t_0\phi_{n-1} + (E_C + 2t_0)\phi_n - t_0\phi_{n+1}, \quad (3.25)$$

y la solución de (3.25) la podemos expresar en función de ondas planas<sup>4</sup>, una incidente y otra reflejada [6]:

$$\phi_n = B \exp(ikna) + C \exp(-ikna), \quad (3.26)$$

por tanto,

$$\phi_{n-1} = B \exp(ikna - ka) + C \exp(-ikna + ka), \quad (3.27)$$

$$\phi_{n+1} = B \exp(ikna + ka) + C \exp(-ikna - ka),$$

usando estas ecuaciones (3.27) y (3.25), obtenemos la siguiente relación de dispersión:

$$E = E_C + 2t_0[1 - \cos(ka)]. \quad (3.28)$$

<sup>4</sup>debido a la periodicidad en  $a$  de la cadenal lineal, ver teorema de Bloch (1.22)

De (3.26) también obtenemos:

$$\begin{aligned}
\psi &\equiv \phi_0 = B + C, \\
\phi_{-1} &= B \exp(-ika) + C \exp(ika), \\
&= \psi \exp(ika) + B[\exp(-ika) - \exp(ika)], \\
&= \psi \exp(ika) - 2iB \sin(ka),
\end{aligned} \tag{3.29}$$

y a partir de (3.24) usando (3.29) se tiene:

$$\begin{aligned}
[E - E_C - 2t_0 + t_0 \exp(ika)]\psi &= 2it_0B \sin(ka), \\
[E - H - \Sigma]\psi &= S,
\end{aligned}$$

donde la autoenergía es:

$$\Sigma = -t_0 \exp(ika), \tag{3.30}$$

y  $S$  representa la excitación del conductor debido al “cable”:

$$S = 2it_0B \sin(ka).$$

Para hallar la autoenergía (3.30) en función de la energía  $E$  usamos la relación de dispersión (3.28):

$$\begin{aligned}
\cos(ka) &= \frac{1}{2t_0} [E_C - E + 2t_0], \\
ka &= \arccos \left( \frac{E_C - E}{2t_0} + 1 \right), \\
&= -i \ln \left[ \left( \frac{E_C - E}{2t_0} + 1 \right) + \sqrt{\left( \frac{E_C - E}{2t_0} + 1 \right)^2 - 1} \right],
\end{aligned} \tag{3.31}$$

sustituyendo (3.31) en la autoenergía (3.30) obtenemos:

$$\Sigma(E) = \frac{E - E_C}{2} - t_0 - i \sqrt{(E - E_C)t_0 - \left( \frac{E - E_C}{2} \right)^2},$$

donde deliberadamente escogimos el signo del radical tal que la parte imaginaria de la autoenergía fuese negativa, en este caso:

$$0 \leq \frac{E - E_C}{2t_0} \leq 2,$$

es decir, se escogen los valores dentro de la banda permitida [6], además los autoestados tienen tiempo de vida finito. Es posible deducir la autoenergía del cable semi-infinito por otros medios como el método de decimación [15] o por el procedimiento de la referencia [21], pero el enfoque usado es el apropiado porque se ajusta a los conceptos ya introducidos en este trabajo.

Por último, para probar consistencia del método empleado, podemos reproducir la relación de dispersión de un “cable” continuo aplicando el límite  $a \ll 0$  en (3.28):

$$\begin{aligned} E &= E_C + 2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} [1 - \cos(ka)], \\ &\rightarrow E_C + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \end{aligned}$$

### 3.6. Sistemas con más grados de libertad: 2D, espín

Los procedimientos descritos en las secciones anteriores pueden ser extendidos para sistemas con cualquier geometría y tomando en cuenta el espín. Por ejemplo, la transmisión entre dos contactos conectados a un conductor y considerando espín se puede describir con la siguiente función de transmisión [19]:

$$\bar{T}_{pq}^{\lambda\tau} = \text{Tr}[\Gamma_p^\lambda G_{pq}^{\lambda\tau} \Gamma_q^\tau G_{qp}^{\tau\lambda}],$$

aquí las matrices de ensanchamiento seleccionan los canales que se desean estudiar, i.e. el espín a la entrada y la salida.

## Modelos de filtro de espín Hatano-Chen

Estudiaremos el modelo introducido por Hatano en el artículo [28]. El esquema se basa en la interacción espín-órbita y en el modelo tight-binding, reproduciremos los cálculos en detalle siguiendo además el artículo de Chen y Chang [31]. Para ello primero se considerará el hamiltoniano para el caso continuo y luego para el caso discreto en el arreglo bidimensional de Hatano, sus resultados se examinarán en el próximo capítulo.

### 4.1. Hamiltoniano en el caso continuo

En el caso continuo, el hamiltoniano para un sistema en dos dimensiones tomando en cuenta las interacciones de espín-órbita Rashba y Dresselhaus (en primer orden para el momentum [31], ver ecuaciones (1.29) y (1.30)) lo escribimos de la siguiente manera:

$$H = \frac{\Pi^2}{2m^*} + \frac{\alpha}{\hbar} (\Pi_x \sigma_y - \Pi_y \sigma_x) + \frac{\beta}{\hbar} (\Pi_y \sigma_y - \Pi_x \sigma_x). \quad (4.1)$$

Aquí  $\alpha(\beta)$  corresponde a la constante de acoplamiento de la interacción espín órbita Rashba(Dresselhaus) y  $\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - e\mathbf{A}^B/c$ , con  $\mathbf{A}^B$  el vector magnético potencial. Agrupando términos en (4.1), obtenemos:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[ \left( \Pi_x^2 + \frac{2m^*\alpha}{\hbar} \Pi_x \sigma_y - \frac{2m^*\beta}{\hbar} \Pi_x \sigma_x \right) + \left( \Pi_y^2 - \frac{2m^*\alpha}{\hbar} \Pi_y \sigma_x + \frac{2m^*\beta}{\hbar} \Pi_y \sigma_y \right) \right]. \quad (4.2)$$

Teniendo en cuenta que, la ecuación (4.2) es cuadrática en  $\Pi$ ,  $[\Pi_i, \sigma_j] = 0$ ,  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$  y  $\sigma_i^2 = 1$ , reescribimos (4.2) como:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m^*} \left[ \left( \Pi_x + \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_y - \frac{m^* \beta}{\hbar} \sigma_x \right)^2 + \left( \Pi_y - \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_x + \frac{m^* \beta}{\hbar} \sigma_y \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{m^{*2}}{\hbar^2} \left( \alpha^2 \sigma_x^2 + \alpha^2 \sigma_y^2 + \beta^2 \sigma_x^2 + \beta^2 \sigma_y^2 - 2\alpha\beta \sigma_x \sigma_y - 2\alpha\beta \sigma_y \sigma_x \right) \right] \\ &= \frac{1}{2m^*} \left[ \left( \Pi_x + \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_y - \frac{m^* \beta}{\hbar} \sigma_x \right)^2 + \left( \Pi_y - \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_x + \frac{m^* \beta}{\hbar} \sigma_y \right)^2 \right] \\ &\quad - \frac{m^*}{\hbar^2} (\alpha^2 + \beta^2) \mathbb{I}_s. \end{aligned}$$

Ahora si introducimos el potencial constante  $V$  y el vector potencial de la interacción espín-órbita (EO):

$$\begin{aligned} V &= \frac{m^*}{\hbar^2} (\alpha^2 + \beta^2), \\ \mathbf{A}^{\text{EO}} &= (A_x^{\text{EO}}, A_y^{\text{EO}}) = \frac{mc}{e\hbar} (-\alpha \sigma_y + \beta \sigma_x, \alpha \sigma_x - \beta \sigma_y), \end{aligned} \quad (4.3)$$

obtenemos:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[ \left( \Pi_x - \frac{e}{c} A_x^{\text{EO}} \right)^2 + \left( \Pi_y - \frac{e}{c} A_y^{\text{EO}} \right)^2 \right] - V \mathbb{I}_s. \quad (4.4)$$

Luego si unificamos los vectores potenciales magnético y de espín-órbita (EO) de la siguiente manera:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\text{B}} \mathbb{I}_s + \mathbf{A}^{\text{EO}}, \quad (4.5)$$

el hamiltoniano (4.4) se puede reescribir así:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[ \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right]^2 - V \mathbb{I}_s. \quad (4.6)$$



En este nuevo vector campo magnético dependiente del espín ahora sus componentes no conmutan, mas aún:

$$\begin{aligned}
[A_x, A_y] &= [A_x^{\text{EO}}, A_y^{\text{EO}}] \\
&= \left(\frac{m^*c}{e\hbar}\right)^2 [(-\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x) \times (\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y) - (\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y) \times (-\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x)] \\
&= \left(\frac{m^*c}{e\hbar}\right)^2 [-\alpha^2\sigma_y\sigma_x + \alpha\beta\sigma_y^2 + \alpha\beta\sigma_x^2 - \beta^2\sigma_x\sigma_y + \alpha^2\sigma_x\sigma_y \\
&\quad - \alpha\beta\sigma_x^2 - \alpha\beta\sigma_y^2 + \beta^2\sigma_y\sigma_x] \\
&= \left(\frac{m^*c}{e\hbar}\right)^2 (\alpha^2[\sigma_x, \sigma_y] - \beta^2[\sigma_x, \sigma_y]). \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Como  $[\sigma_x, \sigma_y] = 2i\sigma_z$ , entonces (4.7) queda:

$$[A_x, A_y] = 2i \left(\frac{m^*c}{e\hbar}\right)^2 (\alpha^2 - \beta^2)\sigma_z.$$

Notamos que para  $\alpha = \beta$ , la física se reduce a la descripción de un modelo abeliano. De esta manera, mediante la manipulación de estos parámetros (lo cual es experimentalmente factible ajustando los voltajes de compuerta) podemos estudiar en el estado sólido, la física en ambos regímenes, a saber Abeliano y Yang-Mills. Las consecuencias de este caso particular en las condiciones de filtrado serán analizadas en la discusión de los resultados.

## 4.2. Efecto Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher

Supongamos ahora que solamente tenemos interacción Rashba, el hamiltoniano (4.6), usando (4.3), queda:

$$H = \frac{1}{2m^*} \left[ \left( p_x - \frac{e}{c} A_x^{\text{B}} + \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_y \right)^2 + \left( p_y - \frac{e}{c} A_y^{\text{B}} - \frac{m^* \alpha}{\hbar} \sigma_x \right)^2 \right] + \text{const}. \tag{4.8}$$

Este hamiltoniano (4.8) lo podemos comparar con el hamiltoniano Yang-Mills [28]:

$$H_{YM} = \frac{1}{2m^*} \left[ (p_x - \tilde{e}\tilde{A}_x)^2 + (p_y - \tilde{e}\tilde{A}_y)^2 \right],$$

aquí  $\tilde{e}$  es la constante de acoplamiento, que si la hacemos igual a la unidad podemos establecer la siguiente comparación:

$$\begin{aligned}\tilde{A}_x &\leftrightarrow \frac{e}{c}A_x^B - \frac{m^*\alpha}{\hbar}\sigma_y, \\ \tilde{A}_y &\leftrightarrow \frac{e}{c}A_y^B + \frac{m^*\alpha}{\hbar}\sigma_x.\end{aligned}$$

El campo físico generado por el calibre  $\tilde{A}$  es [24, 28]:

$$F_{\mu\nu} = \left( \partial_\mu \tilde{A}_\nu - \partial_\nu \tilde{A}_\mu \right) - \frac{i}{\hbar} [\tilde{A}_\mu, \tilde{A}_\nu],$$

con  $\mu = x$  y  $\nu = y$ , obtenemos:

$$\begin{aligned}F_{xy} &= \frac{e}{c} \left( \partial_x A_y^B - \partial_y A_x^B \right) - \frac{im^*\alpha^2}{\hbar^3} [\sigma_x, \sigma_y], \\ &= eB_z + \frac{2m^*\alpha^2}{\hbar^3} \sigma_z,\end{aligned}\tag{4.9}$$

y si definimos  $\theta$  como la “carga” de la interacción espín-órbita [28]:

$$\theta \equiv \frac{2m^*\alpha}{\hbar^2},$$

el campo queda (4.9):

$$\begin{aligned}F_{xy} &= eB_z + \theta^2 \frac{\hbar}{2} \sigma_z, \\ &= e \frac{\Phi_B}{S} + \theta \frac{\Phi_R}{S},\end{aligned}$$

escrita en función del flujo magnético  $\Phi_B$  y el flujo “Rashba”  $\Phi_R$  a través del área  $S$ . Realizando un razonamiento similar obtendremos para el caso de la interacción Dresselhaus [28]:

$$F_{xy} = e \frac{\Phi_B}{S} + \theta \frac{\Phi_D}{S}.$$

El primer término de estas ecuaciones corresponde al efecto Aharonov-Bohm y el segundo al efecto Aharonov-Casher [28]. Cómo vimos anteriormente, una carga puntual en presencia de un potencial magnético diferente de cero y una partícula sin carga con momento magnético  $\theta$ .

### 4.3. Filtro Perfecto de Espín de Hatano

Hatano et al. proponen en su artículo [28] un “filtro perfecto de espín”. En la figura 4.1 tenemos un campo  $B_z$  confinado en el circuito cuadrado que no afecta directamente a los sitios (indicados con círculos), el circuito se encuentra conectado a dos cables. Solamente en el circuito consideraremos interacción Rashba.

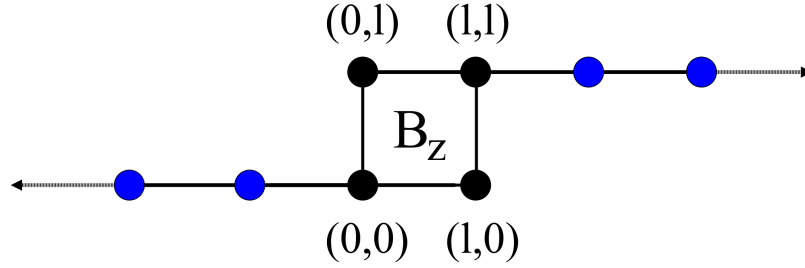


Figura 4.1: El circuito es penetrado por un flujo magnético, los sitios sobre el circuito son afectados por la interacción Rashba, mientras que los “cables” conectados a la izquierda y a la derecha no. Adaptado de [28]

El hamiltoniano tight-binding se escribe de la siguiente manera [31]:

$$H^{\text{TB}} = \sum_{(i,j)\alpha}^{(\uparrow,\downarrow)} \epsilon_{(i,j)\alpha} c_{(i,j)\alpha}^\dagger c_{(i,j)\alpha} + \sum_{(i,j)\alpha,(i',j')\alpha'}^{(\uparrow,\downarrow)} t_{(i,j)\alpha,(i',j')\alpha'} c_{(i,j)\alpha}^\dagger c_{(i',j')\alpha'}. \quad (4.10)$$

Con  $\epsilon_{(i,j)\alpha}$  la energía de sitio  $(i, j)$  y ajustable por medio del voltaje de puerta; los operadores de creación y destrucción fermiónicos  $c_{(i,j)\alpha}$ ,  $c_{(i,j)\alpha}^\dagger$  y  $t_{(i,j)\alpha,(i',j')\alpha'}$  el parámetro de salto del sitio  $(i, j)$  al sitio  $(i', j')$  y  $\alpha$  como etiqueta de espín. El potencial magnético, en el calibre simétrico, es:

$$\mathbf{A}^B = \frac{1}{2}(-B_z y, B_z x, 0). \quad (4.11)$$

Tomando la expresión del artículo de S. Chen [31] para calcular la fase que se obtiene por ir de un sitio a otro, podemos calcular el hamiltoniano tight-binding para nuestra configuración.

$$U_{(i',j')\leftarrow(i,j)} \equiv \exp \left[ \left( \frac{ie}{c\hbar} \right) \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i',j'}) \right]. \quad (4.12)$$

### 4.3.1. Condición de filtrado

Para obtener la condición de filtrado obtenida por Hatano [28], necesitamos calcular la fase total acumulada al realizar una vuelta completa en el circuito. Para ello primero calcularemos el trayecto  $(0, 0) \rightarrow (l, 0) \rightarrow (l, l) \rightarrow (0, l) \rightarrow (0, 0)$ , siguiendo el hamiltoniano (4.10), con  $\epsilon_{(i,j)\alpha} = 0$  por simplicidad, y el parámetro de salto proporcional a la fase (4.12) por un factor  $t$ , esto implica  $t_{(i,j)\alpha, (i',j')\alpha'} = t$ .

Como en el caso Hatano sólo consideraremos interacción Rashba haciendo  $\beta = 0$  en (4.3), esto es:

$$\mathbf{A}^{\text{EO}} = (A_x^{\text{EO}}, A_y^{\text{EO}}) = \frac{m^*c}{e\hbar}(-\alpha\sigma_y, \alpha\sigma_x). \quad (4.13)$$

Explícitamente, el vector potencial unificado (4.5) usando (4.11) y (4.13) queda:

$$\mathbf{A} = \left( -\frac{B_z}{2}y - \frac{m^*c}{e\hbar}\alpha\sigma_y, \frac{B_z}{2}x + \frac{m^*c}{e\hbar}\alpha\sigma_x \right). \quad (4.14)$$

Sustituyendo (4.14) en (4.12) obtenemos:

$$U_{(i',j')\leftarrow(i,j)} = \exp \left[ \left( \frac{ie}{c\hbar} \right) \left( -\frac{B_z}{2}y - \frac{m^*c}{e\hbar}\alpha\sigma_y, \frac{B_z}{2}x + \frac{m^*c}{e\hbar}\alpha\sigma_x \right) \cdot (r_x^{i,j} - r_x^{i',j'}, r_y^{i,j} - r_y^{i',j'}) \right]. \quad (4.15)$$

Por ejemplo, la fase que se obtiene de ir de  $(0, 0) \rightarrow (l, 0)$  usando (4.15) es:

$$U_{(l,0)\leftarrow(0,0)} = \exp \left[ \frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_y \right].$$

Siguiendo este mismo procedimiento, hallamos las fases para los recorridos  $(l, 0) \rightarrow (l, l)$ ,  $(l, l) \rightarrow (0, l)$  y  $(0, l) \rightarrow (0, 0)$ :

$$\begin{aligned} U_{(l,l)\leftarrow(l,0)} &= \exp \left[ -\frac{ie}{c\hbar} \frac{B_z l^2}{2} \right] \exp \left[ -\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_x \right], \\ U_{(0,l)\leftarrow(l,l)} &= \exp \left[ -\frac{ie}{c\hbar} \frac{B_z l^2}{2} \right] \exp \left[ -\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_y \right], \\ U_{(l,0)\leftarrow(0,0)} &= \exp \left[ \frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_x \right]. \end{aligned}$$

Finalmente, la fase adquirida por dar la vuelta en el circuito es [28, 31]:

$$\begin{aligned} U_{\text{fase}} &= U_{(l,0)\leftarrow(0,0)} U_{(0,l)\leftarrow(l,l)} U_{(l,l)\leftarrow(l,0)} U_{(l,0)\leftarrow(0,0)}, \\ &= e^{-\frac{ie}{c\hbar} B_z l^2} e^{\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_x} e^{-\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_y} e^{-\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_x} e^{\frac{im^*l}{\hbar^2}\alpha\sigma_y}. \end{aligned} \quad (4.16)$$

La fase magnética la podemos reescribir así [28]:

$$U_B = \exp[2\pi i \varphi_B] = \exp\left[-\frac{ie}{c\hbar} B_z l^2\right] = \exp\left[-2\pi i \frac{\Phi_B}{\Phi_0}\right].$$

Donde  $\Phi_B$  es el flujo magnético que penetra el circuito y  $\Phi_0$  el quantum de flujo.

Ahora si usamos la siguiente identidad:

$$e^{\pm i\gamma\sigma_i} \equiv \cos \gamma \pm i \operatorname{sen} \gamma \sigma_i,$$

junto con las definiciones:

$$\gamma \equiv \frac{im^*l}{\hbar^2} \alpha$$

$$c_\gamma \equiv \cos \gamma$$

$$s_\gamma \equiv \operatorname{sen} \gamma,$$

y las propiedades de las matrices de Pauli, podemos reescribir la fase (4.16) como:

$$\begin{aligned} U_{\text{fase}} &= e^{2\pi i \varphi_B} [c_\gamma + i s_\gamma \sigma_x][c_\gamma - i s_\gamma \sigma_y][c_\gamma - i s_\gamma \sigma_x][c_\gamma + i s_\gamma \sigma_y] \\ &= U_B [c_\gamma^4 - s_\gamma^4 + 2c_\gamma^2 s_\gamma^2] \mathbb{I} + 2i c_\gamma s_\gamma^2 [s_\gamma (\sigma_x + \sigma_y) + c_\gamma \sigma_z] \\ &= U_B U_R. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Para hallar los autovalores de la “fase Rashba”  $U_R$ , primero notamos que el término matricial en (4.17)  $M \equiv s_\gamma (\sigma_x + \sigma_y) + c_\gamma \sigma_z$  sólo contiene elementos no nulos fuera de la diagonal; los autovalores de  $M$  son:

$$m = \pm \sqrt{-\operatorname{Det} M} = \pm \sqrt{c_\gamma^2 + 2s_\gamma^2} = \pm \sqrt{1 + s_\gamma^2}.$$

Entonces los autovalores de  $U_R$  son:

$$\Lambda_\pm = c_\gamma^4 - s_\gamma^4 + 2c_\gamma^2 s_\gamma^2 \pm 2i c_\gamma s_\gamma^2 \sqrt{1 + s_\gamma^2}. \quad (4.18)$$

Si escribimos los autovalores  $\Lambda_\pm$  de la siguiente manera:

$$\Lambda_\pm = e^{\pm 2i\pi\varphi_R} = \cos(2\pi\varphi_R) \pm i \operatorname{sen}(2\pi\varphi_R),$$

y comparamos con (4.18), obtenemos:

$$\cos(2\pi\varphi_R) = c_\gamma^4 - s_\gamma^4 + 2c_\gamma^2 s_\gamma^2 = 1 - 2s_\gamma^4, \quad (4.19)$$

usando que  $c_\gamma^2 = 1 - s_\gamma^2$ . Despejando  $\varphi_R$  de 4.19, obtenemos [28]:

$$\varphi_R = \frac{1}{2\pi} \cos^{-1} \left[ 1 - 2\text{sen}^4 \left( \frac{m^*l}{\hbar^2} \alpha \right) \right].$$

Ahora si imponemos la condición de filtrado sugerida por [28]:

$$2\pi\varphi_B = 2\pi\varphi_R = \frac{\pi}{2} \quad (4.20)$$

$$\frac{m^*l}{\hbar^2} \alpha = 2\text{sen}^{-1} \frac{1}{2^{1/4}}, \quad (4.21)$$

entonces la interferencia será destructiva para los espines con dirección (+) y constructiva para los espines (-), donde estas direcciones de espín se refieren a la base “inclinada”. Ahora para la condición (4.20) los autovectores para las direcciones (+) y (-) en los ejes inclinados son [28]:

$$\tilde{\chi}_+ = \begin{bmatrix} 2^{-1/4} e^{-i\pi/4} \\ -\sqrt{1 - 1/\sqrt{2}} \end{bmatrix} \quad (4.22)$$

$$\tilde{\chi}_- = \begin{bmatrix} \sqrt{1 - 1/\sqrt{2}} \\ 2^{-1/4} e^{i\pi/4} \end{bmatrix} \quad (4.23)$$

### 4.3.2. Autoenergías y Transmisión

Las autoenergías debidas a los “cables” conectados en lado izquierdo y derecho del circuito (ver fig. 4.1) se expresan de la siguiente manera [28, 31]:

$$\Sigma(E) \equiv \frac{E - i\sqrt{4t^2 - E^2}}{2} \left( c_{(0,0)}^\dagger c_{(0,0)} + c_{(l,l)}^\dagger c_{(l,l)} \right).$$

El coeficiente de transmisión entre un estado de espín  $\lambda$  en el contacto izquierdo y un estado de espín  $\tau$  en el contacto derecho con energía  $E$ , está dado por [28, 31] (ver ec. 3.23):

$$\mathbf{t}_{\tau\lambda} = \langle \text{vac} | c_{(l,l)\tau} \frac{\sqrt{4t^2 - E^2}}{E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)} c_{(0,0)\lambda}^\dagger | \text{vac} \rangle, \quad (4.24)$$

aquí el hamiltoniano tight-binding  $H^{\text{TB}}$  se representa a través de una matriz  $8 \times 8$  y se construye mediante las fórmulas (4.10) y (4.12), recordando que para el arreglo de Hatano [28, 31] la energía del sitio  $\epsilon_{(i,j)\alpha} = 0$  y el parámetro de salto  $t_{(i,j)\alpha, (i',j')\alpha'} = t$ . Las funciones gamma son, para el contacto en la entrada (izquierda) y en la salida (derecha) respectivamente:

$$\Gamma_{(0,0)} = i[\Sigma_{(0,0)}^R - \Sigma_{(0,0)}^A] = \sqrt{4t^2 - E^2}(c_{(0,0)}^\dagger c_{(0,0)}),$$

$$\Gamma_{(l,l)} = i[\Sigma_{(l,l)}^R - \Sigma_{(l,l)}^A] = \sqrt{4t^2 - E^2}(c_{(l,l)}^\dagger c_{(l,l)}).$$

# Capítulo 5

## Resultados Modelo de Hatano-Chen

A través de un programa computacional elaborado para este trabajo, en lenguaje **C**, se calcularon los coeficientes de transmisión 4.24 en función de  $E/t$  para el modelo de Hatano.

Para reproducir los resultados del artículo de Hatano [28], hay que recordar que el filtrado se realiza es en la base rotada, por tanto, es necesario construir la matriz de transformación a partir de los autovectores (4.22) y (4.23), calculados en el capítulo anterior:

$$M = \begin{bmatrix} 2^{-1/4} e^{-i\pi/4} & \sqrt{1 - 1/\sqrt{2}} \\ -\sqrt{1 - 1/\sqrt{2}} & 2^{-1/4} e^{i\pi/4} \end{bmatrix},$$

y transformar los resultados para cada combinación de entrada y salida. En la base original los estados de espín a la entrada y salida se expresan como:

$$\begin{aligned} c_{(0,0)+} &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ c_{(0,0)-} &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ c_{(l,l)+} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \\ c_{(l,l)-} &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \end{aligned}$$

Con estos vectores y la ecuación (4.24), notamos que esta operación selecciona un elemento matricial de  $h = [E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)]^{-1}$  para cada combinación de  $\lambda$  y  $\tau$ :



$\lambda$	$\tau$	Elemento
+	+	$h_{71}$
+	-	$h_{81}$
-	+	$h_{72}$
-	-	$h_{82}$

Cuadro 5.1: Elementos matriciales

Finalmente los coeficientes de transmisión para la base rotada los calculamos usando la matriz de transformación  $M$  y los elementos matriciales indicados en la tabla 5.1 de la siguiente manera:

$$\mathbf{t}_{\tau\lambda} = \sqrt{4 - (E/t)^2} \left[ m_{1f(\tau)} \left( m_{1f(\lambda)}^* h_{71} + m_{2f(\lambda)}^* h_{72} \right) + m_{2f(\tau)} \left( m_{1f(\lambda)}^* h_{81} + m_{2f(\lambda)}^* h_{82} \right) \right], \quad (5.1)$$

donde  $\lambda$  es el estado de espín ( $+, \uparrow$  ó  $-, \downarrow$ ) en el contacto izquierdo (entrada) y  $\tau$  es el estado de espín ( $+, \uparrow$  ó  $-, \downarrow$ ) en el contacto derecho (salida); junto con la función  $f$  que define el índice de columna del elemento correspondiente a la matriz  $M$ , de la siguiente manera:

$$f(\sigma) = \begin{cases} 1 & \text{si } \sigma \text{ es un estado de espín } + \text{ ó } \uparrow \\ 2 & \text{si } \sigma \text{ es un estado de espín } - \text{ ó } \downarrow \end{cases}$$

El procedimiento seguido para calcular los coeficientes de transmisión en función de  $E/t$  es el siguiente:

1. Se construye la matriz  $8 \times 8$  y se asignan las fases en los lugares correspondientes en ésta, tomando en cuenta la condición de filtrado (4.21).
2. Se inicia la iteración para  $E/t \leq |2|$  y un paso dado  $s$ .
  - a) Se calculan y asignan las autoenergías a la matriz.
  - b) Se invierte la matriz.

- c) Se obtienen los elementos de matriz relevantes (ver tabla 5.1).
- d) Se calculan los coeficientes de transmisión (5.1) y se graban los datos.
- e) Se repite el paso 2.a

3. Se grafican los resultados.

Cabe destacar que se necesitan calcular un total de  $4/s$  inversiones. Los resultados se representan en el gráfico 5.1.

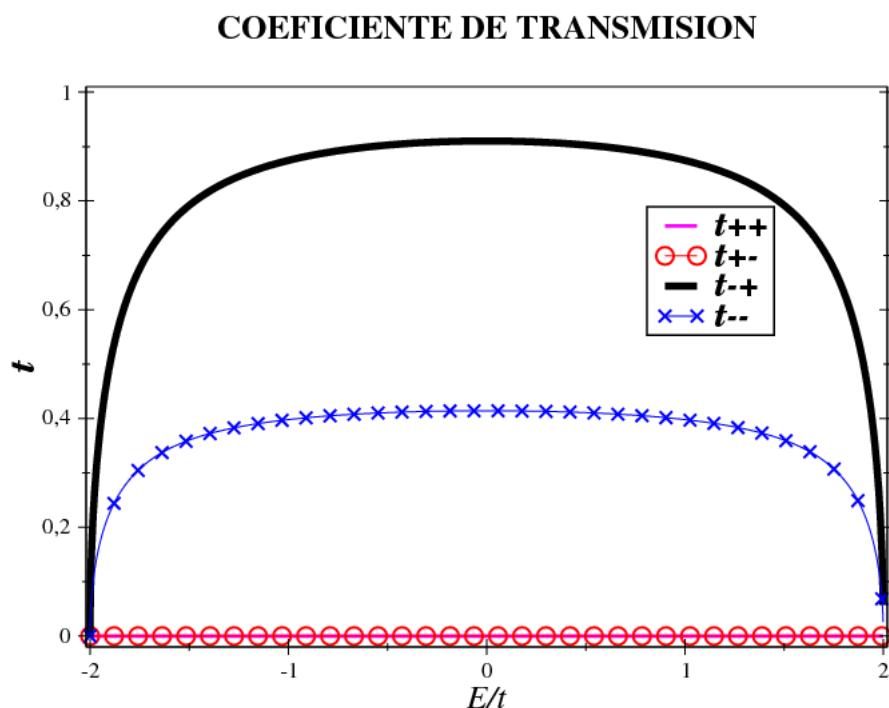


Figura 5.1: Coeficientes de transmisión, desde el “cable” izquierdo al derecho.

Entonces se reprodujeron los resultados obtenidos por Hatano y Chen [28, 31] y se observa que el circuito propuesto por Hatano bajo la condición (4.21) filtra la salida  $(+), \uparrow$  en todo el rango de energía  $E/t \leq |2|$ . En el gráfico (5.1) se utiliza el mismo orden que el propuesto en la ecuación (5.1), esto significa que el coeficiente  $T_{+-}$  se debe leer como el coeficiente de transmisión entre el estado de espín de entrada  $(-)$  y el estado de espín de salida  $(+)$ , ambos representados en el eje rotado.

# Capítulo 6

## Modelo MZI

La segunda parte de nuestro estudio numérico se basa en el interferómetro electrónico Mach-Zehnder [40], aplicado a al filtrado de espín [1]. Este dispositivo es ensamblado en heteroestructuras GaAs-AlGaAS, obteniendo así el gas bidimensional de electrones (2DEG).

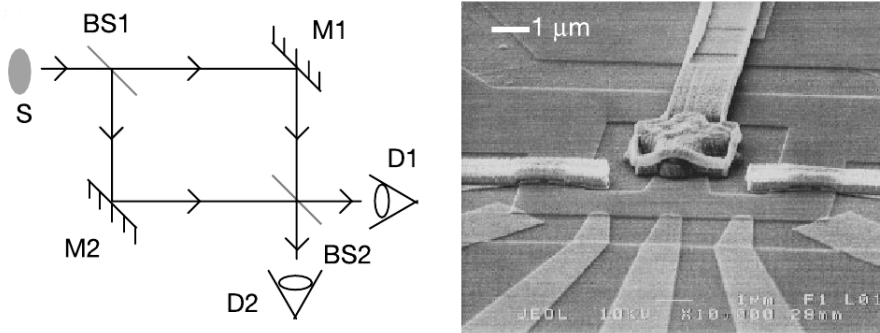


Figura 6.1: Esquema del interferómetro Mach-Zehnder y micrografía de barrido electrónico del dispositivo [40].

El interferómetro electrónico MZI es análogo al interferómetro óptico (ver fig. 6.1). En el interferómetro óptico un haz monocromático proveniente de una fuente S incide sobre el beam splitter (BS1); parte del haz es reflejado y parte es transmitido. Luego el haz es reflejado por los espejos M1 y M2 y a continuación interfiere en el segundo beam splitter (BS2), donde finalmente es recolectado en los detectores D1 y D2.

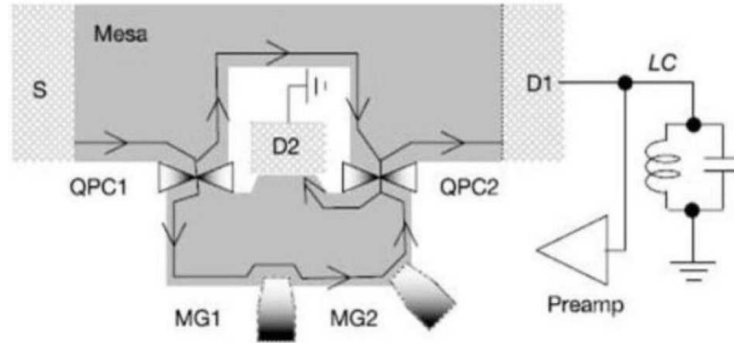


Figura 6.2: Interferómetro electrónico Mach-Zehnder [40].

En el caso del interferómetro electrónico (ver fig. 6.2) los puntos de contactos cuánticos (QPC) son análogos a los beam splitters.

### 6.1. Modelo Tight-Binding MZI Simétrico

Con la finalidad de aplicar el método Tight-Binding al dispositivo propuesto en [1], vamos a discretizar el interferómetro como se ilustra en la siguiente figura:

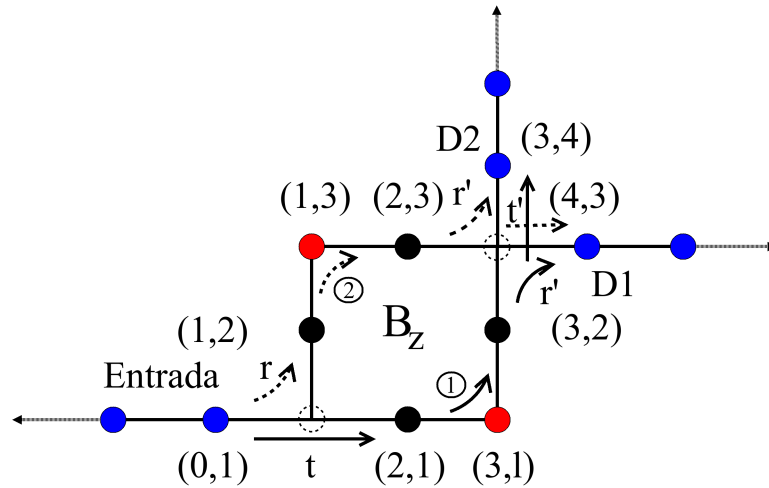


Figura 6.3: El circuito es penetrado por un flujo magnético, los dos sitios sobre las esquinas son los únicos afectados por la interacción espín-órbita, los “cables” están conectados en la entrada (izquierda) y en los detectores D1 y D2. La distancia entre sitios adyacentes es  $a$

Ahora necesitamos construir el hamiltoniano tight-binding para este circuito (4.10):

$$H^{\text{TB}} = \sum_{(i,j)\alpha}^{(\uparrow,\downarrow)} \epsilon_{(i,j)} c_{(i,j)\alpha}^\dagger c_{(i,j)\alpha} + \sum_{(i,j)\alpha, (i',j')\alpha'}^{(\uparrow,\downarrow)} t_{(i,j)\alpha, (i',j')\alpha'} c_{(i,j)\alpha}^\dagger c_{(i',j')\alpha'}$$

para ello primero comenzamos calculando las fases usando (4.12):

$$U_{(i',j')\leftarrow(i,j)} \equiv \exp \left[ \left( \frac{ie}{c\hbar} \right) \mathbf{A} \cdot (\mathbf{r}_{i,j} - \mathbf{r}_{i',j'}) \right].$$

Por ejemplo, la fase adquirida por ir del sitio (2, 1) al (3, 1) es:

$$\begin{aligned} U_{(3,1)\leftarrow(2,1)} &= \exp \left[ \left( \frac{im}{\hbar^2} \right) \left( -\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x - \frac{e\hbar}{mc} \frac{B_z y}{2}, \alpha\sigma_x - \beta\sigma_y + \frac{e\hbar}{mc} \frac{B_z x}{2} \right) (-a, 0) \right]_{\substack{x=3a \\ y=a}} \\ &= \exp \left[ - \left( \frac{ima}{\hbar^2} \right) (-\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x) \right] \exp \left[ \frac{ie}{2c\hbar} B_z \right] \\ &= U_x U_B, \end{aligned}$$

donde,  $U_x$  y  $U_B$  se definen como:

$$\begin{aligned} U_x &\equiv \exp \left[ - \left( \frac{ima}{\hbar^2} \right) (-\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x) \right] \\ U_B &\equiv \exp \left[ \frac{ie}{2c\hbar} B_z a^2 \right]. \end{aligned}$$

Y la fase adquirida por ir del sitio (3, 1) al (3, 2), es:

$$\begin{aligned} U_{(3,2)\leftarrow(3,1)} &= \exp \left[ \left( \frac{im}{\hbar^2} \right) \left( -\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x - \frac{e\hbar}{mc} \frac{B_z y}{2}, \alpha\sigma_x - \beta\sigma_y + \frac{e\hbar}{mc} \frac{B_z x}{2} \right) (0, -a) \right]_{\substack{x=3a \\ y=2a}} \\ &= \exp \left[ - \left( \frac{ima}{\hbar^2} \right) (\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y) \right] \exp \left[ - \frac{3ie}{2c\hbar} B_z \right] \\ &= U_y U_{B_3}^\dagger, \end{aligned}$$

junto con las siguientes definiciones:

$$\begin{aligned} U_y &\equiv \exp \left[ - \left( \frac{ima}{\hbar^2} \right) (\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y) \right] \\ U_{B_3} &\equiv \exp \left[ \frac{3ie}{2c\hbar} B_z a^2 \right]. \end{aligned}$$

Los parámetros  $\alpha$  y  $\beta$  cumplen con  $|\alpha|, |\beta| < 6$  en unidades de  $\hbar/(2m^*a)$  [1]. De la misma manera, obtenemos:

$$U_{(1,3)\leftarrow(1,2)} = U_y U_B^\dagger \quad U_{(2,3)\leftarrow(1,3)} = U_x U_{B_3}.$$

Las fases restantes son las siguientes (ver fig. 6.3):

$$\begin{aligned} U_{(1,2)\leftarrow(0,1)} &= \mathbf{t} & U_{(4,3)\leftarrow(2,3)} &= U_{(3,4)\leftarrow(3,2)} = \mathbf{t}' \\ U_{(2,1)\leftarrow(0,1)} &= \mathbf{r} & U_{(4,3)\leftarrow(3,2)} &= U_{(3,4)\leftarrow(2,3)} = \mathbf{r}' \end{aligned}$$

Que son los coeficientes de reflexión y transmisión para la entrada y cada detector.

### 6.1.1. Autoenergías y Transmisión

Las autoenergías debidas a los “cables” conectados en ambos detectores y en la entrada (ver fig. 6.3) se describen por:

$$\Sigma(E) \equiv \frac{E - i\sqrt{4t^2 - E^2}}{2} \left( c_{(0,1)}^\dagger c_{(0,1)} + c_{(4,3)}^\dagger c_{(4,3)} + c_{(3,4)}^\dagger c_{(3,4)} \right).$$

El coeficiente de transmisión entre un estado de espín  $\lambda$  en la entrada y un estado de espín  $\tau$  en el detector  $D_i$  con energía  $E$ , viene dado por (ver ec. 3.23):

$$\mathbf{t}_{\tau\lambda}^{D_1} = \langle \text{vac} | c_{(4,3)\tau} \frac{\sqrt{4t^2 - E^2}}{E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)} c_{(0,1)\lambda}^\dagger | \text{vac} \rangle, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{t}_{\tau\lambda}^{D_2} = \langle \text{vac} | c_{(3,4)\tau} \frac{\sqrt{4t^2 - E^2}}{E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)} c_{(0,1)\lambda}^\dagger | \text{vac} \rangle. \quad (6.2)$$

## 6.2. Modelo Tight-Binding MZI Asimétrico

En la figura (6.4) se propone el modelo MZI “asimétrico”:

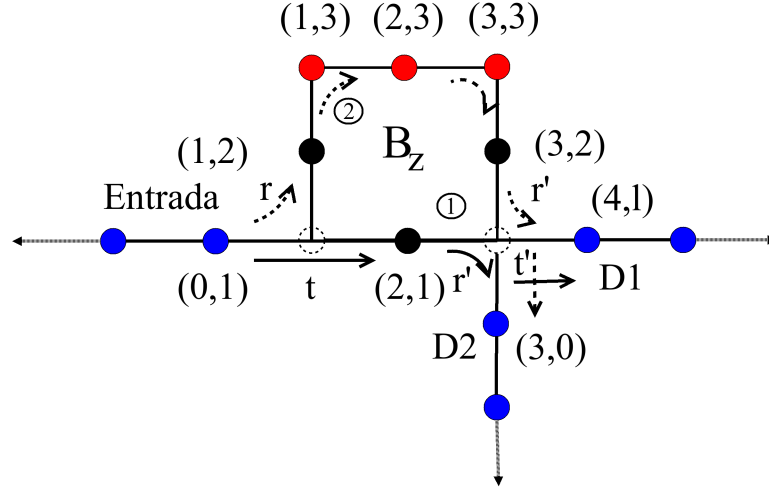


Figura 6.4: Los “cables” están conectados en la entrada (izquierda) y en los detectores D1 y D2, en la esquina inferior.

En este caso solamente los sitios que se encuentran en el brazo superior  $y = 3$  del circuito son los que tienen interacción espín-órbita. Para obtener el modelo asimétrico partiendo del modelo simétrico es necesario realizar los siguientes cambios:

$$\begin{aligned}
 U_{(3,3)\leftarrow(2,3)} &= U_x U_{B_3} & U_{(4,1)\leftarrow(2,1)} &= U_{(3,0)\leftarrow(3,2)} = \mathbf{t}' \\
 U_{(3,3)\leftarrow(3,2)} &= U_y U_{B_3}^\dagger & U_{(3,0)\leftarrow(2,1)} &= U_{(4,1)\leftarrow(3,2)} = \mathbf{r}'
 \end{aligned}$$

Además de eliminar las transiciones  $(2, 1) \rightarrow (3, 1)$  y  $(3, 2) \rightarrow (3, 1)$ .

### 6.2.1. Autoenergías y Transmisión

Las autoenergías debidas a los “cables” conectados en ambos detectores y en la entrada (ver fig. 6.3) se describen por:

$$\Sigma(E) \equiv \frac{E - i\sqrt{4t^2 - E^2}}{2} \left( c_{(0,1)}^\dagger c_{(0,1)} + c_{(4,1)}^\dagger c_{(4,1)} + c_{(3,0)}^\dagger c_{(3,0)} \right) .$$

El coeficiente de transmisión entre un estado de espín  $\lambda$  en la entrada y un estado de espín  $\tau$  en el detector  $D_i$  con energía  $E$  es:

$$t_{\tau\lambda}^{D_1} = \langle \text{vac} | c_{(4,1)\tau} \frac{\sqrt{4t^2 - E^2}}{E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)} c_{(0,1)\lambda}^\dagger | \text{vac} \rangle,$$

$$t_{\tau\lambda}^{D_2} = \langle \text{vac} | c_{(3,0)\tau} \frac{\sqrt{4t^2 - E^2}}{E - H^{\text{TB}} - \Sigma(E)} c_{(0,1)\lambda}^\dagger | \text{vac} \rangle.$$



# Capítulo 7

## Resultados Modelos MZI

Para obtener los resultados, se diseñó un algoritmo bajo el mismo esquema del capítulo 5; excepto que en este caso no se tiene una condición de filtrado específica, para encontrarlas se procedió a realizar un barrido en el espacio de parámetros  $(\alpha, \beta, \varphi_B, E/t)$ , asumiendo que la energía del sitio  $\epsilon_{(i,j)\alpha} = 0$  y el parámetro de salto  $t_{(i,j)\alpha, (i',j')\alpha'} = t$ . A partir de ahora y sin pérdida de generalidad denotaremos el flujo magnético  $\varphi_B$  como  $\phi$ . Adicionalmente, se impone que los coeficientes de reflexión y transmisión en la entrada y la salida son iguales.

$$\begin{aligned} \mathbf{t} &= \mathbf{t}' = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \mathbf{r} &= \mathbf{r}' = \frac{i}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

El procedimiento requiere la inversión de matrices  $18 \times 18$ . Dado que nos interesa observar los coeficientes de transmisión en la base original, aquí no es necesario buscar otra base, se procederá a buscar las condiciones numéricamente en las cuales ocurre filtrado en la base original.

### 7.1. Modelo Tight-Binding MZI Simétrico

Inicialmente se procedió a obtener las oscilaciones de Aharonov-Bohm para nuestro interferómetro simétrico, estas oscilaciones se producen sin interacción espín-órbita,

una factor de energía-hopping cualquiera en la banda  $E/t \rightarrow [-2, 2]$ , y variando continuamente el flujo magnético (en nuestro caso,  $\phi \rightarrow [-1, 1]$ , óptimo para presentar las oscilaciones). Los resultados para cada detector muestran lo esperado (ver figuras 7.1 y 7.2). Adicionalmente observamos que la transmisión en los detectores están desfasados de tal manera que cuando uno tiene el máximo en el otro se tiene un mínimo.

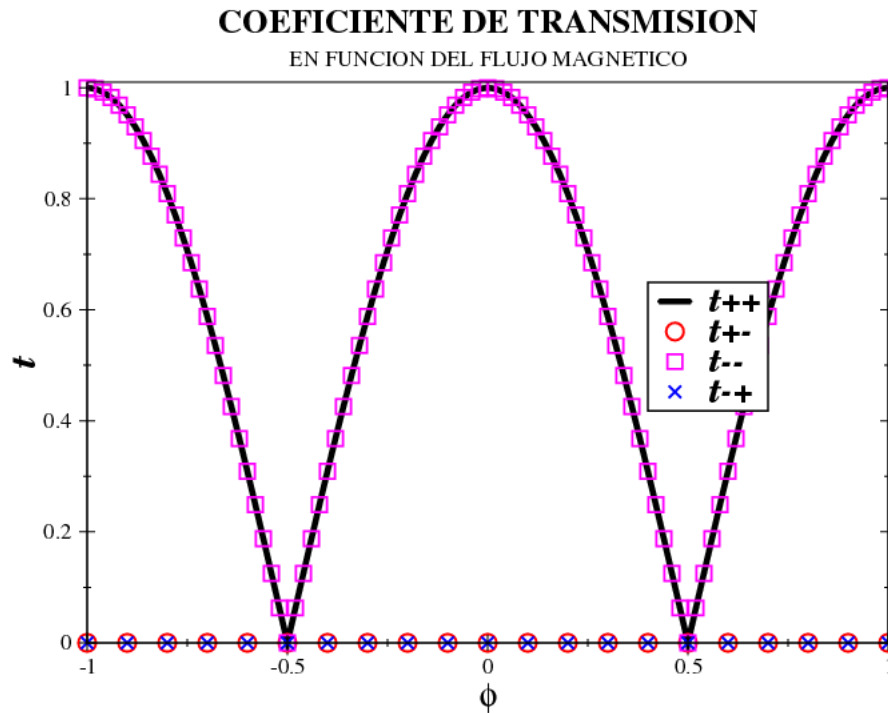


Figura 7.1: Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 1,  $E/t = 1$

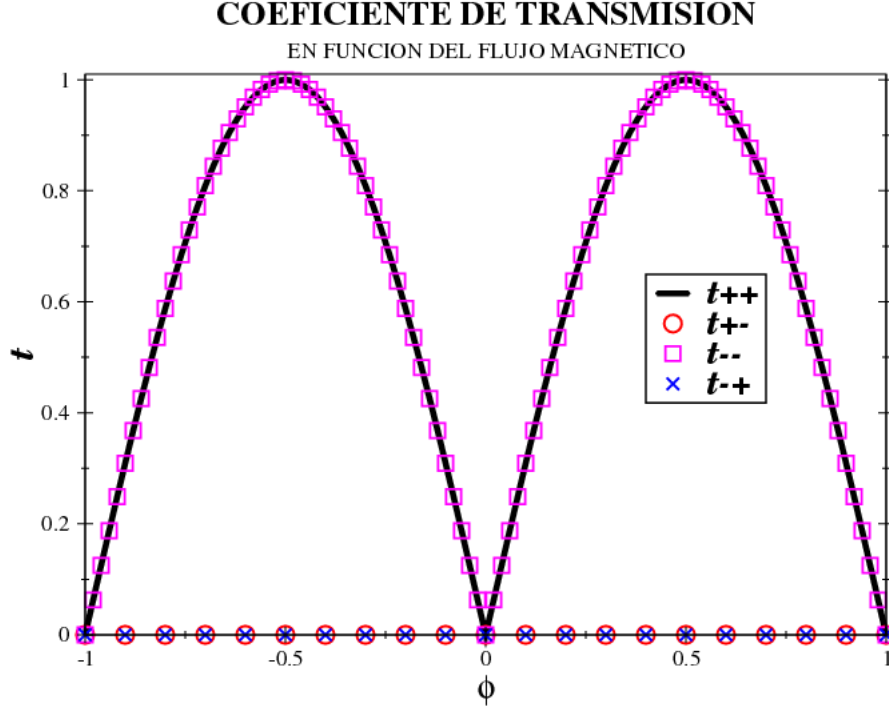


Figura 7.2: Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 2,  $E/t = 1$

El enfoque que utilizaremos para buscar las condiciones de filtraje efectivo, será mediante la Asimetría de transmisión de estados de espín, que definiremos como la resta de los coeficientes de transmisión que reflejen el estado (+) al detector  $D_i$ , menos el estado (-) al mismo detector.

$$\mathcal{A}^{D_i} = (t_{++}^{D_i} + t_{+-}^{D_i}) - (t_{--}^{D_i} + t_{-+}^{D_i}), \quad (7.1)$$

donde los coeficientes  $t_{\tau\lambda}^{D_i}$  se calculan según las ecuaciones (6.1) y (6.2) para el detector 1 y 2 respectivamente.

Para observar el comportamiento de la asimetría en función de los parámetros<sup>1</sup>  $(\alpha, \beta)$ , ésta se gráfico para un flujo magnético  $\phi$  fijo para ambos detectores. Estos resultados se representan en las figuras 7.3 y 7.4.

<sup>1</sup>en las unidades  $[\hbar\alpha] = eVm$ ,  $[\hbar\beta] = eVm$

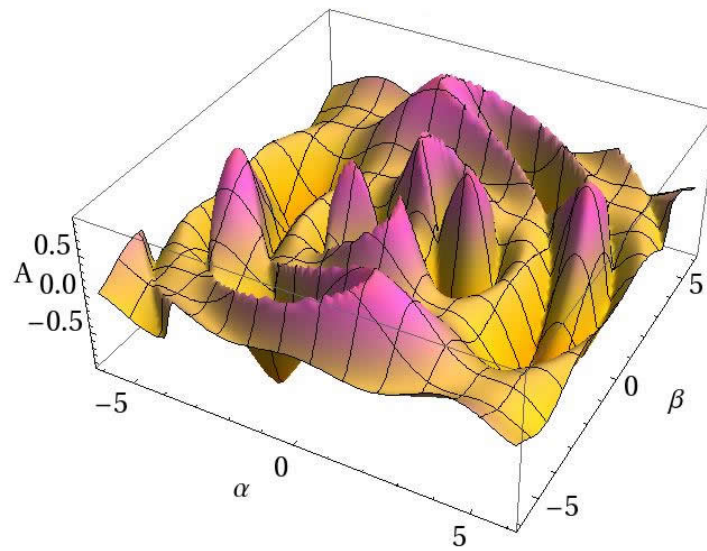


Figura 7.3: Asimetría para el detector 1 con  $\alpha$  y  $\beta$  variables para  $\phi = 0,95$ , con  $E/t = 1$ .

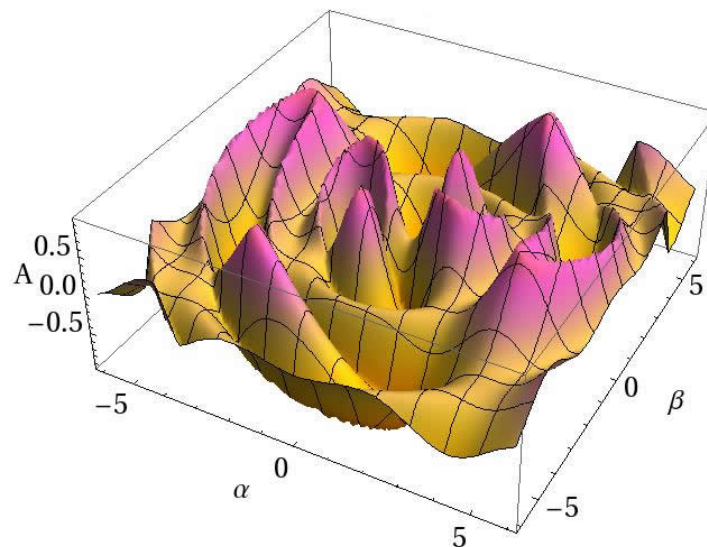


Figura 7.4: Asimetría para el detector 2 con  $\alpha$  y  $\beta$  variables para  $\phi = 0,95$ , con  $E/t = 1$ .

Realizando un barrido en el espacio de parámetros  $(\alpha, \beta, \phi)$  para  $E/t = 1$ , se encontró numéricamente la condición para la cual la asimetría (ver ec. (7.1)) fue de  $\mathcal{A}^{D_i} \approx 0,999$  para cada detector en particular. En el caso del detector 1 los valores para la condición de filtrado fueron los siguientes(ver fig. 7.3):

$$\alpha = -1,787 \quad \beta = 4,353 \quad \phi = 0,953. \quad (7.2)$$

Ahora podemos variar dos de los tres parámetros  $(\alpha, \beta, \phi)$  en un entorno de la condición de filtrado, por ejemplo la condición (7.2), y ver como varía la asimetría definida en la ecuación (7.1). En la figura 7.5 observamos lo que ocurre con la asimetría en el detector 1 al variar  $\alpha$  y  $\beta$ .

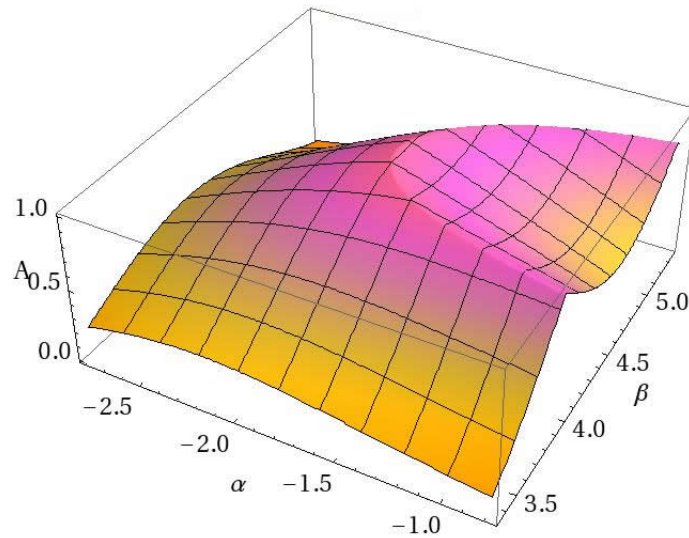


Figura 7.5: Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1, con  $E/t = 1$ .

También podemos ver en la figura 7.6 qué sucede simultáneamente en ambos detectores con  $\alpha$  y  $\beta$  variables.

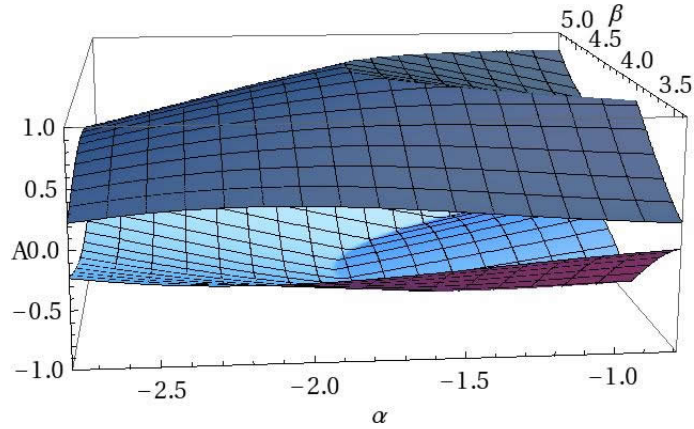


Figura 7.6: Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con  $E/t = 1$ .

En las figuras 7.6 y 7.7 notamos que la asimetría en un detector se puede ver como la reflexión del otro detector en el plano horizontal donde  $A = 0$ .

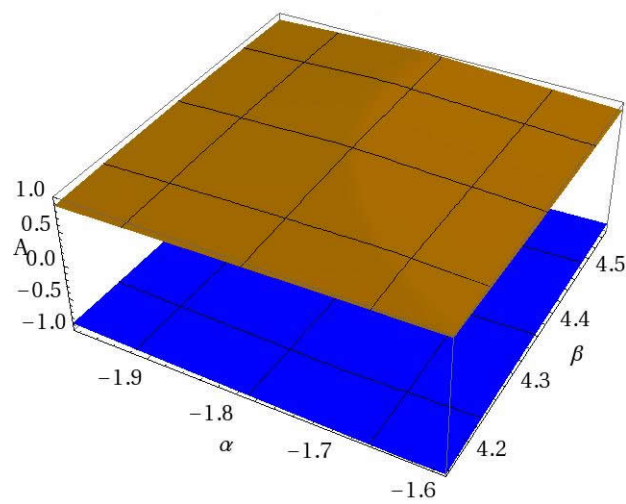


Figura 7.7: Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con  $E/t = 1$  (notar los valores de los parámetros).

Otro resultado interesante lo podemos ver en la figura 7.8, aquí se varían  $\alpha$  y  $\phi$  en el entorno de la condición de máximo filtrado del detector 1, donde se observa que la asimetría oscila rápidamente con la variación del flujo magnético; en la figura 7.9 observamos las oscilaciones de la asimetría para ambos detectores bajo estas mismas condiciones anteriores. Este comportamiento es cualitativamente similar cuando variamos  $\beta$  y  $\phi$  para la condición de filtrado en el detector 1; esto lo podemos ver en las figuras 7.10 y 7.11

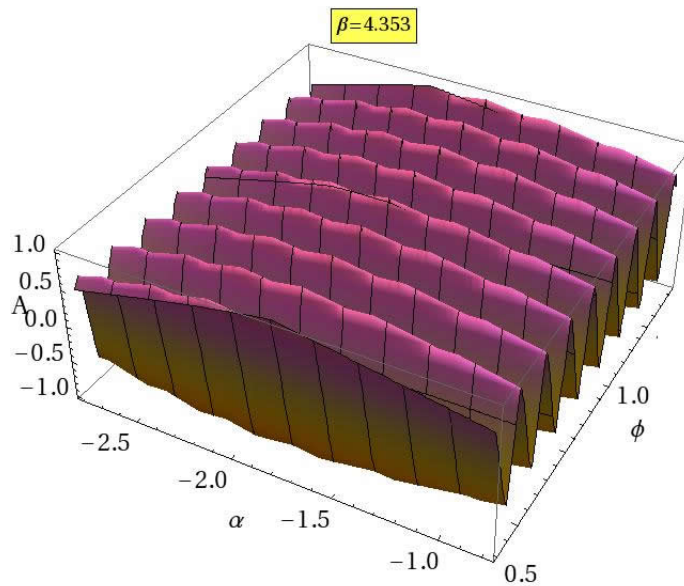


Figura 7.8: Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\beta$  fijo, con  $E/t = 1$ .

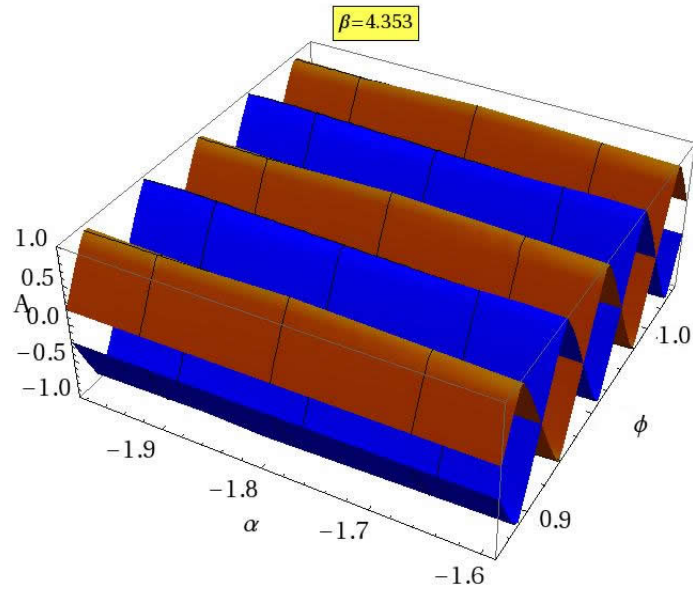


Figura 7.9: Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\beta$  fijo, con  $E/t = 1$ .

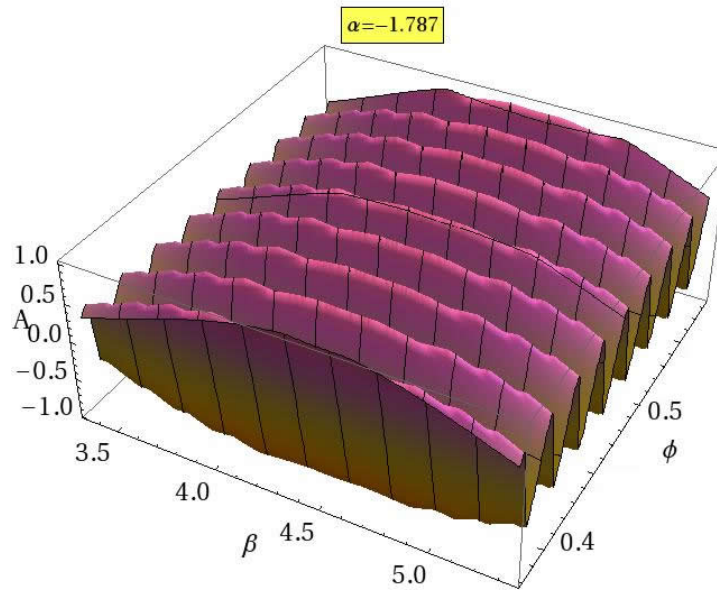


Figura 7.10: Asimetría para el detector 1 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\alpha$  fijo, con  $E/t = 1$ .



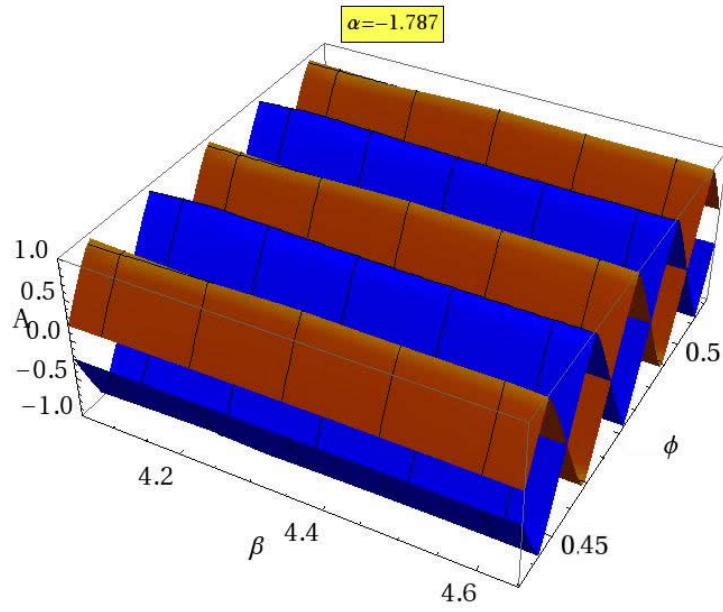


Figura 7.11: Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\alpha$  fijo, con  $E/t = 1$ .

Adicionalmente, debemos destacar que para flujo magnético cero la asimetría desaparece; esto lo podemos observar para cada detector en la figuras 7.12 y 7.13.

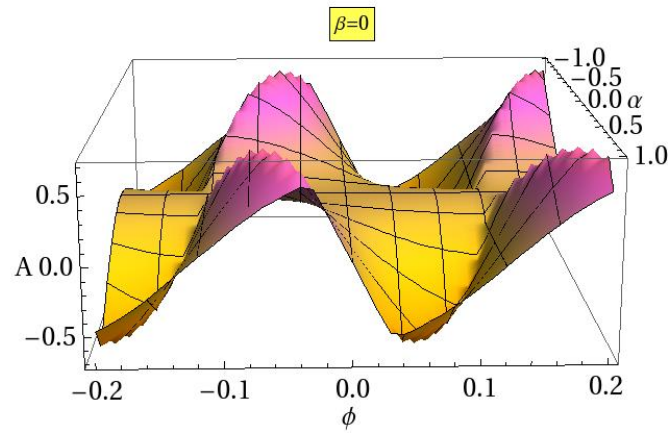


Figura 7.12: Asimetría para el detector 1, con  $E/t = 1$ . Para flujos magnéticos cercanos a cero la asimetría desaparece.

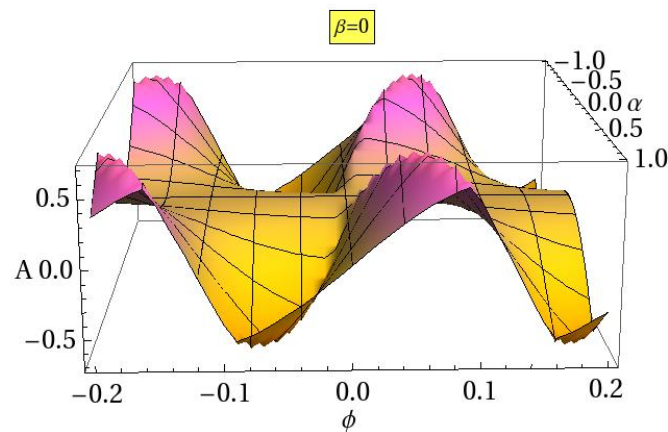


Figura 7.13: Asimetría para el detector 2, con  $E/t = 1$ . Para flujos magnéticos cercanos a cero la asimetría desaparece.

En las figuras 7.14 y 7.15 tenemos los coeficientes de transmisión como función de la energía para la condición (7.2) para cada detector por separado.

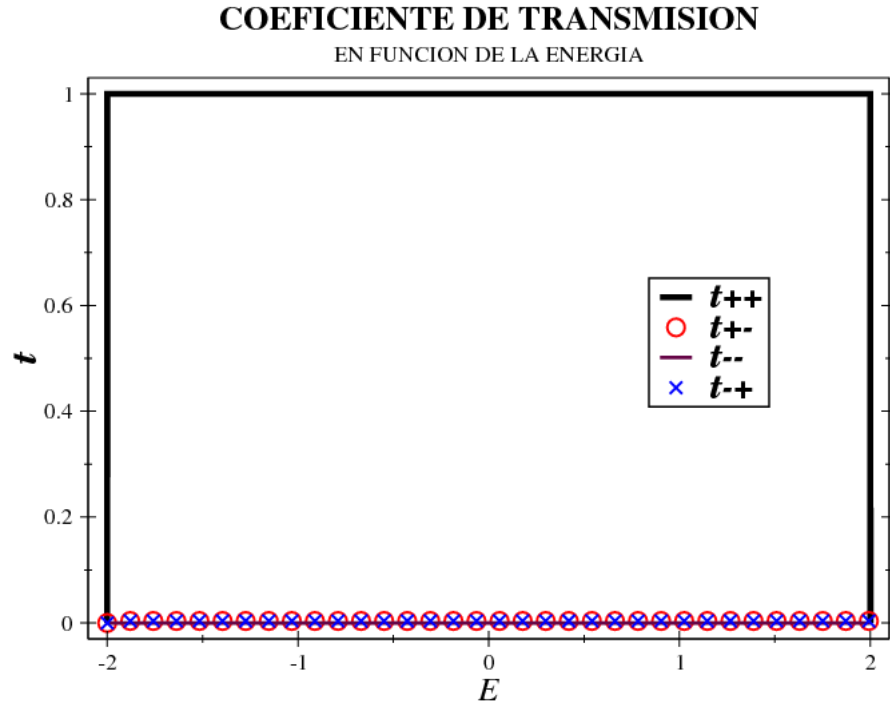


Figura 7.14: Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 1:  $\alpha = -1,787$ ,  $\beta = 4,353$  y  $\phi = 0,953$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

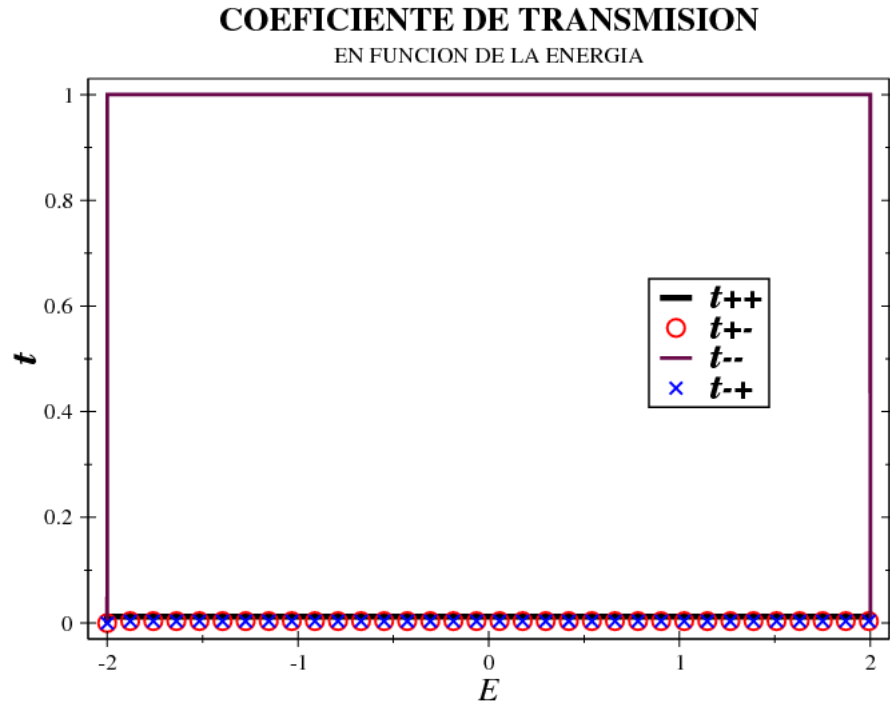


Figura 7.15: Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 1:  $\alpha = -1,787$ ,  $\beta = 4,353$  y  $\phi = 0,953$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

Para el detector 2 la condición de filtrado para  $E/t = 1$  se da para los siguientes valores:

$$\alpha = -1,787 \quad \beta = 4,353 \quad \phi = 0,984. \quad (7.3)$$

En las figuras 7.16 y 7.17 tenemos los coeficientes de transmisión como función de la energía para la condición (7.3) para cada detector por separado.

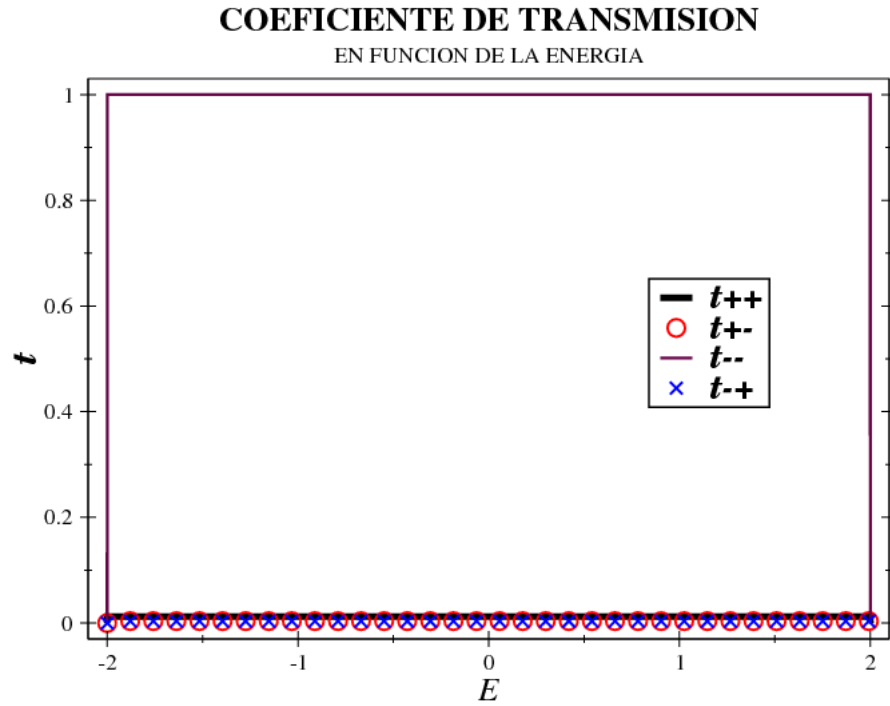


Figura 7.16: Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 2:  $\alpha = -1,787$ ,  $\beta = 4,353$  y  $\phi = 0,984$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

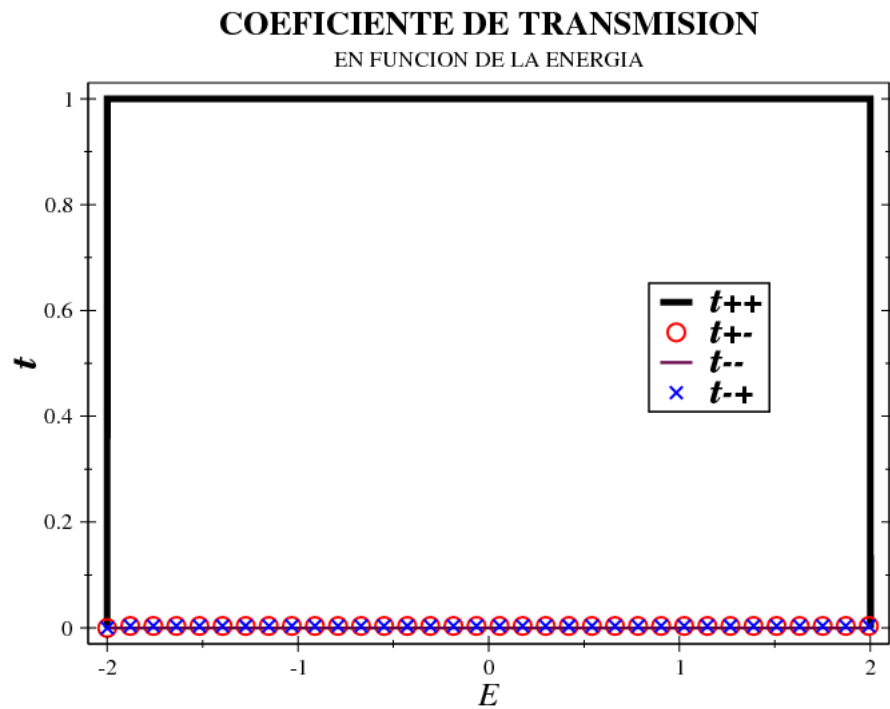


Figura 7.17: Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 2:  $\alpha = -1,787$ ,  $\beta = 4,353$  y  $\phi = 0,984$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

Observamos en las figuras 7.14,7.15,7.16 y 7.17 que para ambas condiciones (7.2) y (7.3), cuando un detector filtra efectivamente un estado de espín el otro detector filtra el estado opuesto. Otro aspecto importante a destacar es el hecho de que el filtrado no depende del valor de la energía en la banda.

Ahora imponiendo la condición de Hatano:

$$\alpha = 1,997 \quad \beta = 0 \quad \phi = \pi/4, \quad (7.4)$$

obtenemos que no ocurre filtrado, lo podemos ver en las figuras 7.18 y 7.19.

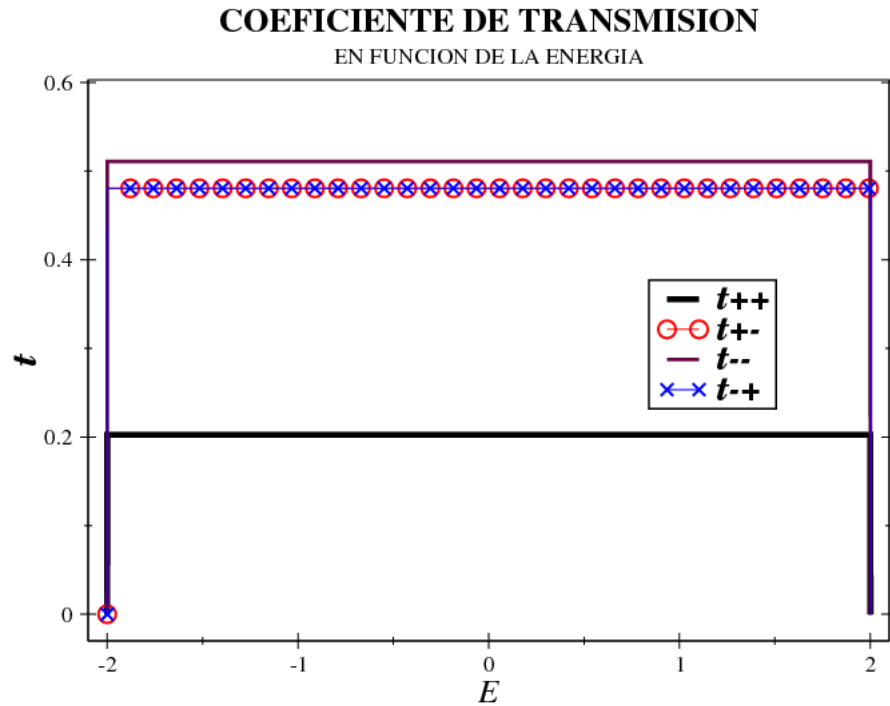


Figura 7.18: Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano:  $\alpha = 1,997$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

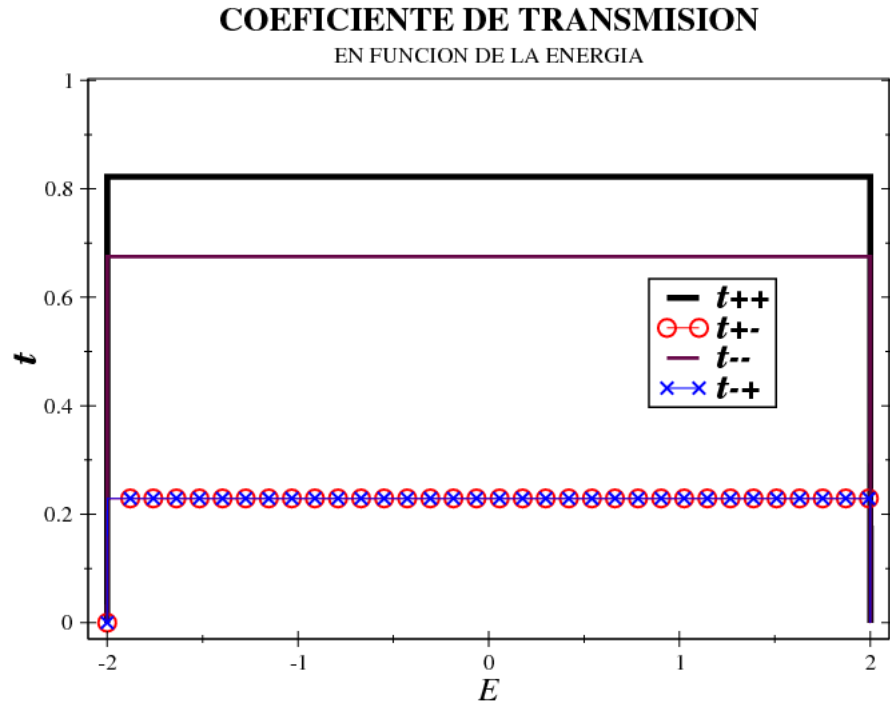
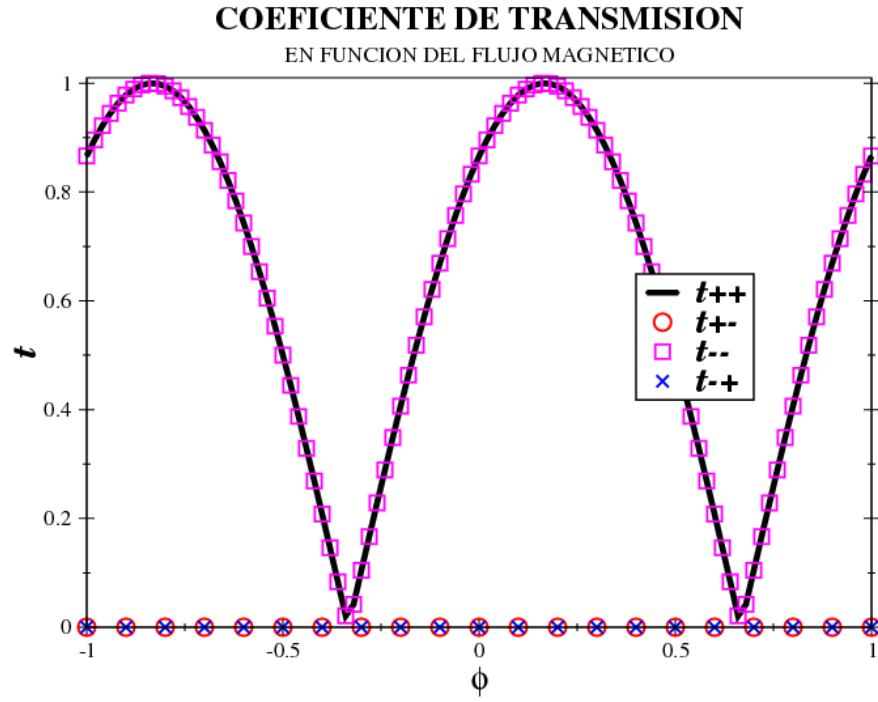


Figura 7.19: Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano:  $\alpha = 1,997$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

## 7.2. Modelo Tight-Binding MZI Asimétrico

Siguiendo el esquema de la sección anterior, se muestran en las figuras 7.20 y 7.21 las oscilaciones Aharonov-Bohm.

Figura 7.20: Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 1,  $E/t = 1$



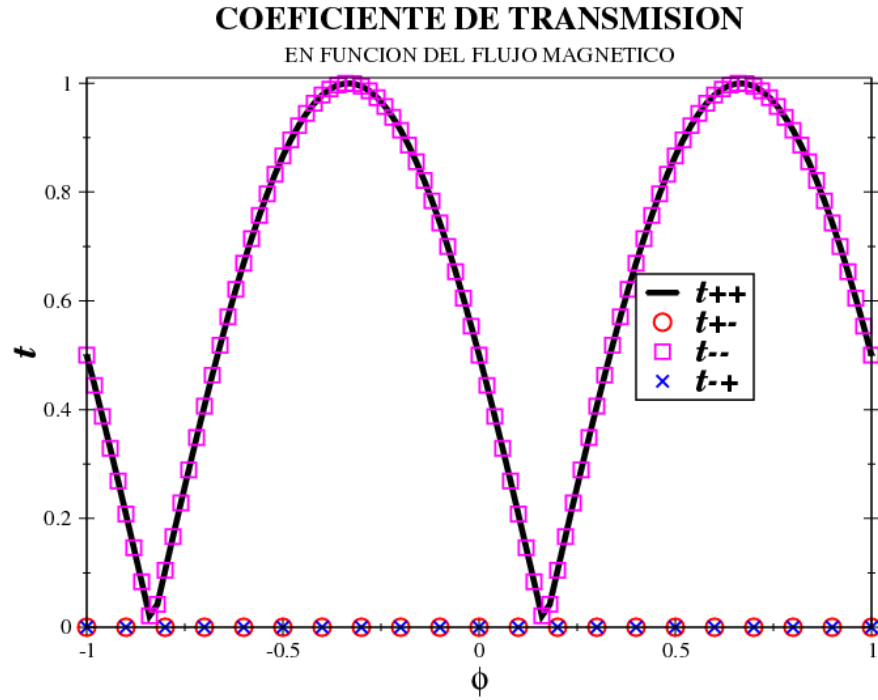


Figura 7.21: Oscilaciones Aharonov-Bohm para el detector 2,  $E/t = 1$

En las figuras 7.22 y 7.23 se presentan los resultados de la asimetría en función de los parámetros  $(\alpha, \beta)$  para ambos detectores y con  $\phi$  fijo .

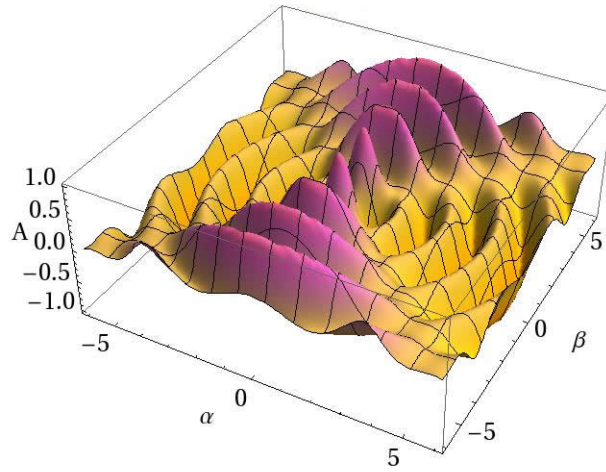


Figura 7.22: Asimetría para el detector 1 con  $\alpha$  y  $\beta$  variables para  $\phi = 0,25$ , con  $E/t = 1$ .

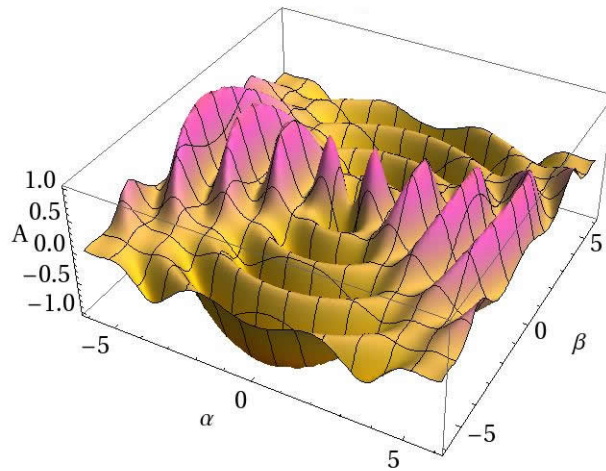


Figura 7.23: Asimetría para el detector 2 con  $\alpha$  y  $\beta$  variables para  $\phi = 0,25$ , con  $E/t = 1$ .

Las condiciones de filtrado halladas numéricamente cuando la asimetría  $\mathcal{A}^{D_i} \approx 0,999$  para el detector 1 con  $E/t = 1$  son:

$$\alpha = 0,01 \quad \beta = 5,496 \quad \phi = 0,2565. \quad (7.5)$$

En la figura 7.24 se muestra que ocurre con la asimetría en los detectores en el entorno de la condición de filtrado del detector 1, variando  $\alpha$  y  $\beta$ ; este resultado contrasta con el obtenido para el caso simétrico (ver fig. 7.6).

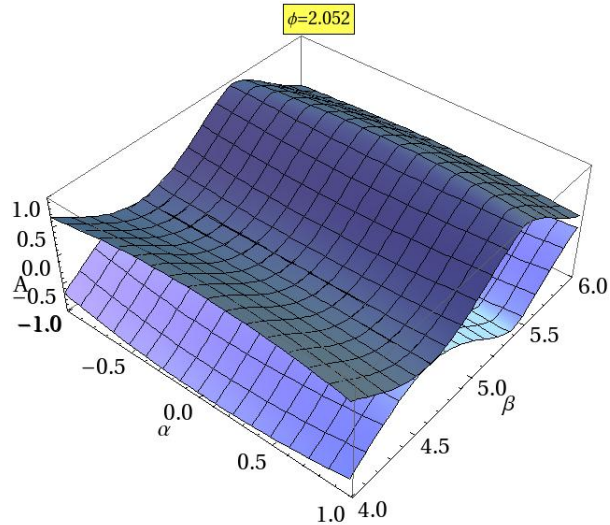


Figura 7.24: Asimetría para los detectores 1(arriba) y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para flujo magnético fijo, con  $E/t = 1$ .

Si variamos  $\alpha$  y  $\phi$  cerca de la condición de filtrado del detector 1 se obtienen las oscilaciones que ya vimos en el caso simétrico (ver fig. 7.25). Para el caso en que variamos  $\beta$  y  $\phi$  (ver fig. 7.26) podemos ver que el comportamiento de las oscilaciones al variar  $\phi$  es similar en los otros casos pero notamos una diferencia y es que al variar  $\beta$  también se notan oscilaciones.

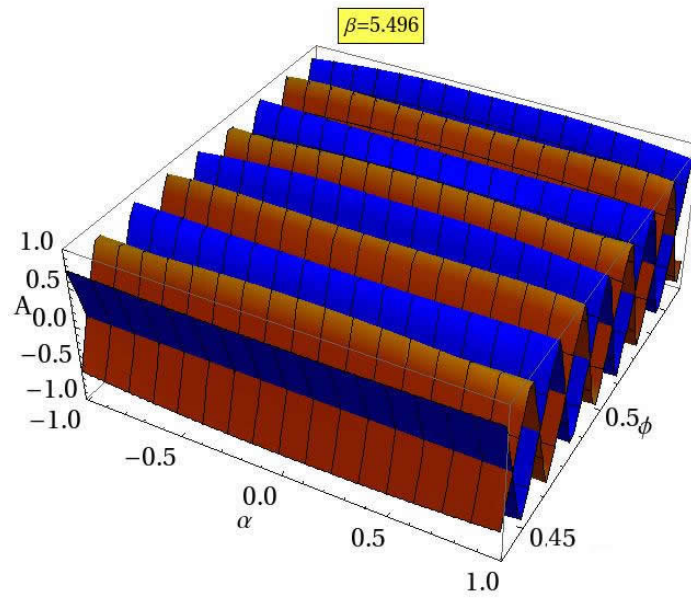


Figura 7.25: Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\beta$  fijo, con  $E/t = 1$ .

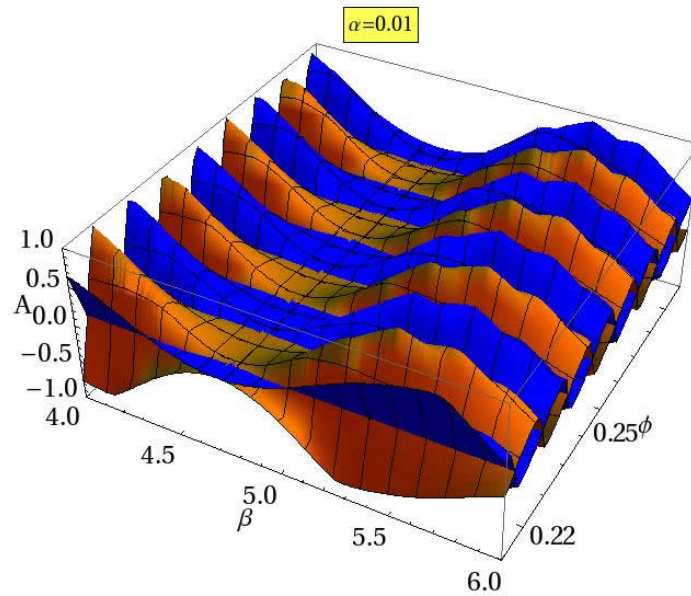


Figura 7.26: Asimetría para los detectores 1 y 2 en el entorno de la condición de filtrado del detector 1 para  $\alpha$  fijo, con  $E/t = 1$ .

Bajo la condición(7.5) se obtiene que el filtrado depende del valor de la energía en la banda y que el filtrado se intercambia de acuerdo al valor de la energía, ver figuras 7.27 y 7.28. Igual que en el caso simétrico cuando un detector filtra un estado, el otro detector filtra el estado opuesto.

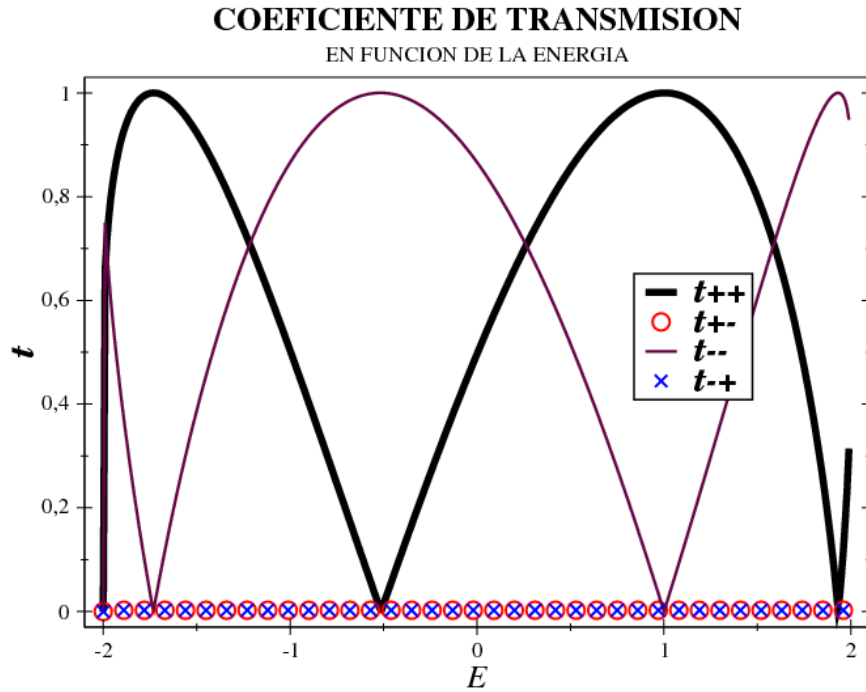


Figura 7.27: Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 1:  $\alpha = 0,01$ ,  $\beta = 5,496$  y  $\phi = 0,2565$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

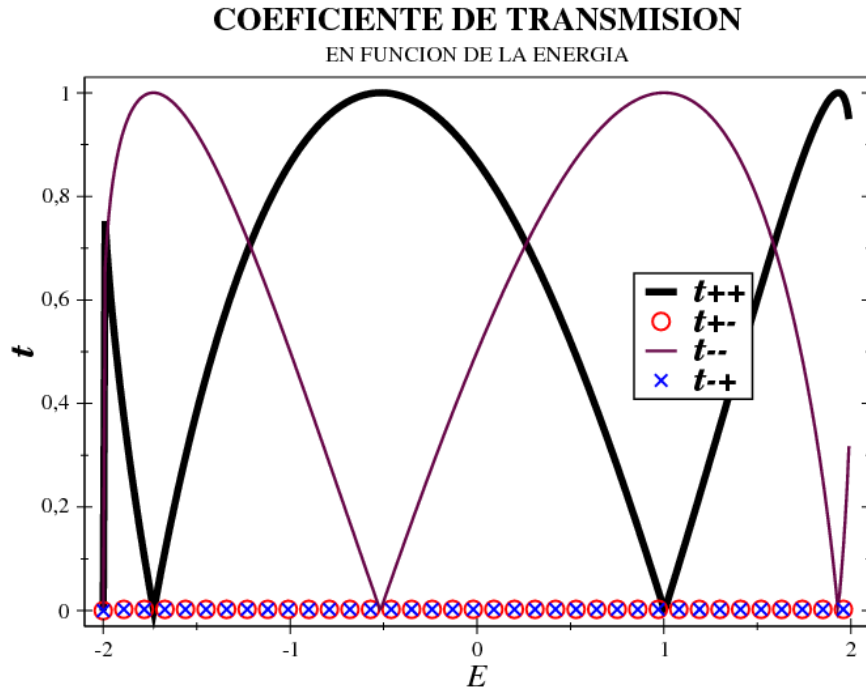


Figura 7.28: Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 1:  $\alpha = 0,01$ ,  $\beta = 5,496$  y  $\phi = 0,2565$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

Para el detector 2 se halló la condición de filtrado para  $\mathcal{A}^{D_i} \approx 0,98$  con  $E/t = 1$ :

$$\alpha = 2,4 \quad \beta = 0 \quad \phi = -3,95,$$

en las figuras 7.29 y 7.30 se presentan los resultados bajo la condición de filtrado en el detector 2.

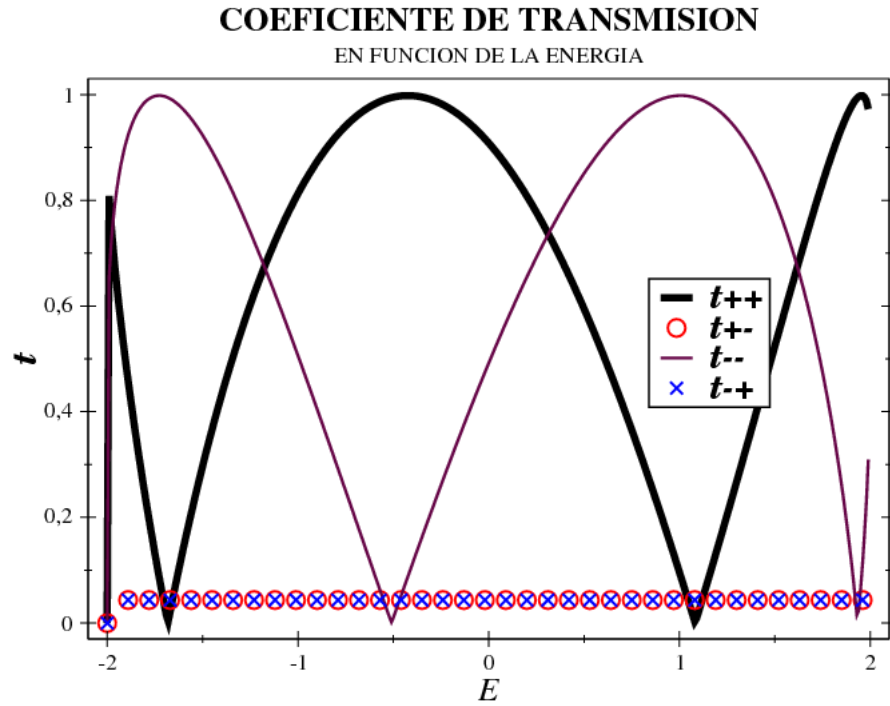


Figura 7.29: Para el detector 1 en la condición de filtrado del detector 2:  $\alpha = 2,4$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = -3,95$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

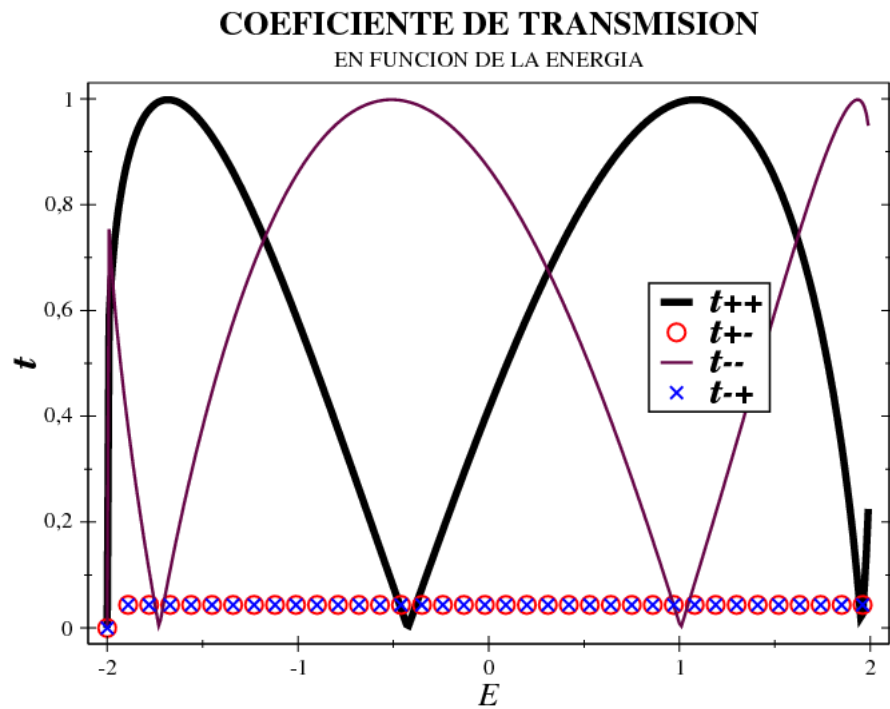


Figura 7.30: Para el detector 2 en la condición de filtrado del detector 2:  $\alpha = 2,4$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = -3,95$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

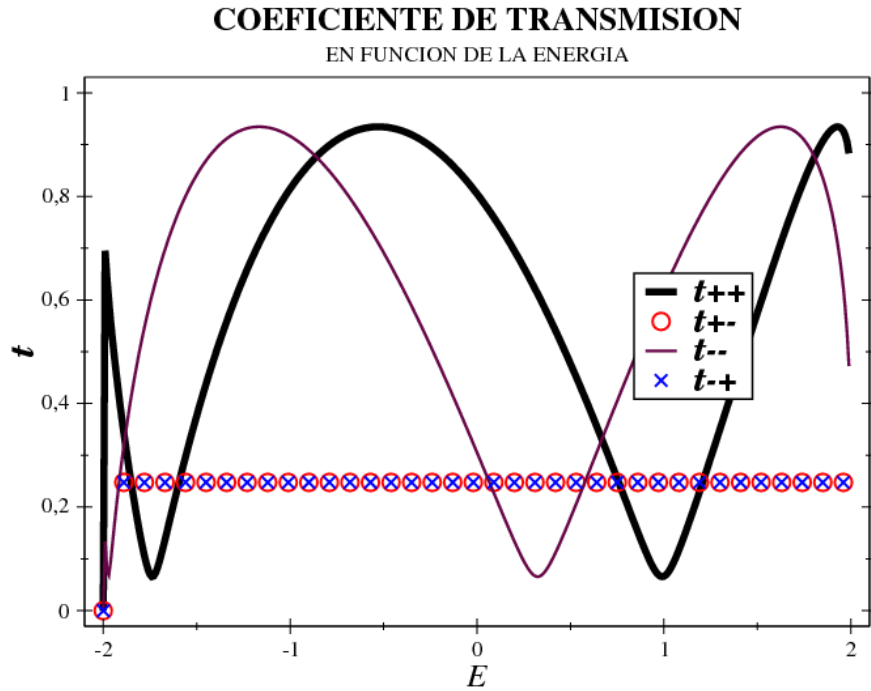


Figura 7.31: Para el detector 1 en la condición de filtrado de Hatano:  $\alpha = 1,997$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

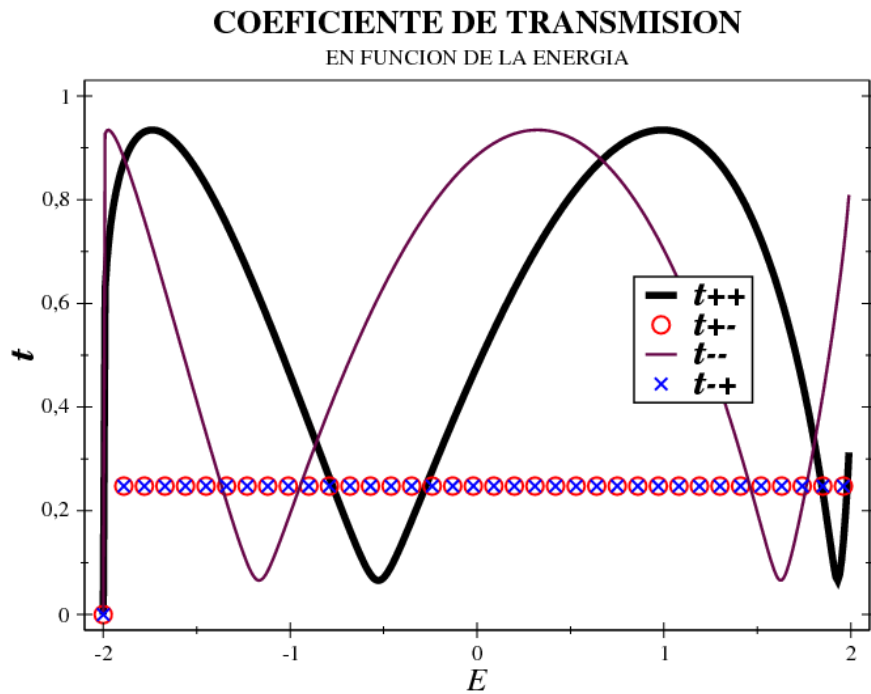


Figura 7.32: Para el detector 2 en la condición de filtrado de Hatano:  $\alpha = 1,997$ ,  $\beta = 0$  y  $\phi = \pi/4$ ; con el parámetro de salto  $t = 1$ .



Si utilizamos la condición de Hatano (7.4), observamos en las figuras 7.31 y 7.32 que no ocurre filtrado. También podemos observar en las figuras 7.33 y 7.34 lo que ocurre en ausencia de flujo magnético en cada detector.

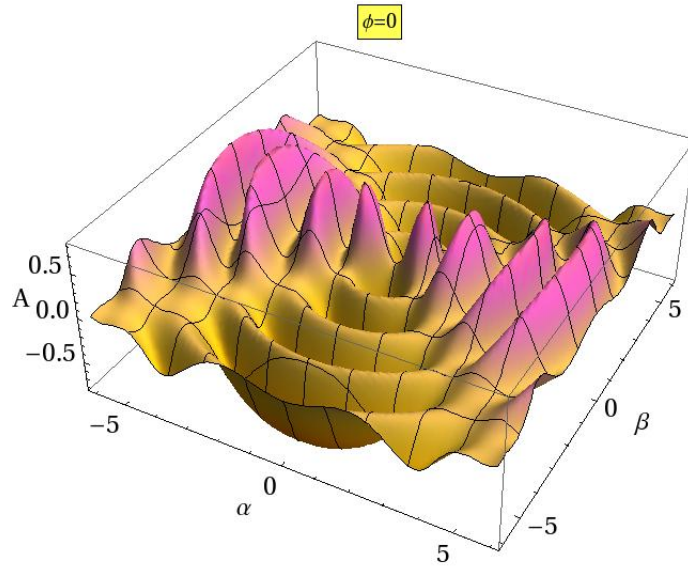


Figura 7.33: Asimetría para el detector 1 en ausencia de flujo magnético, con  $E/t = 1$ .

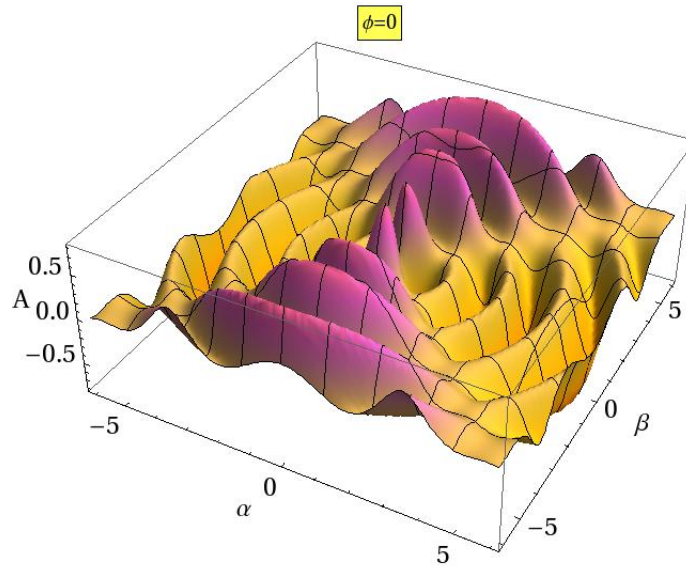


Figura 7.34: Asimetría para el detector 2 en ausencia de flujo magnético, con  $E/t = 1$ .

Notamos que para el interferómetro asimétrico existe una asimetría diferente de cero, contrario a lo que ocurre en el caso simétrico; esto se debe a la diferencia de caminos que existe en el interferómetro asimétrico. Finalmente podemos observar este comportamiento como función de la energía para cada detector en las figuras 7.35 y 7.36, para el caso en que la asimetría es máxima.

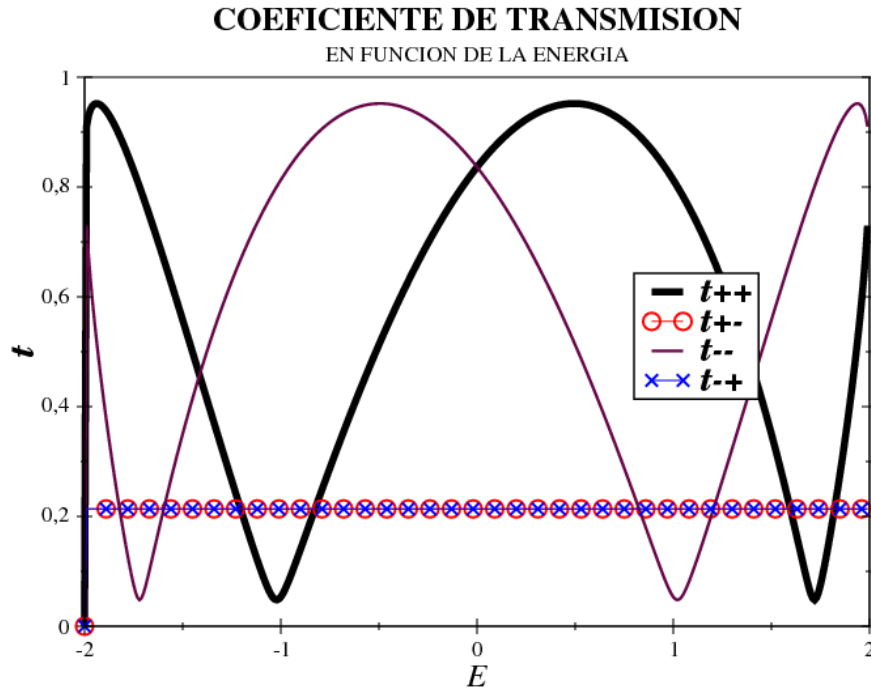


Figura 7.35: Para el detector 1 en la condición de asimetría máxima en ausencia de flujo magnético; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

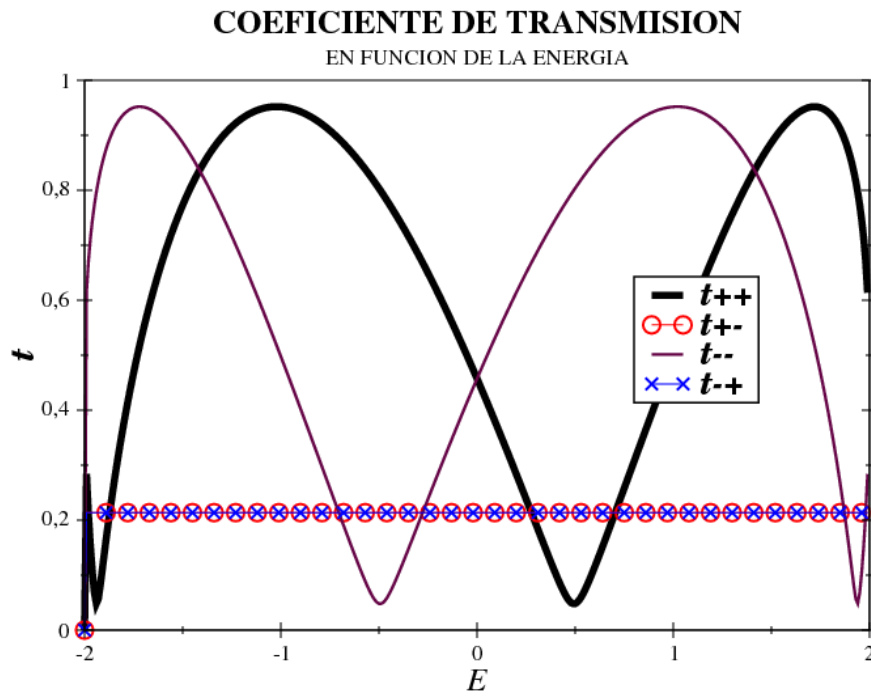


Figura 7.36: Para el detector 2 en la condición de asimetría máxima en ausencia de flujo magnético; con el parámetro de salto  $t = 1$ .

## Discusión y Conclusiones

- Se estableció la interacción espín-órbita en gases de electrones bidimensionales mediante la obtención de los hamiltonianos Rashba y Dresselhaus. Se obtuvo la representación de estos hamiltonianos bajo la aproximación Tight-Binding la cual nos permitió, junto con el enfoque de las autoenergías y funciones de Green, obtener la descripción de sistemas fermiónicos con geometría bidimensional y calcular numéricamente la transmisión entre sistemas abiertos y este tipo de sistemas.
- Se reprodujeron los resultados obtenidos por Hatano y Chen [28,31] para el circuito cuadrado de interferencia desarrollado bajo la aproximación Tight-Binding. En este caso, se obtiene la condición para la cual el dispositivo mencionado filtra una componente de espín. La idea principal es calcular la fase que se obtiene al dar una vuelta en el circuito donde existe un flujo magnético e interacción espín-órbita. Luego se calculó la condición de filtrado derivada de esta fase, esta restricción supone el ajuste de los flujos magnético y “Rashba” para lograr la interferencia constructiva y destructiva; esto asegura el compromiso entre el efecto Aharonov-Bohm debido al campo magnético y el efecto Aharonov-Casher debida a la interacción espín-órbita en gases de electrones bidimensionales.

- Aunque los resultados de Hatano y Chen [28, 31] suponen la obtención de un filtro perfecto de espín, existe el inconveniente de que el filtraje no se realiza en la base original de la descripción del espín de entrada. Aún más, la forma de calcular la condición de filtrado sugiere el hecho de que se busca el filtrado en el punto de entrada al dispositivo cuando en realidad se calculan las transmisiones entre la entrada y la salida del circuito; en este punto sólo resaltamos que el principio de funcionamiento del filtro perfecto de Hatano no queda completamente comprendido ni establecido.
- Se estudió numéricamente un nuevo esquema de filtrado de espín mediante el interferómetro electrónico Mach-Zender propuesto por López, Medina, Bolívar y Berche [1]. Este modelo lo llamamos MZI simétrico. Utilizando el enfoque de “asimetría de transmisión” se hallaron las condiciones de filtrado efectivo de espín en la base original de entrada de espín. El dispositivo se inspira en el trabajo de Hatano y Chen: utilizar la interacción espín-órbita y un campo magnético externo en gases de electrones bidimensionales, donde podemos aplicar la aproximación Tight-Binding y calcular numéricamente las transmisiones mediante inversiones de matrices.
- Adicionalmente se propuso un nuevo modelo llamado MZI asimétrico, el cual es una modificación del modelo simétrico. En este caso, se repitió el método aplicado al caso simétrico.
- En ambos modelos se obtuvo que cuando un detector obtiene un valor de asimetría el otro obtuvo el negativo del mismo valor, lo que significa que ambos detectores filtran opuestamente las componentes de espín.
- Para el caso del modelo simétrico obtuvimos que el filtraje ocurre en todo el ancho de banda del dispositivo, para el caso asimétrico no se cumplió esta situación, lo que quiere decir que para ciertos valores de la energía el detector no actuará como filtro.

- Finalmente, obtuvimos que para flujo magnético cero el modelo asimétrico puede funcionar como filtro de espín. Este ocurre porque en el modelo asimétrico existe una diferencia de caminos al contrario de lo que ocurre en el caso simétrico, donde los dos caminos para llegar a un detector tienen la misma longitud. Este fenómeno sugiere la posibilidad de cambiar la longitud de uno de los caminos o brazos para el interferómetro MZI [1] para obtener el filtrado sin el requerimiento de la presencia de un campo magnético. Esto parece plausible también si para el interferómetro MZI [40] se ajusta de tal manera que exista una diferencia de caminos para producir el filtrado.

# Bibliografía

- [1] Alexander López, Ernesto Medina, Nelson Bolívar y Bertrand Berche, *A perfect spin filtering device through Mach-Zender interferometry in a GaAs/AlGaAs electron gas*, J. Phys.: Condens Matter **22** (2010), 115303.
- [2] Neil Ashcroft, *Solid state physics*, 1ra ed., Harcourt College Publishers, Orlando, 1976.
- [3] Branislav K. Nikolić, Liviu P. Zârbo y Satofumi Souma, *Imaging mesoscopic spin Hall flow: Spatial distribution of local spin currents and spin densities in and out of multiterminal spin-orbit coupled semiconductor nanostructures*, Phys. Rev. B. **73** (2006), 075303.
- [4] Daniel S. Fisher y Patrick A. Lee, *Relation between conductivity and transmission matrix*, Phys. Rev. B. **23** (1981), 6851.
- [5] Dariusz Chruściński y Andrzej Jamiołkowski, *Geometric phases in classical and quantum mechanics*, Progress in mathematical physics (Boston) (Gerald Kaiser Anne Boutet de Monvel, ed.), vol. 36, Birkhäuser, 2004.
- [6] Supriyo Datta, *Quantum Transport: atom to transistor*, 1ra ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2005.
- [7] David J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, 2da ed., Pearson, New Jersey, 2005.

- 
- [8] G. Dresselhaus, *Spin-orbit couplings effects in zinc-blende structures*, Phys. Rev. **100** (1955), 580.
- [9] Ernesto Medina, *Manipulation of spin in semiconductors: Spin-orbit interaction and berry phases*, School/Workshop on Spin Manipulation and Spin-Orbit Coupling: Semiconductors and Superconductors (Choroni, Venezuela), Noviembre 2008.
- [10] Cohen-Tannoudji et al, *Quantum Mechanics vol 1*, 9 ed ed., Dover, New York, 1973.
- [11] Gerald D. Mahan, *Many-particle physics*, 2da ed., Plenum Press, New York, 1990.
- [12] Walter Greiner, *Quantum Mechanics, an introduction*, 4ta ed., Springer, Berlin, 2000.
- [13] Walter Greiner, *Relativistic Quantum Mechanics, wave equations*, 3ra ed., Springer, Berlin, 2000.
- [14] Hans-Andreas Engel, Emmanuel I. Rashba y Bertrand I. Halperin, *Theory of spin hall effects*, Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials (Berlin) (Helmut Kronmuller y Stuart Parkin, ed.), vol. 5, Wiley, 2007.
- [15] Horacio M. Pastawski y Ernesto Medina, *'tight binding' methods in quantum transport through molecules and small devices: From the coherent to the decoherent description*, arXiv:cond-mat/0103219v1 [cond-mat.mes-hall].
- [16] Thomas Ihn, *Semiconductors Nanostructures, quantum states and electronic transport*, 1ra ed., Oxford University Press, New York, 2010.
- [17] J. Carlos Egues, *Manipulating spins via their orbital coupling*, School/Workshop on Spin Manipulation and Spin-Orbit Coupling: Semiconductors and Superconductors (Choroni, Venezuela), Noviembre 2008.



- 
- [18] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova y T. Jungwirth, *Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*, Phys. Rev. Lett. **94** (2005), 047204.
- [19] J. Zhou, M.W. Wu y M.Q. Weng, *Spin-dependent hole quantum transport in Aharonov–Bohm ring structure: possible schemes for spin filter*, Phys. Rev. A. **349** (2006), 393.
- [20] John J. Quinn y Kyung-Soo Yi, *Solid State Physics, principles and modern applications*, 1ra ed., Springer, Berlin, 2009.
- [21] K. Sasada y N. Hatano, *Calculation of the self-energy of open quantum systems*, J. Phys. Soc. Jpn. **77** (2008), no. 2, 025003.
- [22] Charles Kittel, *Introduction to solid state physics*, 7ma ed., John Wiley Sons, Inc., New York, 1996.
- [23] Jan G. Korvink, *Semiconductors for Micro and Nanotechnology, an introduction for engineers*, 1ra ed., Wiley-VCH, Berlin, 2002.
- [24] Lewis H. Ryder, *Quantum Field Theory*, 2da ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2001.
- [25] Peter Y. Yu y Manuel Cardona, *Fundamental of Semiconductors, physics and materials properties*, 3ra ed., Springer, Berlin, 2005.
- [26] Ben Mills, *Sphalerite-unit-cell-depth-fade-3d-balls.png*, <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Sphalerite-unit-cell-depth-fade-3D-balls.png> .
- [27] Lok Lew Yan Voon y Morten Willatzen, *The k.p Method, properties of semiconductors*, 1ra ed., Springer, Berlin, 2009.
- [28] N. Hatano, R. Shirasaki y H. Nakamura, *Non-Abelian gauge field theory of the spin-orbit interaction and a perfect spin filter*, Phys. Rev. A. **75** (2007), 032107.

- 
- [29] Donald A. Neamen, *Semiconductor Physics and Devices, basic principles*, 3ra ed., Mc Graw-Hill, New York, 2003.
- [30] Roland Winkler, *Spin-orbit coupling in semiconductors*, School/Workshop on Spin Manipulation and Spin-Orbit Coupling: Semiconductors and Superconductors (Choroni, Venezuela), Noviembre 2008.
- [31] S. Chen y C. Chang, *Non-Abelian spin-orbit gauge: Persistent spin helix and quantum square ring*, Phys. Rev. B. **77** (2008), 045324.
- [32] J.J. Sakurai, *Advanced quantum mechanics*, Addison-Wesley, Reading,MA, 1967.
- [33] Franz Schwabl, *Advanced quantum mechanics*, 4ta ed., Springer, Berlin, 2008.
- [34] Jasprit Singh, *Electronic and Optoelectronic Properties of Semiconductor Structures*, 1ra ed., Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [35] Supriyo Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge studies in semiconductor physics and microelectronic engineering (Cambridge) (Haroon Ahmed, Michael Pepper y Alec Broers, ed.), vol. 3, Cambridge University Press, 1995.
- [36] Vanessa Torres Montilla , *Efectos topológicos y cuantización en corrientes de espín*, Trabajo Especial de Grado, Escuela de Física, Universidad Central de Venezuela. Tutores: Ernesto Medina, Alexander López, 2010.
- [37] Roland Winkler, *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*, Springer Tracts in Modern Physics (Berlin) (Karlsruhe G. Höhler, ed.), vol. 191, Springer, 2003.
- [38] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, D. D. Awschalom, *Observation of the spin hall effect in semiconductors*, Science **306** (2004), 1910.
- [39] Yakir Aharonov y Benni Reznik, *Complementarity between Local and Nonlocal Topological Effects*, Phys. Rev. Lett. **21** (2000), 4790.

- [40] Yang Ji, Yunchul Chung, D. Sprinzak, M. Heiblum, D. Mahalu y Hadas Shtrikman, *An electronic mach–zehnder interferometer*, Nature **422** (2003), 415.

