

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS



**ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE PAQUETES DE ONDA
ESPÍN POLARIZADOS EN PRESENCIA DEL
ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA**

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE

FÍSICO

PRESENTA

MARYSOL OCHOA FAJARDO

Ensenada, Baja California

Diciembre de 2006

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA
FACULTAD DE CIENCIAS

“ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE PAQUETES DE ONDA ESPÍN
POLARIZADOS EN PRESENCIA DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN-
ÓRBITA”

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

MARYSOL OCHOA FAJARDO

APROBADO POR:



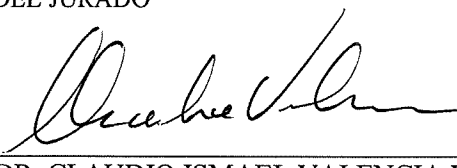
DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA

PRESIDENTE DEL JURADO



DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ

SECRETARIO



DR. CLAUDIO ISMAEL VALENCIA YAVES

IER. VOCAL

Dedicatoria

A mis padres Jesus y Beatriz
El amor de mi vida

A mis hermanos Luis, Jesus, Mario, Cecilia, Bardo, Luisa y
Ernesto
Por ser y estar

A mis sobrinos
Con todo mi amor

En especial a Irma, Eli , Mashenka, Max y Eric
Con mucho cariño y admiración

Agradecimientos

Agradezco:

Al Dr. Francisco Mireles por ser modelo de valor y sabiduría, por su desinteresada y generosa labor de transmisión del saber, su inagotable entusiasmo y sus acertados consejos y sugerencias.

A los miembros del comité tutorial: Dr. Francisco Mireles director de mi tesis, Dr. Roberto Romo como secretario y al Dr. Claudio Valencia como 1er vocal.

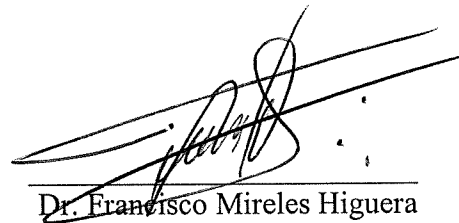
A mis profesores, compañeros, amigos y a todos aquellos que hicieron posible la confección y elaboración de este trabajo.

A toda mi familia, quienes con el paso del tiempo aprendieron a confiar en mí y respetar mis decisiones. Es muy grato saber que cuento con su apoyo, cariño y comprensión.

Resumen de la tesis de Marysol Ochoa Fajardo presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física. Ensenada, Baja California, México. Diciembre del 2006.

ESTUDIO DE LA DINÁMICA DE PAQUETES DE ONDA ESPÍN POLARIZADOS EN PRESENCIA DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN- ÓRBITA

Resumen aprobado por:



Dr. Francisco Mireles Higuera

Resumen:

Se estudió el transporte de paquetes de onda electrónicos *espín polarizados* a través de una heteroestructura semiconductor unidimensional en presencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba. En particular, se estudió el efecto del acoplamiento espín-órbita de Rashba local sobre la transmisión de paquetes Gaussianos con espines polarizados a través de barreras de potencial estacionarias. Se desarrolló un esquema numérico que resuelve la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión y con acoplamiento espín-órbita por medio de diferencias finitas. El formalismo es una generalización del esquema espín independiente de *Goldberg* que incorpora el grado de libertad del espín a través del acoplamiento espín-órbita de Rashba. Se elaboró un algoritmo computacional que resuelve la ecuación de onda via la solución de un sistema tridiagonal y de ecuaciones de recursión. Se verificó la exactitud del esquema numérico al reproducir en forma exacta los casos analíticos independientes del espín, *i.e.* sin la interacción espín-órbita. Se realizaron cálculos de la transmisión por especie de espín como función de la energía de los paquetes de onda incidentes espín-polarizados. Se estudio el transporte de espines para distintos valores del parámetro de Rashba, altura y espesor de la barrera de potencial, así como para distintas polarizaciones de espín.

ÍNDICE

Contenido

Introducción	1
Capítulo I. Antecedentes	
1.1 Ley de Moore.	3
1.2 Antecedentes de la Espintrónica.	5
1.3 Transporte de espines en semiconductores.	7
1.4 Objetivo de la tesis.	12
Capítulo II. El transistor de Espines y el Efecto Rashba	
2.1 El transistor de espines (SFET).	13
2.2 Acoplamiento espín – órbita de Rashba.	15
2.3 Efecto Rashba en las dispersiones electrónicas.	18
Capítulo III. Sistema Físico y Modelo	
3.1 Sistema Físico: transistor de espines en 1D.	21
3.2 Modelo para el transporte en un SFET en 1D.	23
3.3 Implementación numérica del modelo.	24
Capítulo IV. Metodología Numérica	
4.1 La ecuación de Schrödinger con acoplamiento espín-órbita.	26
4.2 La ecuación de Schrödinger en diferencias finitas.	28
4.3 Condiciones iniciales y a la frontera.	34

4.4 Cálculo numérico de la transmisión	36
Capítulo V. Resultados y Discusión	
5.1 Análisis.	38
5.2 Caso de la barrera angosta.	39
5.3 Caso de la barrera ancha.	45
5.4 Dependencia con el espesor de la barrera.	50
Capítulo VI. Conclusiones	56
Capítulo VII. Literatura	58
Apéndice A. Análisis de la función de onda incluyendo el espín.	62
Apéndice B. Diferencias finitas para la ecuación de onda	64

Lista de Figuras

Capítulo I

Fig. 1.1 Ley de Moore: El número de transistores por unidad de área en un circuito integrado de un procesador se duplica aproximadamente cada dos años. Datos tomados de la página web de Intel (www.intel.com).

Fig. 1.2. Representación esquemática del transporte electrónico dependiente del espín en una estructura de materiales ferromagneto / conductor/ ferromagneto con orientación de la magnetización a) paralela, donde la resistencia es mínima y b) antiparalela, donde la resistencia se maximiza. (Prinz *et al*, 1998)

Capítulo II

Fig. 2.1 Dibujos esquemáticos del transistor de efecto de campo de espín, SFET, propuesto en 1989 por Supriyo Datta y Biswajit Das. (Datta *et al*, 1990). a) No hay voltaje aplicado. Una corriente espín polarizada es inducida del ferromagneto fuente al ferromagneto colector. b) Se aplica un voltaje de compuerta induciendo presión en los espines en su travesía. Si la polarización de los espines es opuesta a la magnetización del ferromagneto colector el electrón no pasa al colector. (Awshalom *et al*, 2002)

Fig. 2.2. a) Representación esquemática de una heteroestructura semiconductor que contiene un pozo cuántico. b) perfil del potencial asimétrico del pozo cuántico.

Fig. 2.3 Efecto Rashba. Perfil de las bandas de conducción que confina a los electrones en un pozo cuántico. \mathbf{E} es el campo eléctrico efectivo que apunta en la dirección de confinamiento (eje z), v es la velocidad del electrón en el plano $z-y$ y

B es el campo magnético efectivo producido por el acoplamiento espín-órbita; el espín precesa alrededor de este campo en su travesía.

Fig. 2.4. Dispersión para un gas bidimensional de electrones. La línea negra es para el caso sin el acoplamiento espín-órbita ($\alpha_R = 0$). Para el caso en que $\alpha_R \neq 0$ se observa que a la energía de Fermi (E_F), se tiene dos vectores de onda k para los estados $|-\rangle$ y $|+\rangle$ respectivamente, generando un rompimiento de la degeneración de los estados de espín al mismo valor de k , i.e. $E^+(k_1) \neq E^-(k_1)$.

Fig. 2.5, Dispersión para un gas bidimensional de electrones con acoplamiento espín-órbita de Rashba. (a) dispersión en 3D. (b) vista superior de la gráfica (a una energía constante) en el espacio de los momentos. Las flechas verdes indican la dirección del momento mientras que las flechas rojas denotan la dirección de polarización del espín (Sinova *et al*, 2004).

Capítulo III

Fig. 3.1 (a) Dibujo esquemático del dispositivo de SFET en 1D. (b) Sección transversal esquemática del dispositivo usado para crear un QIDEG.(c) Vista superior del alambre cuántico cuasi-unidimensional con interacción de un potencial arbitrario, (d) vista inferior para el caso del acoplamiento de Rashba.

Fig. 3.2. Sistema esquemático de la dispersión de un paquete electrónico Gaussiano (inicialmente espín polarizado), interactuando con una barrera de potencial con acoplamiento espín-órbita. a) Paquete Gaussiano espín polarizado al tiempo $t=0$. (b) y (c) Paquetes de onda parcialmente transmitido y reflejado para $t>0$ con polarización “arriba” y “abajo” respectivamente.

Capítulo V

Fig. 5.1. Comparación del cálculo exacto y numérico del coeficiente de transmisión como función de la energía promedio E . La barrera tiene una altura de $V_0 = 0.4 eV$, la polarización del paquete incidente es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, con una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ para Rashba cero y Rashba finito. Para la simulación numérica se utilizaron también los

siguientes parámetros: $t = 590\delta t$ donde $\delta t = 1f$, con un intervalo espacial de la simulación de $\delta x = 2\text{Å}$.

Fig. 5.2. Gráfica de la evolución temporal del paquete de la simulación de la figura 5.1 para los siguientes tiempos: $t = 0, 177\delta t, 236\delta t, 531\delta t$ ($\delta t = 1f$). Que ilustra la posición del paquete en su posición inicial, cuando interactúa con la barrera y la posición final del paquete.

Fig. 5.3. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes valores del potencial V_0 y con polarización incidente $|\xi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, el resto de los parámetros son, $\sigma = 1200\text{Å}$, longitud del sistema $L = 12000\text{Å}$, $\delta x = 2\text{Å}$ y $\delta t = 59f$.

Fig. 5.4 Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes valores del parámetro α_R , con $V_0 = 0.5\text{ eV}$ el resto de los parámetros son idénticos a los usados en la fig. 5.3. Las líneas continuas son el resultado para el caso de la polarización con espín "arriba" (grupo de curvas en el círculo de color negro) y la línea punteada o discontinua es para el caso del espín "abajo" (grupo de curvas en el círculo de color rojo).

Fig. 5.5. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes polarizaciones iniciales, con $V_0 = 0.4\text{ eV}$ y con una dispersión del paquete de $\sigma = 230\text{Å}$, con valor del parámetro de Rashba $\alpha_R = 5 \times 10^{-11}\text{ eVm}$ con la dimensión de la longitud del sistema $L = 12000\text{Å}$, con un $\delta x = 2\text{Å}$ y con un $\delta t = 59f$. Las líneas continuas son el resultado para el caso de la polarización con espín "arriba" y la línea punteada o discontinua es para el caso del espín "abajo".

Fig. 5.6. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía con $V_0 = 0.3\text{ eV}$ y una dispersión de $\sigma = 1200\text{Å}$, con la longitud del sistema $L = 12000\text{Å}$, con un $\delta x = 2\text{Å}$ y con un $\delta t = 59f$.

Fig. 5.7. Gráfica de la evolución temporal del paquete Gaussiano para 4 tiempos $t = 0, 295\delta t, 472\delta t, 531\delta t$ ($\delta t = 59f$). La polarización inicial del paquete incidente es de

$\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con $V_0 = 0.4\text{ eV}$, una dispersión de $\sigma = 700\text{Å}$, con una energía incidente de $E = 0.45\text{ eV}$, $\delta y = 2\text{Å}$.

Fig. 5.8. Variación del coeficiente de transmisión con respecto a la energía para diferentes valores del parámetro de Rashba, con un $V_0 = 0.3 \text{ eV}$ con la dispersión del paquete de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ y polarización inicial de $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, la línea continua es para el caso de la transmisión con dirección “arriba” y la línea punteada es para el caso de la dirección “abajo”.

Fig. 5.9. Variación del coeficiente de transmisión con respecto a la energía para diferentes valores de V_0 , dejando fijo el valor del parámetro de Rashba ($\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eVm}$), la dispersión del paquete es de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ y polarización inicial de $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, La línea continua es para el caso de la transmisión con dirección “arriba” y la línea punteada es para el caso de la dirección “abajo”.

Fig. 5.10. Cálculo de la transmisión variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial de 15 \AA a 100 \AA , sin la presencia del acoplamiento espín-órbita (analítico y numérico). Se usó el valor de $E_{inc} = 0.25 \text{ eV}$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.5 \text{ eV}$ para el caso de $E > V_0$ con $V_0 = 0.3 \text{ eV}$.

Fig. 5.11. Cálculo de la transmisión variando el ancho de la barrera del potencial desde 15 \AA a 100 \AA , para diferentes valores de α_R . Se usó $E_{inc} = 0.25 \text{ eV}$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.4 \text{ eV}$ para el caso de $E > V_0$, con $V_0 = 0.3 \text{ eV}$. La polarización incidente del paquete es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$.

Fig. 5.12. Cálculo del valor esperado de las polarizaciones y $\langle \sigma^2 \rangle$ variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial desde 15 \AA a 100 \AA , para diferentes valores de α_R . Se usó $E_{inc} = 0.25 \text{ eV}$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.4 \text{ eV}$ para el caso de $E > V_0$, con $V_0 = 0.3 \text{ eV}$. La polarización incidente del paquete es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$.

Fig. 5.13. Cálculo del cuadrado de la polarización variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial de 15 \AA a 120 \AA para un valor fijo de $\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eVm}$. La energía de los paquetes incidentes usada fue de $E_{inc} = 0.4 \text{ eV}$ con $V_0 = 0.3 \text{ eV}$ para las diferentes polarizaciones incidentes.

Introducción

En la última década una nueva electrónica basada en el espín llamada *Espintrónica* se ha venido desarrollando con sorprendente rapidez. Mientras la electrónica convencional traslada la información al cambiar el número de electrones en un circuito manipulando su energía, la naciente Espintrónica pretende codificar los datos a través de la orientación de los espines de los electrones; i.e. a través de la manipulación del grado de libertad del espín.

La manipulación controlada y eficiente del espín en materiales semiconductores podría producir novedosas aplicaciones en sistemas electrónicos, magnéticos y fotónicos, convergiendo a una sola tecnología con capacidades multifuncionales. Algunas de las posibles aplicaciones que surgirían si se logra la integración del espín en la electrónica actual serían, e.g.: el transistor de espín, filtros de espines, diodos de espines, memorias no volátiles, baterías de espín, implementación de la computación cuántica, entre otras. Dispositivos que prometen el aumento en la velocidad de procesamiento de datos, disminuir su tamaño, el menor consumo de energía eléctrica, entre otras atractivas características.

Para lograrlo es indispensable pensar y estudiar novedosas formas que permitan manipular, generar y detectar corrientes eléctricas con espines polarizados.

Uno de los efectos que más ha capturado la atención recientemente y que ha dado un fuerte impulso al desarrollo de la espintrónica, es la interacción *espín-órbita* de *Rashba* en semiconductores, así como el estudio de su influencia en los procesos de transporte electrónico y de espín en dispositivos *nanoscópicos* (e.g. alambres cuánticos, puntos cuánticos, entre otros).

Datta y Das en uno de los trabajos pioneros en el área de la Espintrónica proponen un dispositivo de transistor basado en el espín de los electrones. En su dispositivo prototipo se puede controlar la orientación (polarización) de los espines a través del acoplamiento espín-órbita de Rashba.

En la presente tesis hacemos un estudio teórico y numérico del transporte de paquetes de onda electrónicos espín-polarizados en un dispositivo transistor del tipo *Datta y Das*.

I. Antecedentes

1.1 Ley de Moore

La Física de la materia condensada ha promovido desde sus inicios en los años 40's el desarrollo de importantes aplicaciones en la Microelectrónica, Ingeniería, Medicina y recientemente en la Nanotecnología, entre otras áreas de gran impacto económico y social. Un excelente ejemplo es el descubrimiento del efecto transistor en semiconductores, observado por J. Bardeen, W. H. Brattain y W. Shockley, que les hizo merecedores del premio Nobel de Física en 1956¹. El descubrimiento del transistor impulsó significativamente el desarrollo de la industria electrónica, de manera que el primer transistor comercial estuvo disponible tan solo cinco años después (1952) de su descubrimiento (Prinz *et al.*, 1998).

En 1958, el Ingeniero Jack Kilby (Nobel de Física en 2000) de la compañía *Texas Instruments* en Dallas y Robert N. Noyce ² de la compañía *Fairchild Semiconductor*, establecida en los alrededores de San José, California (llamada más tarde *Silicon Valley*) diseñaron y construyeron el primer circuito integrado basado en materiales semiconductores de dimensiones microscópicas. El circuito integrado finalmente

¹ Años más tarde el investigador J. Bardeen (1908- 1991) realizó estudios sobre el fenómeno de la superconductividad que le hizo de nuevo merecedor del premio Nobel de Física en 1972. Convirtiéndose así en la única persona (al presente) que haya ganado dos premios Nobel de Física. (Hacian, 2002)

² Meses más tarde del descubrimiento del circuito integrado, el investigador Robert N. Noyce fué cofundador de la corporación Intel.

estuvo disponible comercialmente 7 años después de su creación. El relativamente vertiginoso desarrollo e integración de los transistores en circuitos integrados conduce a uno de los fundadores de la corporación *Intel*, Gordon E. Moore, a establecer una norma que rige desde entonces la evolución de los sistemas informáticos (1965).

G. E. Moore observó que el número de transistores presentes en un circuito integrado se duplicaba (debido a las mejoras en las técnicas de miniaturización) a intervalos regulares (aproximadamente cada dos años), y predijo que este fenómeno seguiría tal tendencia en los años venideros. Esta afirmación es conocida actualmente como la *Ley de Moore*, ampliamente conocida en la industria de los procesadores electrónicos (David Z *et al*, 2002). Para computadoras marca *Intel* el número de transistores en un procesador es el doble cada dos años (Ver Fig. 1.1).

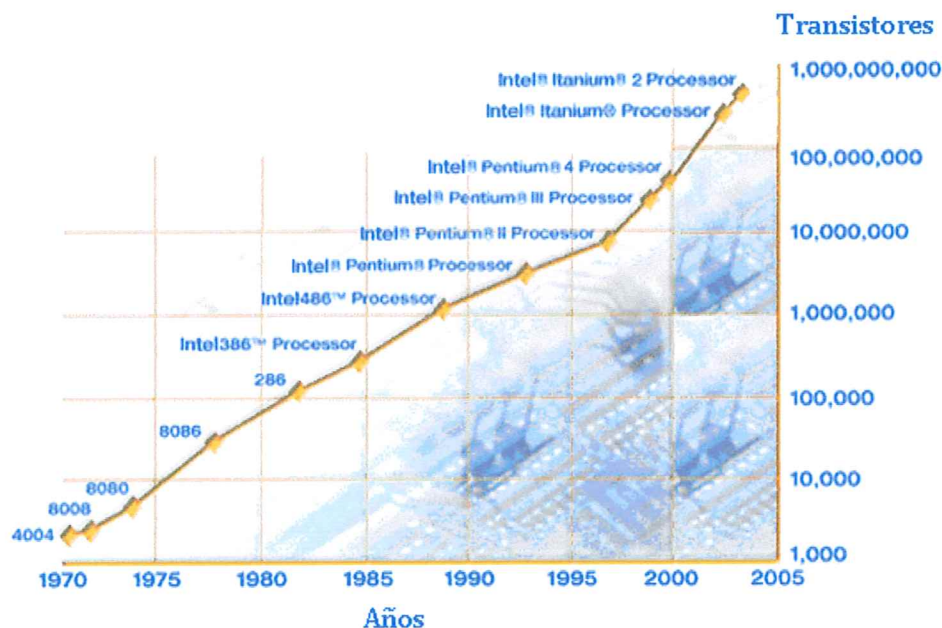


Fig. 1.1 Ley de Moore: El número de transistores por unidad de área en un circuito integrado de un procesador se duplica aproximadamente cada dos años. Datos tomados de la página web de Intel (www.intel.com).

En 1959 el físico estadounidense Richard Feynman (premio Nobel de Física en 1965) ofreció una conferencia en la reunión anual de la *American Physical Society* en la que afirmó: “*There is plenty of space at the bottom*”, es decir, traducido literalmente, *que hay espacio de sobra en el fondo*. A lo que R. Feynman se refería con tal afirmación es que las investigaciones a niveles atómicos revelarían nuevas oportunidades que serían de gran utilidad en el futuro para el manejo y procesamiento de información. Aunque en la práctica aún no hemos llegado a ese punto, Feynman no se equivocaba al predecir de qué forma evolucionaría el almacenamiento y lectura de la información, siendo su comentario uno de los paradigmas de la ciencia y tecnología actuales.

1.2 Antecedentes de la Espintrónica

La creciente demanda de la miniaturización de los dispositivos electrónicos hace que nos acerquemos rápidamente a las afirmaciones de Feynman. En la última década, una nueva rama de investigación llamada *Nanociencias* se ha venido gestando en los laboratorios y universidades más importantes del mundo. En Nanociencias y en Nanotecnología se estudia el comportamiento de los materiales en los que al menos una de sus dimensiones es del orden de nanómetros (10^{-9} m). A estas diminutas escalas los efectos cuánticos gobiernan el comportamiento de los electrones.

Recientemente el interés en el espín del electrón y su manipulación ha dado origen a un campo de investigación de frontera en Nanociencias, denominado *Espintrónica* -- electrónica basada en el espín (Awshalom *et al*, 2002).

Mientras la electrónica convencional, traslada la información cambiando el número y la energía de los electrones de un circuito, la naciente espintrónica codifica los datos basándose en la orientación del espín de los electrones, efectuando operaciones lógicas modificando dicha orientación. Dado que las operaciones de cambio de espín consumen poca energía, se presume que los dispositivos espintrónicos requerirán baterías muy livianas. Además, los chips espintrónicos podrían permanecer desconectados entre una y otra operación produciéndose memorias denominadas no-volátiles. Al cambiar el espín, la energía cinética de la partícula apenas sí aumenta, por lo que los circuitos generan mínimo calor. Por si fuera poco, el proceso alcanza velocidades muy grandes, por ejemplo, se ha conseguido invertir la orientación del espín electrónico en pocos picosegundos (1×10^{-12} segs). Y estas son solo algunas de las ventajas sobre la electrónica convencional que el desarrollo de la *Espintrónica* generaría.

El nacimiento de la Espintrónica se considera que tuvo lugar en Orsay (Francia) por M. Baibich y colaboradores (Baibich, 1998) en el año de 1988 y esta ligada al descubrimiento de la "*Magnetorresistencia Gigante*" (GMR, por sus siglas en inglés).

Lo que M. Baibich y colaboradores observaron es que al hacer fluir una corriente eléctrica a través de multicapas metálicas nanométricas hechas de apilamientos de capas magnéticas (Fe, Co,...) separadas por capas metálicas no magnéticas (Au, Cu,...), la resistencia cambia (enormemente) dependiendo de si las capas magnéticas tienen magnetización paralela o anti-paralela. A tal efecto se le denomina Magneto-Resistencia Gigante (GMR). El efecto GMR ocurre debido a que en los materiales magnéticos hay un desequilibrio entre la densidad de electrones con espín arriba y espín abajo a la energía de conducción (energía de Fermi). Las múltiples dispersiones

de los electrones en las interfaces favorecen (por el principio de *Pauli*) una resistencia máxima cuando las capas ferromagnéticas presentan magnetizaciones anti-paralelas (figura 1.2).

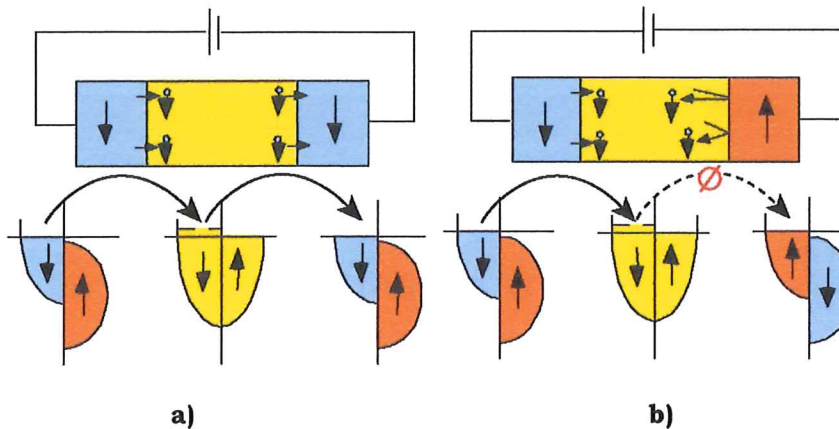


Fig.1.2. Representación esquemática del transporte electrónico dependiente del espín en una estructura de materiales ferromagneto / conductor / ferromagneto con orientación de la magnetización a) paralela, donde la resistencia es mínima y b) antiparalela, donde la resistencia se maximiza. (Prinz *et al*, 1998)

Las primeras aplicaciones de los dispositivos basados en los efectos dependientes del espín tipo GMR son las cabezas lectoras para discos duros o memorias magnéticas no volátiles RAM (MRAM) que han sido de gran impacto en la tecnología de almacenamiento de información. (Prinz *et al*, 1998).

1.3 Transporte de espines en semiconductores

Históricamente la idea de inyección de electrones espín-polarizados en semiconductores fue propuesta en los 70's en el contexto de estudio de tunelaje usando electrodos ferromagnéticos (Cifres *et al*, 1973). Tiempo después se realizaron estudios teóricos sobre la inyección de espín a través de interfaces ferromagneto a semiconductor por Aronov y Pikus quienes calcularon el decaimiento espacial de la polarización de espín en tales sistemas. (Aronov *et al*, 1976). No fue sino hasta 1992

que Alvarado y Renaud observaron el tunelamiento de electrones espín polarizados de un ferromagneto (Ni) a un semiconductor (GaAs) con un STM (Scanning Tunneling Microscope) demostrando que la inyección de espín en semiconductores era en efecto posible. (Alvarado *et al*, 1992).

Ciertamente, para la implementación de dispositivos semiconductores espintrónicos, además de generar y detectar corrientes de espines polarizados, es importante lograr la manipulación efectiva de los estados de espín además de que estos se mantengan coherentes durante tiempos suficientemente largos.

Experimentos recientes han vuelto a encender el interés en la utilidad de los materiales semiconductores usando el espín como portador y fuente de información. En 1999 David Awschalom y colaboradores (Awschalom *et al*, 1999), demostraron utilizando medios ópticos, que electrones espín-polarizados pueden mantener su coherencia a escalas de tiempos de nanosegundos en el semiconductor de GaAs. Esto significa que los electrones espín polarizados pueden ser desplazados a distancias del orden de $100 \mu m$ sin perder su coherencia en tales sistemas. Lo anterior abrió la posibilidad de la realización del transporte de la información con espines coherentes en micro-dispositivos. Otro de los experimentos que capturó la atención fue realizado por Ohno y colaboradores en Japón (Ohno *et al*. 1999), donde demuestran que es posible inyectar eficientemente electrones con espines polarizados de un semiconductor magnético a otro no magnético mediante el uso de materiales no convencionales (aleaciones semiconductoras III-V). Otro experimento en esta dirección fue realizado simultánea e independientemente por Fiederling y colaboradores (R. Fiederling *et al*, 1999) obteniendo resultados similares.

Dada la naturaleza intrínseca del espín en los electrones de un sólido, la manipulación del espín en los materiales semiconductores podría conducir a novedosas aplicaciones al integrarlos en los sistemas electrónicos, magnéticos y fotónicos, conduciendo a una sola tecnología con capacidades multifuncionales.

Algunas de las posibles aplicaciones que surgirán si se logra la integración del espín en sólidos semiconductores serían: el transistor de espín, filtros de espines, diodos de espines, memorias no volátiles, baterías de espín e implementación de la computación cuántica.

Uno de los mecanismos físicos propuestos para la manipulación del espín es el acoplamiento espín-órbita el cuál es de origen relativista y se presenta como consecuencia del acoplamiento del momento orbital de los electrones con su momento magnético angular intrínseco (espín), debido a la presencia de un gradiente de potencial eléctrico no uniforme. (Sakurai, 1999).

En 1984, Y. A. Bychkoy y E.I. Rashba (Bychkov *et al*, 1984), establecieron un modelo que describe apropiadamente la interacción espín-órbita, en gases de electrones bidimensionales en semiconductores, ampliamente conocido como "*Efecto Rashba*". Tal efecto crea la base de uno de los trabajos pioneros en el campo de la Espintrónica, el prototipo de un transistor de efecto de campo de espín (SFET, por sus siglas en inglés) propuesto en 1989 por Supriyo Datta y Biswajit Das de la Universidad de Purdue. El SFET es similar en operación a un modulador electro-óptico, utilizando campos puramente eléctricos para controlar los estados de espín electrónicos.

Años más tarde, se demostró que la intensidad de interacción del efecto Rashba en gases de electrones bidimensionales puede ser controlada mediante la aplicación de un campo eléctrico externo.(Engels *et al*, 1997; Nitta *et al*, 1997). Tales experimentos promovieron gran interés en la implementación del SFET de Datta y Das.

Ahora bien, en el aspecto teórico el estudio de la Espintrónica tomó un giro interesante con la publicación de las investigaciones realizadas por A.V. Moroz y colaboradores (Moroz *et al*, 1999), donde estudian el efecto de la interacción espín-órbita en la conductancia en sistemas cuasi-unidimensionales. Este trabajo alentó el interés de los teóricos en la Espintrónica, reviviendo el estudio del prototipo del transistor de espines de Datta y Das.

En el año 2001, F. Mireles y colaboradores (Mireles *et al*, 2001) estudiaron las propiedades de transporte balístico de electrones espines polarizados en alambres cuánticos cuasi-unidimensionales en presencia del acoplamiento espín-órbita utilizando el formalismo de funciones de *Green* y modelando el efecto Rashba a través de un esquema de amarre fuerte. En este trabajo se muestra que la interacción espín-órbita puede producir cambios dramáticos en la transmisión de electrones con espines polarizados en alambres cuánticos semiconductores, arrojando valiosa información para la realización práctica de estos dispositivos.

Después de las publicaciones de A. V. Moroz *et al* y de F. Mireles *et al* han ido creciendo exponencialmente los trabajos teóricos, particularmente hablando del efecto Rashba, en donde el acoplamiento espín-órbita es el tópico central; realizados por diferentes grupos de investigación en diferentes sistemas (alambres cuánticos, puntos cuánticos, pozos cuánticos, etc.).

Uno de estos trabajos recientes realizado por el grupo de J. Schliemann, C. Egues y D. Loss (Schliemann *et al*, 2003), proponen teóricamente un SFET, que no sólo se basa en el acoplamiento espín-órbita de Rashba, si no en otro tipo de acoplamiento espín-órbita de importancia en semiconductores, denominado efecto *Dresselhaus*³. Schliemann y colaboradores encuentran que ese sistema admite

³ Es un acoplamiento espín-órbita producido, en cierto tipo de semiconductores como el GaAs, por la asimetría de inversión espacial de la estructura cristalina del bulto del semiconductor. (Winkler *et al*, 2002)

procesos de dispersión dependientes del espín sólo si la intensidad del *efecto Rashba* es igual a la intensidad del *efecto Dresselhaus*, lo que sugiere que, al menos en este caso, no es estrictamente necesario el transporte de forma balística para lograr el efecto de transistor de espín.

El año pasado (2005), J. Wunderlich y colaboradores (Wunderlich *et al*, 2005), al mismo tiempo que K. Kato y colaboradores (Kato *et al*, 2005) mostraron experimentalmente la existencia del efecto *Hall de Espín* (*SHE* por sus siglas en inglés), como consecuencia del acoplamiento espín-órbita. Cabe mencionar que el efecto Hall de espín fue predicho por M.I. Dyakanov y V. I. Perel en 1971 (Dyakanov *et al*, 1971) y redescubierto por J. E. Hirsch (Hirsch, 1999), pero no fué hasta el año pasado que se observó experimentalmente. Es importante recordar que el Efecto Hall (clásico) consiste en la acumulación de carga eléctrica en las orillas de un conductor cuando se hace pasar corriente eléctrica a lo largo de este en la presencia de un campo magnético perpendicular ⁴. En el Efecto Hall de espín, sin embargo, no existe campo magnético real, pero existe un “*campo magnético efectivo*” producido por el acoplamiento espín-órbita, resultando así una acumulación de espines (pero no de carga) en las orillas del conductor.

Un estudio reciente de R. Romo y S. Ulloa (Romo *et al*, 2005) estudian la dinámica de tunelaje resonante dependiente del espín con interacción del acoplamiento espín-órbita, describiendo un comportamiento de filtro de espín en su sistema, entre otras características interesantes.

⁴ La acumulación de carga resulta de la fuerza de Lorentz que experimentan los electrones en su travesía

Recientemente, J. Schliemann y colaboradores (Schliemann *et al*, 2005) investigaron el efecto *Zitterbewegung*⁵ de un paquete de ondas electrónico bidimensional bajo la influencia del acoplamiento espín-órbita en pozos cuánticos.

Así pues, la Física del fenómeno de transporte electrónico en nanoestructuras semiconductoras con acoplamiento espín-órbita es uno de los temas de investigación de frontera de gran interés actualmente en espintrónica. Dicho efecto (*SHE*) ha tomado gran importancia y ha motivado un sin número de publicaciones recientes en espintrónica; lo anterior por sus posibles aplicaciones y por las preguntas fundamentales que se plantean.

1.4 Objetivo de la Tesis

En este proyecto de tesis se considera el transporte electrónico en una dimensión en materiales semiconductores de tipo *GaAs*, en presencia de la interacción del acoplamiento espín-órbita de Rashba. Esto es fuertemente estimulado con el propósito de modelar el prototipo del transistor de espines (SFET) en una dimensión. Es de particular interés el estudio de los efectos que el acoplamiento espín-órbita introduce en la transmisión electrónica de electrones con espines polarizados.

⁵ Propuesto originalmente por E. Schrödinger, el efecto *Zitterbewegung* se refiere al efecto relativista que describe el movimiento oscilatorio de los electrones en dirección perpendicular a la dirección de propagación.

II. El Transistor de Espines y el Efecto Rashba

En este capítulo se discutirá en detalle el efecto que crea la base del SFET, ampliamente conocido como el efecto Rashba.

2.1 El Transistor de Espines (*SFET*)

Antes de describir en detalle el principio de operación de un transistor de espines (*SFET*, *Spin Field Effect Transistor*), conviene recordemos primero el mecanismo de operación de un transistor de efecto de campo convencional (*FET*). En un *FET* se introducen cargas eléctricas a un semiconductor por un electrodo fuente y se reciben por un electrodo colector colocados en los extremos del material semiconductor. La aplicación de voltaje a un tercer electrodo (sobre la región semiconductor) genera un campo eléctrico que aumenta o disminuye la corriente de la fuente al colector, produciendo así, un efecto de interrupción y/o amplificación de la corriente. Por otro lado, en el *SFET* propuesto por *Datta y Das* (*Datta et al*, 1990)., una heteroestructura semiconductor de *InAlAs/InGaAs*, por ejemplo, proporciona un canal de transporte para los electrones, mientras que la fuente y el colector son materiales ferromagnéticos.

Cuando se inyecta corriente eléctrica en este dispositivo (*SFET*), la fuente emite electrones con espines polarizados en la dirección de magnetización del material,

fluyendo corriente espín polarizada por el canal de conducción hasta el colector. Lo anterior siempre y cuando que el ferromagneto posea la misma polarización de espín (magnetización) que la corriente incidente (Fig. 2.1.a). Sin embargo, al aplicar un voltaje en la compuerta sobre la región semiconductor se produce un campo eléctrico que induce una presión en el espín de los electrones incidentes, fenómeno originado por efecto de acoplamiento espín-órbita (Rashba) y que se explicará en detalle más adelante (figura 2.1.b). El punto crucial en el SFET es que es posible controlar la polarización del espín del electrón por medio de campos eléctricos externos (Datta *et al*, 1990).

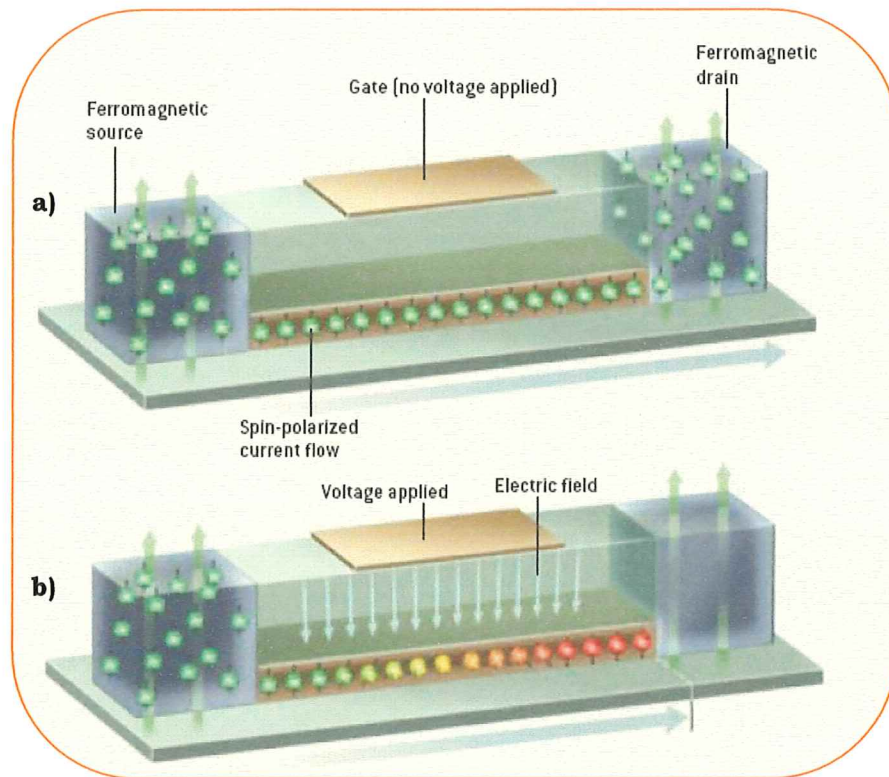


Fig.2.1 Dibujos esquemáticos del transistor de efecto de campo de espín, SFET, propuesto en 1989 por Supriyo Datta y Biswajit Das. (Datta *et al*, 1990). a) No hay voltaje aplicado. Una corriente espín polarizada es inducida del ferromagneto fuente al ferromagneto colector. b) Se aplica un voltaje de compuerta induciendo presión en los espines en su travesía. Si la polarización de los espines es opuesta a la magnetización del ferromagneto colector el electrón no pasa al colector (Awshalom *et al*, 2002).

Así pues, la corriente del electrón es modulada por el grado de precesión del espín del electrón introducido por el campo inducido por la compuerta de voltaje (Mireles *et al*, 2001). Dado que el efecto de precesión es generado por el fenómeno de acoplamiento espín-órbita de Rashba, siendo este el mecanismo fundamental de operación del SFET, además de ser un tópico central de la presente tesis, en la siguiente sección se explicará en detalle el origen físico de dicho efecto, así como sus consecuencias en las propiedades de conducción eléctrica dependiente del espín.

2.2 Acoplamiento espín – órbita.

El fenómeno del acoplamiento espín-órbita es de origen puramente relativista y se presenta como consecuencia del acoplamiento del momento orbital de los electrones con su momento magnético angular intrínseco (espín), debido a la presencia de un gradiente de potencial eléctrico. (Sakurai, 1999).

El término del acoplamiento espín-órbita aparece naturalmente de la ecuación de Dirac al resolver el problema genérico de la dinámica de un electrón en presencia de un potencial eléctrico externo $V(r)$ tomando en cuenta los efectos relativistas hasta orden $(v/c)^2$, se puede demostrar que la contribución al acoplamiento espín-órbita está dado por el Hamiltoniano (Shankar, 1994):

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \nabla V(r) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \quad (2.1)$$

con c la velocidad de la luz, \hbar es la constante de *Planck*, m es la masa del electrón libre, $V(r)$ es el potencial eléctrico, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de *Pauli* y finalmente $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ es el operador de momento.

El acoplamiento *SO* se ha constituido en uno de los efectos con gran potencial para aplicaciones espintrónicas, por el control del espín de los electrones por medios puramente electrostáticos, sin necesidad de introducir campos magnéticos en sistemas sólidos. El gradiente de potencial se puede producir artificialmente construyendo una heteroestructura semiconductor (pozo cuántico) que confine a los electrones en dos dimensiones formando un 2DEG (ver figura 2.2).

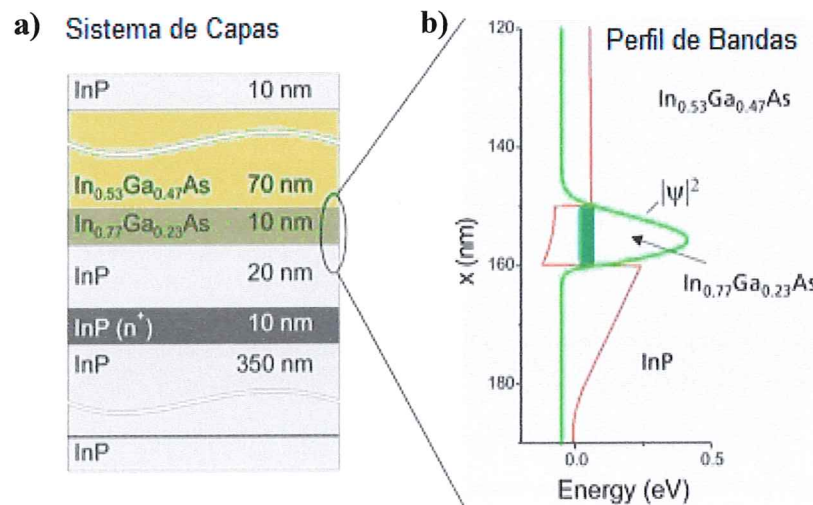


Fig. 2.2. a) Representación esquemática de una heteroestructura semiconductor que contiene un pozo cuántico. b) perfil del potencial asimétrico del pozo cuántico.

Si el potencial del pozo es asimétrico, el electrón se mueve en un campo eléctrico \mathbf{E} . Relativísticamente, en el sistema de referencia del electrón, dicho campo eléctrico se transforma en un campo magnético efectivo \mathbf{B} .

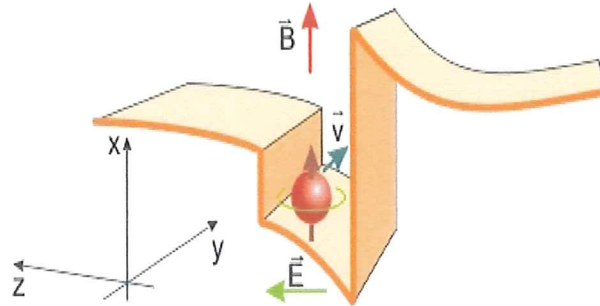


Fig. 2.3 Efecto Rashba. Perfil de las bandas de conducción que confina a los electrones en un pozo cuántico. \vec{E} es el campo eléctrico efectivo que apunta en la dirección de confinamiento (eje z), v es la velocidad del electrón en el plano $z - y$ y \vec{B} es el campo magnético efectivo producido por el acoplamiento espín-órbita; el espín precesa alrededor de este campo en su travesía.

En sistemas sólidos (heteroestructuras semiconductoras), el acoplamiento espín-órbita equivalente a la ecuación (2.1) se transforma a (Bychkov *et al*, 1984):

$$H_{so} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{\sigma} \times \vec{p})_z = i\alpha_R \left(\sigma_y \frac{d}{dx} - \sigma_x \frac{d}{dy} \right) \quad (2.2)$$

donde α_R es el parámetro de la intensidad del acoplamiento espín-órbita (parámetro de *Rashba*). Como el parámetro de *Rashba* depende del campo eléctrico efectivo (gradiente del potencial en la interfase) en la heteroestructura semiconductor, entonces es posible modular la intensidad de este parámetro por medios puramente electrostáticos al aplicar voltajes de compuerta que modifiquen el perfil del potencial de confinamiento. Es importante enfatizar que el *efecto Rashba* no puede producir una polarización espontánea de espín de los estados electrónicos (Mireles *et al*, 2001). Sin embargo, es capaz de inducir un desdoblamiento de los estados de espín del gas de

electrones en ausencia de campos magnéticos (para $k \neq 0$) como se ilustrará mas adelante. Este desdoblamiento de los estados de espín es proporcional al vector de onda de los electrones y depende del campo eléctrico efectivo en la interfase semiconductor (parámetro de Rashba).

2.3 Efecto Rashba en las dispersiones electrónicas.

El Hamiltoniano total para el gas de electrones en dos dimensiones (2DEG) está dado por:

$$H = H_o + H_{so} \quad (2.3)$$

$$\text{donde } H_o = \left(\frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} \right) \cdot \mathbf{I}, \quad \text{con } \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad (2.4)$$

por lo que para soluciones del tipo $e^{ik_x x + ik_y y}$, el Hamiltoniano total (2.3) se puede escribir:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) & i\alpha_R k_x + \alpha_R k_y \\ -i\alpha_R k_x + \alpha_R k_y & \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \end{bmatrix} \quad (2.5)$$

El Hamiltoniano H produce dos ramas en la dispersión de los electrones, dadas por:

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{2m^*} k^2 \pm \alpha_R k \quad (2.6)$$

donde m^* es la masa efectiva de los electrones y $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$, es la magnitud del vector de onda en dos dimensiones (en el plano del 2DEG).

La ecuación (2.6) muestra que para un gas bidimensional de electrones, la interacción *espín-órbita* de *Rashba* introduce un rompimiento de la degeneración de espín a la energía de *Fermi*. La naturaleza de el desdoblamiento es tal que permite que electrones con la misma energía tengan diferentes vectores de onda (k_1 y k_2), esto es, $E^+(k_1) = E^-(k_2)$, donde k_1 es el vector de onda asociado con la banda E^- con eigenvector $|-\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle)$, y k_2 representa al vector de onda asociado con la banda E^+ con eigenvector $|+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle)$. En la figura 2.4 se muestra esquemáticamente la ecuación de dispersión (2.6) para $\alpha_R = 0$ y $\alpha_R \neq 0$.

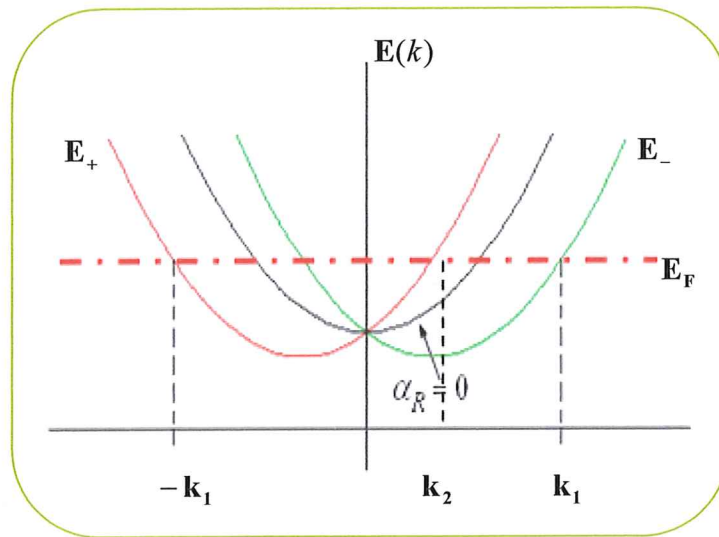


Fig. 2.4. Dispersión para un gas bidimensional de electrones. La línea negra es para el caso sin el acoplamiento espín-órbita ($\alpha_R = 0$). Para el caso en que $\alpha_R \neq 0$ se observa que a la energía de Fermi (E_F), se tiene dos vectores de onda k para los estados $|-\rangle$ y $|+\rangle$ respectivamente, generando un rompimiento de la degeneración de los estados de espín al mismo valor de k , i.e. $E^+(k_1) \neq E^-(k_1)$.

Para ilustrar el efecto de precesión producido por el acoplamiento de Rashba en la fig. 2.5 se describe en forma esquemática (a) la dispersión en el plano (x-y) para las ramas E^+ y E^- y (b) la proyección en el plano (x-y) de las dispersiones a una energía fija. Las flechas verdes indican la dirección del momento mientras que las flechas rojas denotan la dirección de polarización del espín. Note que la dirección del espín rota (precesa) con el cambio del momento.

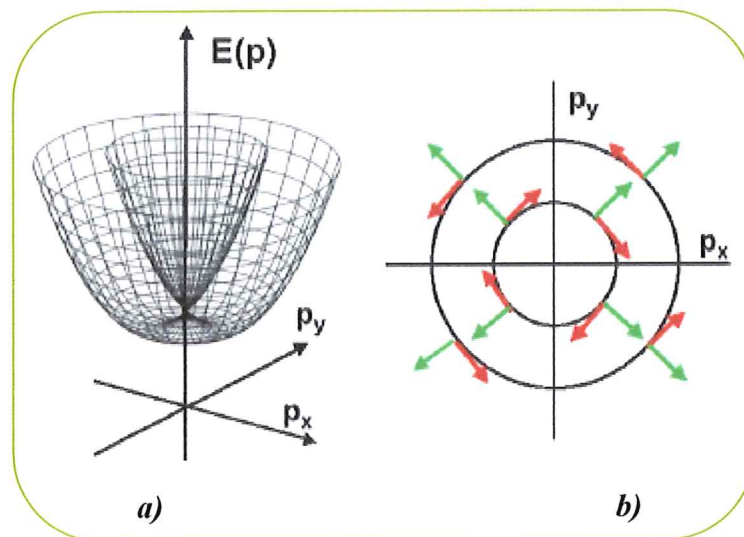


Fig. 2.5, Dispersión para un gas bidimensional de electrones con acoplamiento espín-órbita de Rashba. (a) dispersión en 3D. (b) vista superior de la gráfica (a una energía constante) en el espacio de los momentos. Las flechas verdes indican la dirección del momento mientras que las flechas rojas denotan la dirección de polarización del espín (Sinova *et al*, 2004).

III. Sistema Físico y Modelo

3.1 Sistema Físico: Transistor de espines en $1D$

En este trabajo de tesis estudiamos el transporte electrónico dependiente del espín en un dispositivo tipo Datta y Das en una dimensión como el mostrado en la fig. 3.1. En la superficie de la heteroestructura (i.e. InAlAs/InGaAs) se colocan un par de compuertas metálicas (A y B) que al aplicarles un voltaje producirán un campo eléctrico que repelan a los electrones del 2DEG inmediatamente debajo de las barras metálicas, produciendo así un gas electrónico cuasi-unidimensional (Q1DEG).

Asimismo, en el sistema se incluye el parámetro de intensidad de acoplamiento espín-órbita, que depende de la posición y siendo finito sólo en la región de una barrera de potencial (ver figura 3.1.d) en el centro del Q1DEG. Se aplica voltaje en D y E para inducir $\alpha_R = 0$ en esa región, mientras que en voltaje en F se puede variar para cambiar α_R en tal región.

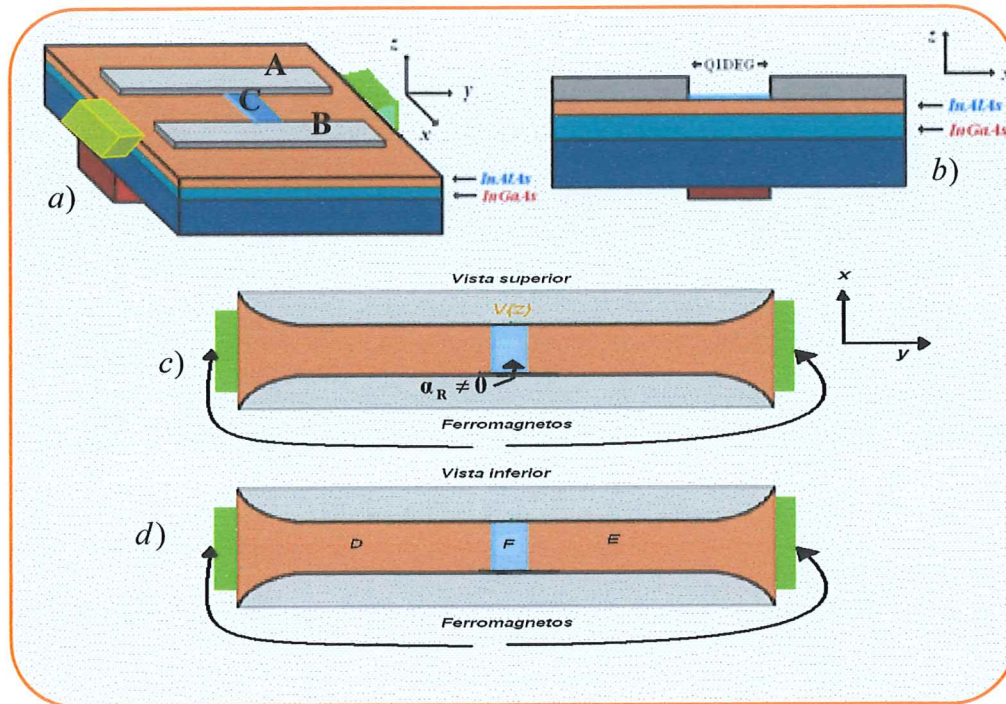


Fig. 3.1 (a) Dibujo esquemático del dispositivo de SFET en 1D. (b) Sección transversal esquemática del dispositivo usado para crear un QIDEG. (c) Vista superior del alambre cuántico cuasi-unidimensional con interacción de un potencial arbitrario, (d) vista inferior para el caso del acoplamiento de Rashba.

Ahora bien, debido a que el potencial cuenta con el efecto *Rashba*, la pregunta es ¿Qué pasa con la transmisión que ahora es dependiente de la dirección del espín? ¿Qué se obtiene después de la interacción con el potencial? Intuitivamente se podría decir que deberíamos de obtener transmisión y reflexión (dependiendo de los parámetros) para las diferentes polarizaciones de espín, pero estas preguntas no serán contestadas en este capítulo, nos limitaremos aquí a describir el modelo físico de interés y comentar brevemente en el capítulo 6 la descripción del sistema numérico utilizado para resolver el problema.

3.2 Modelo para el transporte en un SFET en 1D

Modelamos el dispositivo de Datta-Das (espín FET) unidimensional descrito en la sección 3.1 a través de inyección (incidencia) paquetes de onda Gaussianos, (inicialmente espín polarizados) sobre un potencial estacionario (arbitrario en general) con la presencia del acoplamiento espín-órbita localizado solo donde se sitúa la barrera de potencial, ver diagrama esquemático de la fig. 3.2.

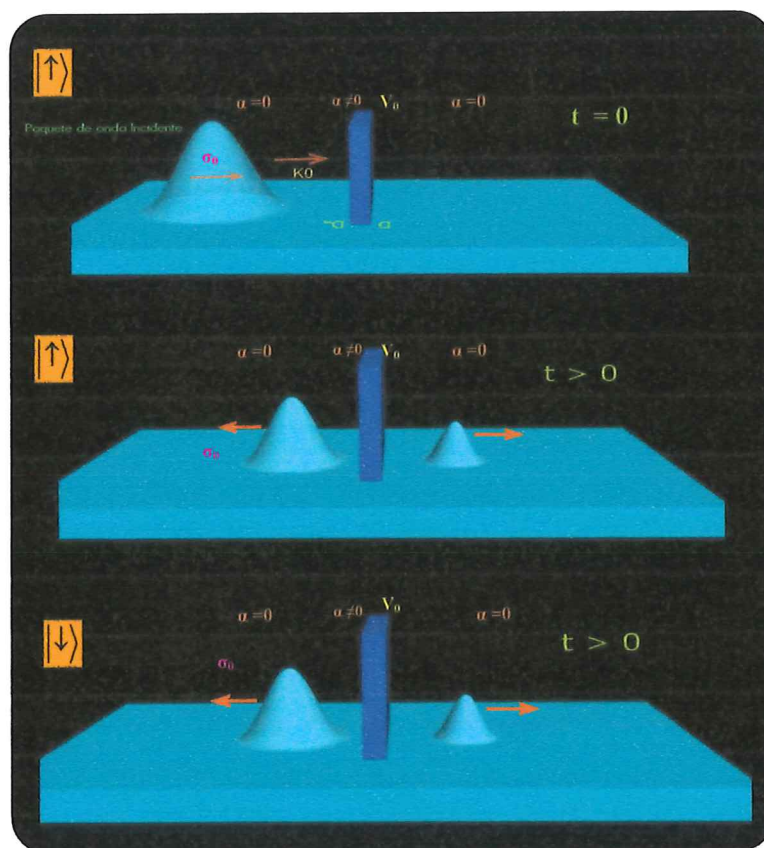


Fig. 3.2. Sistema esquemático de la dispersión de un paquete electrónico Gaussiano (inicialmente espín polarizado), interactuando con una barrera de potencial con acoplamiento espín-órbita. a) Paquete Gaussiano espín polarizado al tiempo $t=0$. (b) y (c) Paquetes de onda parcialmente transmitido y reflejado para $t>0$ con polarización "arriba" y "abajo" respectivamente.

Una vez que el paquete electrónico interactúa con la barrera de potencial, donde se supone existe el acoplamiento espín-orbita (ver figura 3.2), uno esperaría que parte del paquete Gaussiano se transmita y parte se refleje con algún cambio no trivial en las polarizaciones de espín.

3.3 Implementación numérica del modelo

Uno de los trabajos numéricos pioneros en la dispersión de paquetes de onda electrónicos por barreras de potencial, es el desarrollado por Goldberg y colaboradores (Goldberg *et al*, 1967) que describen una técnica numérica que les permite resolver la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para Hamiltonianos sin dependencia temporal explícita, realizando simulaciones de la interacción de paquetes de onda gaussianos sobre barreras de potencial rectangulares y estacionarias (Koonin, 1990).

Definimos el problema a tratar en este trabajo de tesis de la siguiente forma: nos interesa el tunelaje en una dimensión de un paquete de onda electrónico espín-polarizado con energía promedio E sobre una estructura de potencial estacionario con presencia del acoplamiento espín-órbita. Siendo uno de los objetivos el cálculo numérico de las probabilidades de transmisión de la interacción de la onda incidente con el potencial estacionario con acoplamiento espín-órbita.

La solución del sistema se describió por medio del método de diferencias finitas, discretizando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión, al igual que el método desarrollado por Goldberg (1967), pero en mi caso implementé el formalismo antes mencionado para la dependencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba unidimensional. El transporte es únicamente en una dirección y el potencial es

estático. Una vez discretizada la ecuación del sistema se elaboró un algoritmo computacional que resuelve básicamente la ecuación de onda por medio de un sistema tridiagonal con ecuaciones de recursión, que describiré en detalle en el siguiente capítulo.

IV. Metodología Numérica

En este capítulo se revisará en detalle el método de integración numérico que se utilizará para la solución de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con acoplamiento espín-órbita. Primeramente, en la sección 4.1 se discute el esquema desarrollado por Goldberg y colaboradores (Goldberg, 1967) generalizado en este trabajo, para incorporar el efecto de la interacción del acoplamiento espín-órbita de Rashba. En la sección 4.2 se generaliza la ecuación de Schrödinger en diferencias finitas. En la sección 4.3 se describen las condiciones iniciales y a la frontera necesarias para la solución del problema numérico y por último en la sección 4.4 se detallará el cálculo del coeficiente de transmisión.

4.1 La ecuación de Schrödinger con acoplamiento espín-órbita de Rashba:

El Hamiltoniano total del sistema cuasi-unidimensional del sistema está dado por:

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_{so} \quad (4.1)$$

con
$$\hat{H}_o = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dy^2} + V(y) \quad (4.2)$$

y
$$\hat{H}_{so} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{\sigma} \times \vec{p})_z = \alpha_R (\sigma_x \hat{p}_y - \sigma_y \hat{p}_x) \quad (4.3)$$

con m^* la masa efectiva del electrón, $V(y)$ el potencial estacionario de interacción y el parámetro de Rashba $\alpha_R(y)$ que depende solamente de la posición en nuestro modelo.

Ahora bien, la ecuación (4.3) se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\hat{H}_{so} = H_R^{(x)} + H_R^{(y)} = i\alpha_R\sigma_y \frac{\partial}{\partial x} - i\alpha_R\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \quad (4.4)$$

Se puede demostrar que la contribución del término $H_R^{(x)}$ es despreciable para sistemas Q1DEGS con acoplamiento espín-órbita débil (Burgos, 2005), de tal forma que la ecuación (4.4) se transforma en:

$$H_{so} \approx -i\alpha_R\sigma_x \frac{\partial}{\partial y} \quad (4.5)$$

En el caso de que $\alpha_R = \alpha_R(y)$, no es difícil notar que la ecuación (4.5) no es Hermitiana, i.e. $\hat{H}_{so} \neq H_{so}^+$. Para recuperar la Hermiticidad de H_{so} , lo que típicamente se hace es simetrizar el Hamiltoniano de la siguiente forma:

$$H_{so} = -i\sigma_x \frac{1}{2} \left\{ \alpha_R(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y} \alpha_R(y) \right\} \quad (4.6)$$

que se puede reescribir:

$$H_{so} = -i\sigma_x \left\{ \alpha_R(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial \alpha_R(y)}{\partial y} \right\} \quad (4.7)$$

La forma de H_{so} ahora es claramente Hermitiana (además unidimensional).

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo con acoplamiento Rashba 1D se reduce a:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial}{\partial y^2} + V(y) \right) \mathbf{I} - i\sigma_x \left\{ \alpha_R(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial \alpha_R(y)}{\partial y} \right\} \right] |\psi(y, t)\rangle = \frac{i\hbar \partial}{\partial t} |\psi(y, t)\rangle \quad (4.8)$$

Donde $|\psi(y, t)\rangle$ es un espinor de la forma:

$$|\psi(y, t)\rangle = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y, t) \\ \psi_{\downarrow}(y, t) \end{pmatrix} \quad (4.9)$$

Notamos que H es el Hamiltoniano para un sistema conservativo y por tanto la ecuación de evolución temporal es:

$$|\psi(y, t)\rangle = e^{-\frac{i(t-t_0)\hat{H}}{\hbar}} |\psi(y_0, t_0)\rangle \quad (4.10)$$

donde el operador $e^{-\frac{i(t-t_0)\hat{H}}{\hbar}}$ es Hermitiano con $\psi(y_0, t_0)$ la función de onda en la posición y_0 al tiempo t_0 con $t_0 < t$.

Procedemos ahora a discretizar las ecuaciones (4.8) y (4.10) y resolver el sistema de ecuaciones de diferencias finitas.

4.2 La ecuación de Schrödinger en diferencias finitas:

Usando diferencias finitas discretizamos los términos de la ecuación de onda y tenemos (ver apéndice B):

$$H|\psi(y, t)\rangle \rightarrow (H\psi)_j^n \quad \hat{H} \rightarrow H(\delta y, \delta t) \quad y \quad \psi(y, t) \rightarrow \psi_j^n$$

donde
$$H = H_{oj}^n + H_{soj}^n$$

$$\psi_j^{n+1} = e^{\frac{-i}{\hbar} \delta t \hat{H}} \psi_j^n \quad (4.10)$$

con $y \rightarrow j\delta y$ y $t \rightarrow n\delta t$, para todo $j = 0, 1, 2, \dots, J$ y $n = 0, 1, 2, \dots, N$, siendo J y N el número total de particiones en el espacio y tiempo respectivamente.

Siguiendo el trabajo de Goldberg, utilizamos para el operador de evolución temporal:

$$e^{\frac{-i\delta t \hat{H}}{\hbar}} \approx \begin{pmatrix} \mathbf{I} - \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H} \\ \mathbf{I} + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H} \end{pmatrix} \quad (4.11) \quad \text{“Aproximación de Cayley “}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{2}{\mathbf{I} + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H}} - \mathbf{I} \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Aquí H es un operador matricial de 2×2 con \mathbf{I} la matriz identidad de 2×2 . Cabe notar que la aproximación de *Cayley* es correcta hasta términos de orden δt^2 . Sustituyendo la aproximación de *Cayley* (4.12) en la ecuación (4.9) obtenemos lo siguiente:

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y, t) \\ \psi_{\downarrow}(y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\mathbf{I} + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H}} - \mathbf{I} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \psi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

que podemos reescribir formalmente como:

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y, t) \\ \psi_{\downarrow}(y, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \phi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \psi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} \quad (4.14)$$

donde hemos definido la función auxiliar $\phi(y_0, t_0)$:

$$\begin{pmatrix} \phi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \phi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} = \left(\mathbf{I} + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H} \right) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \psi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} \quad (4.15)$$

que conduce al reagrupar términos a:

$$2 \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \psi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} = \left(\mathbf{I} + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} \hat{H} \right) \begin{pmatrix} \phi_{\uparrow}(y_0, t_0) \\ \phi_{\downarrow}(y_0, t_0) \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

$$\text{i.e.} \quad 2|\psi(y_0, t_0)\rangle = \left(I + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} H \right) |\phi(y_0, t_0)\rangle \quad (4.16a)$$

Si ahora aplicamos H a $|\phi(y_0, t_0)\rangle$ en diferencias finitas (ver apéndice B)

obtenemos:

$$H|\phi(y_0, t_0)\rangle = \begin{bmatrix} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\delta y^2} (\phi_{\uparrow(j+1)}'' + \phi_{\uparrow(j-1)}'' - 2\phi_{\uparrow j}'' + V_j \phi_{\uparrow j}'') & -\frac{i}{\delta y} \alpha_{Rj} (\phi_{\downarrow(j+1)}'' - \phi_{\downarrow j}'' - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\downarrow j}'') \\ -\frac{i}{\delta y} \alpha_{Rj} (\phi_{\uparrow(j+1)}'' - \phi_{\uparrow j}'' - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\uparrow j}'') & -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\delta y^2} (\phi_{\downarrow(j+1)}'' + \phi_{\downarrow(j-1)}'' - 2\phi_{\downarrow j}'' + V_j \phi_{\downarrow j}'') \end{bmatrix} \quad (4.17)$$

Por lo que el sistema de la ecuación (4.16) en diferencias finitas se puede escribir:

$$2\psi_{\uparrow j}'' = \phi_{\uparrow j}'' + \left(\frac{i\delta t}{2\hbar} \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\delta y^2} (\phi_{\uparrow(j+1)}'' + \phi_{\uparrow(j-1)}'' - 2\phi_{\uparrow j}'' + V_j \phi_{\uparrow j}'') - \frac{i\alpha_j}{\delta y} (\phi_{\downarrow(j+1)}'' - \phi_{\downarrow j}'' - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\downarrow j}'') \right] \quad (4.18a)$$

$$2\psi_{\downarrow j}'' = \phi_{\downarrow j}'' + \left(\frac{i\delta t}{2\hbar} \right) \left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\delta y^2} (\phi_{\downarrow(j+1)}'' + \phi_{\downarrow(j-1)}'' - 2\phi_{\downarrow j}'' + V_j \phi_{\downarrow j}'') - \frac{i\alpha_j}{\delta y} (\phi_{\uparrow(j+1)}'' - \phi_{\uparrow j}'' - \frac{i}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\uparrow j}'') \right] \quad (4.18b)$$

Observamos que el sistema de ecuaciones (4.18) acopla las componentes del espinor para ϕ , i.e. ϕ_{\uparrow}'' y ϕ_{\downarrow}'' a través del parámetro α_R . Claramente para el caso $\alpha_R = 0$ la ecuación (4.17) es diagonal, reduciendo el problema al sistema de Goldberg

para cada especie de espín. En ésta situación las ecuaciones (4.18) conforman un sistema tridiagonal el cual es posible resolver conociendo $\psi_{\uparrow\downarrow j}^{n=0}$ (condiciones iniciales) (para todas las $\phi_{\uparrow\downarrow j}^n$). Sin embargo, debido a la presencia del término del acoplamiento espín-órbita ($\alpha_R \neq 0$) tenemos un sistema de ecuaciones acopladas que no se puede resolver en la presente forma.

Para poder resolver el sistema de ecuaciones (acopladas en el espín) de la ecuación (4.18), lo que tenemos que hacer primero es desacoplar las ecuaciones para que conduzcan a un sistema tridiagonal que podamos resolver numéricamente. Para este fin usamos la transformación unitaria, \mathbf{U} que conecte a un nuevo espinor $|\chi_j^n\rangle$ con $|\phi_j^n\rangle$, esto es:

$$\begin{pmatrix} \chi_{+j}^n \\ \chi_{-j}^n \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} \phi_{\uparrow j}^n \\ \phi_{\downarrow j}^n \end{pmatrix} \quad \text{con} \quad \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}$$

es decir
$$\chi_{\pm j}^n = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{\uparrow j}^n \pm \phi_{\downarrow j}^n) \quad (4.19)$$

Si ahora sumamos (4.18a) y (4.18b) y utilizamos (4.19), llegamos a la siguiente expresión al reagrupar términos:

$$\begin{aligned} \frac{8}{\sqrt{2}} \left(\frac{im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} \right) (\psi_{\uparrow j}^n + \psi_{\downarrow j}^n) &= \left(1 + \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_{Rj} \right) \chi_{+(j+1)}^n \\ &+ \left(\frac{4im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} - 2 - \frac{2im^* \delta y^2}{\hbar^2} V_j - \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_{Rj} + \frac{im^* \delta y}{2\hbar^2} (\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}) \right) \chi_{+j}^n + \chi_{+(j-1)}^n \end{aligned} \quad (4.20)$$

Similarmente, si ahora restamos (4.18b) y (4.18a), utilizamos (4.19) y reagrupamos se llega a la ecuación.

$$\begin{aligned} \frac{8}{\sqrt{2}} \left(\frac{im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} \right) (\psi_{\uparrow j}^n - \psi_{\downarrow j}^n) &= \left(1 - \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_{Rj} \right) \chi_{-(j+1)}^n \\ &+ \left(\frac{4im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} - 2 - \frac{2im^* \delta y^2}{\hbar^2} V_j + \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_{Rj} + \frac{im^* \delta y}{2\hbar^2} (\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}) \right) \chi_{-j}^n + \chi_{-(j-1)}^n \end{aligned} \quad (4.21)$$

Las ecuaciones (4.20) y (4.21) se pueden escribir en forma compacta de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \frac{8}{\sqrt{2}} \frac{im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} (\Psi_{\uparrow j}^n \pm \Psi_{\downarrow j}^n) &= \left(1 \pm \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_j \right) \chi_{\pm(j+1)}^n \\ &+ \left(\frac{4im^* \delta y^2}{\hbar \delta t} - 2 - \frac{2im^* \delta y^2}{\hbar^2} V_j \mp \frac{2im^* \delta y}{\hbar^2} \alpha_j + \frac{im^* \delta y}{2\hbar^2} (\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}) \right) \chi_{\pm j}^n + \chi_{\pm(j-1)}^n \end{aligned} \quad (4.22)$$

La solución de la ecuación tridiagonal (Mireles, 1995) anterior (4.22) se encuentra numéricamente usando las condiciones iniciales (sección 4.3) y de frontera con las ecuaciones (4.19) y (4.14) en diferencias finitas, con la cual es posible obtener la función de onda al siguiente intervalo de tiempo y así sucesivamente. Debido a que tenemos una ecuación para cada dirección de polarización del espín, el programa evalúa cada una de las ecuaciones por separado, arrojando los resultados para ambas polarizaciones.

Note que el uso de la transformación unitaria \mathbf{U} nos permitió reescribir nuestro sistema acoplado original para las $\phi_{\uparrow, \downarrow}$'s a un sistema desacoplado para las funciones χ_{\pm} .

La ecuación (4.22) es claramente tridiagonal y por tanto soluble a $t = 0$ si conocemos las ecuaciones iniciales $\psi_{\uparrow j}^{n=0}$ y $\psi_{\downarrow j}^{n=0}$ y de frontera ($\psi_{\uparrow j}^{n=0} = \psi_{\downarrow 0}^{n=0} = 0$). Lo que nos permite encontrar las $\phi_{\uparrow, j}^{n=0}$ y $\phi_{\downarrow, j}^{n=0}$ para todo j de (4.14).

Ahora, a través de la ecuación (4.14) en diferencias finitas:

$$\psi_{\uparrow,j}^{n+1} = \phi_{\uparrow,j}^n - \psi_{\uparrow,j}^n$$

$$\psi_{\downarrow,j}^{n+1} = \phi_{\downarrow,j}^n - \psi_{\downarrow,j}^n$$

es posible conocer la función de onda al tiempo $(n+1)$ para toda posición j y cada polarización de espín. Conociendo la nueva solución para la función de onda utilizamos de nuevo la ecuación (4.22) para conocer la nueva $\chi_{\pm j}^{n+1}$ y repitiendo el procedimiento anterior determinamos la nueva $\chi_{\uparrow,\downarrow,j}^{n+2}$ y así sucesivamente, se repiten los pasos anteriores hasta conocer la función de onda para cada espín a todo tiempo y posición.

4.3 Condiciones iniciales y a la frontera.

Para la solución numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se representó el estado inicial de los electrones por un paquete Gaussiano espín polarizado:

$$|\psi(y, 0)\rangle = \psi(y, 0) \xi_{\sigma} \quad \text{con } \xi_{\sigma=\pm} \rightarrow \text{polarización del espín}$$

$$\psi(y, 0) = (\pi\sigma)^{-1/4} e^{ik_0 y} e^{-(y-y_0)^2/2\sigma^2} \quad (4.23)$$

donde $e^{ik_0 y}$ hace que la función de onda se desplace hacia la derecha con un momento inicial promedio $\hbar k_0$, donde y_0 es la localización inicial del centroide del paquete Gaussiano en $t = 0$, siendo σ la dispersión del paquete.

Las condiciones a la frontera para la función de onda $\psi(x, t)$ se fijaran de la siguiente manera: supondremos que la partícula esta confinada dentro de una caja unidimensional de longitud L de tal manera que las funciones de onda para cada espín asociadas a estas partículas se anulen en las paredes de dicha caja, a todo tiempo t , i.e.,

$$\begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(L, t) \\ \psi_{\downarrow}(L, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(0, t) \\ \psi_{\downarrow}(0, t) \end{pmatrix} = 0 \quad (4.24)$$

Tal condición restringe por supuesto la elección de los valores de la dispersión inicial (σ), y de la posición del centroide del paquete Gaussiano (y_0) para que las funciones de onda sean despreciables cerca y en las fronteras de la caja durante el

tiempo de simulación. Goldberg (Goldberg, 1967) mostró que las condiciones numéricas óptimas son las siguientes:

$$\left(\frac{\sigma_N}{\sigma}\right)^2 = 1 + \left(\frac{4N\delta y^2}{\lambda\sigma^2}\right)^2 \sim 1 \quad (4.25)$$

en donde σ_N es la dispersión del paquete después de un tiempo $N\delta t$, siendo N y λ , el numero total de particiones en el espacio y $\lambda=2\delta y^2/\delta t$. Por otro lado el momento inicial promedio k_0 dado por:

$$k_0 = J\lambda/8N\delta y \quad (4.26)$$

Así mismo, Goldberg sugiere usar las siguientes condiciones para la elección de los valores máximos permitidos por el esquema numérico del número de onda y el potencial de interacción, t_{\max} y V_{\max} , respectivamente:

$$\begin{aligned} k_{\max} &<< \frac{\pi}{\delta y} \\ \frac{V_{\max}\delta y^2}{12} &<< 1 \\ \frac{(k_{\max}\delta y)^2}{12} &<< 1 \end{aligned} \quad (4.27)$$

La precisión de la simulación numérica depende de la elección arbitraria de estos valores en el rango de validez de tales condiciones.

4.4 Cálculo Numérico de la Transmisión.

Una vez conocida la función de onda en toda posición y tiempo para cada espín usamos el esquema numérico descrito anteriormente, uno puede proceder al cálculo de las probabilidades de transmisión y reflexión. Estas las calculamos a través de las razones de los flujos transmitidos y reflejados respecto al flujo incidente para un tiempo de simulación suficientemente grande. Explícitamente, la probabilidad de transmisión de un paquete de onda con espín $\sigma = \uparrow \downarrow$ esta dada por:

$$T_{\sigma}(E) = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} \int_a^L |\Psi_{\sigma}(y, t)|^2 dy}{\sum_{\sigma'} \int_0^{\frac{L-a}{2}} |\Psi_{inc, \sigma'}(y, t = 0)|^2 dy} \quad (4.28)$$

Mientras que la probabilidad de reflexión esta dada por:

$$R_{\sigma}(E) = \frac{\lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^{\frac{L-a}{2}} |\Psi(y, t)|^2 dy}{\sum_{\sigma'} \int_0^{\frac{L-a}{2}} |\Psi_{inc, \sigma'}(y, t = 0)|^2 dy} \quad (4.29)$$

Donde se ha supuesto que el potencial de dispersión $V(y)$ está centrado en $\frac{L}{2}$ con extensión $2a$, siendo L la longitud "efectiva" de simulación numérica. Note que por conservación de corriente se debe satisfacer:

$$\frac{1}{2} \sum_{\sigma = \uparrow, \downarrow} (T_{\sigma} + R_{\sigma}) = 1 \quad (4.32)$$

$$\text{i.e. } T(E) + R(E) = 1,$$

$$\text{con } T(E) = \frac{1}{2}(T_{\uparrow}(E) + T_{\downarrow}(E))$$

$$\text{y } R(E) = \frac{1}{2}(R_{\uparrow}(E) + R_{\downarrow}(E))$$

Claramente, para el caso sin acoplamiento espín-órbita $T_{\uparrow}(E) = T_{\downarrow}(E)$ y $R_{\uparrow}(E) = R_{\downarrow}(E)$ arrojándonos los valores esperados para $T(E)$ y $R(E)$ del caso espín-independiente.

V. Resultados y Discusión

5.1 Análisis

En este capítulo se mostrarán y discutirán los resultados de la simulación numérica del sistema para el caso de una barrera de potencial estacionaria en presencia del acoplamiento espín-órbita en una dimensión. Inicialmente se comprobó la exactitud del algoritmo comparando los cálculos numéricos obtenidos con los exactos ya conocidos. Posteriormente se procedió a incorporarle los demás efectos como el acoplamiento espín-órbita entre otros, y estudiar el transporte. Se realizaron cálculos numéricos del coeficiente de transmisión con respecto a la energía, al ancho de la barrera, el parámetro α_R de Rashba y para diferentes polarizaciones del paquete incidente. Se obtuvo, asimismo cálculos del cuadrado de la polarización de espín como función del ancho de la barrera.

A continuación se discutirán y analizará los resultados obtenidos mediante la solución a la ecuación de onda del sistema, para dos casos (barrera relativamente delgada (30Å), barrera ancha (100Å)). Se mostrará el cálculo de la variación de la transmisión respecto a la energía de Fermi (energía incidente de los paquetes de onda), del parámetro de Rashba y de las diferentes polarizaciones de onda incidentes, entre otros parámetros.

5.2 Caso de la Barrera Angosta

Los resultados que se discutirán en esta sección corresponden solo al caso de la barrera delgada de 30 Å de espesor. Los parámetros de simulación no mostrados en el texto se describirán explícitamente en cada gráfica.

Con el fin de probar el algoritmo, se considera primeramente el caso de acoplamiento espín-órbita nulo ($\alpha_R = 0$) y se grafica coeficiente de transmisión

suponiendo paquetes incidentes con polarización $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ para ambos casos: el analítico (exacto)⁶ y el numérico. En la figura 5.1 se observa claramente un traslape de la solución exacta con la solución numérica, demostrando que nuestros resultados numéricos se ajustan excelentemente al caso exacto. Los parámetros de simulación son: $V_0 = 0.4\text{eV}$ del potencial y una dispersión del paquete de $\sigma = 1200\text{Å}$ para ambas polarizaciones *arriba y abajo*

Asimismo, en la figura 5.1 se muestra el coeficiente de transmisión como función de la energía promedio (en eV) de los paquetes incidentes sobre la estructura para un valor típico del parámetro de Rashba ($\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{eVm}$) que se observa de color rojo, para ambas polarizaciones, en donde la línea discontinua es para el caso de la polarización abajo y la línea continua es para la polarización arriba.

⁶ . Las fórmulas analíticas para $T(E)$ vs E que se graficaron son las siguientes, para una barrera $E > 0$ (Davies J, 1993):

$$E > V_0 \quad T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \text{Sin}^2(2ka) \right]^{-1} \quad \text{con} \quad k = [2m(E - V_0) / \hbar^2]^{1/2} \quad (5.1)$$

$$E < V_0 \quad T = \left[1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \text{Sinh}^2(2ka) \right]^{-1} \quad \text{con} \quad k = [2m(V_0 - E) / \hbar^2]^{1/2} \quad (5.2)$$

con V_0 la altura del potencial y $2a$ el espesor de la barrera.

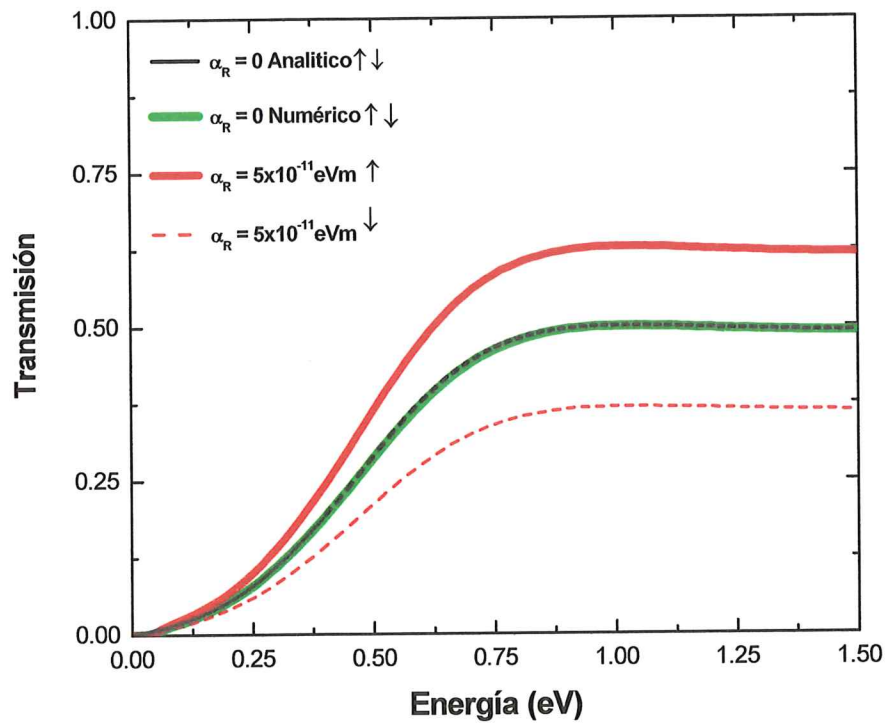


Fig. 5.1. Comparación del cálculo exacto y numérico del coeficiente de transmisión como función de la energía promedio E . La barrera tiene una altura de $V_0 = 0.4\text{eV}$, la polarización del paquete incidente es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, con una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ para Rashba cero y Rashba finito. Para la simulación numérica se utilizaron también los siguientes parámetros: $t = 590\delta t$ donde $\delta t = 1f$, con un intervalo espacial de la simulación de $\delta x = 2 \text{ \AA}$.

En la fig. 5.2 se muestra, la evolución temporal de un paquete de onda Gaussiano en 4 tiempos diferentes (0, 177, 236, y 531 δt), como función de la posición; para la simulación se utilizaron los parámetros de la fig. 5.1.

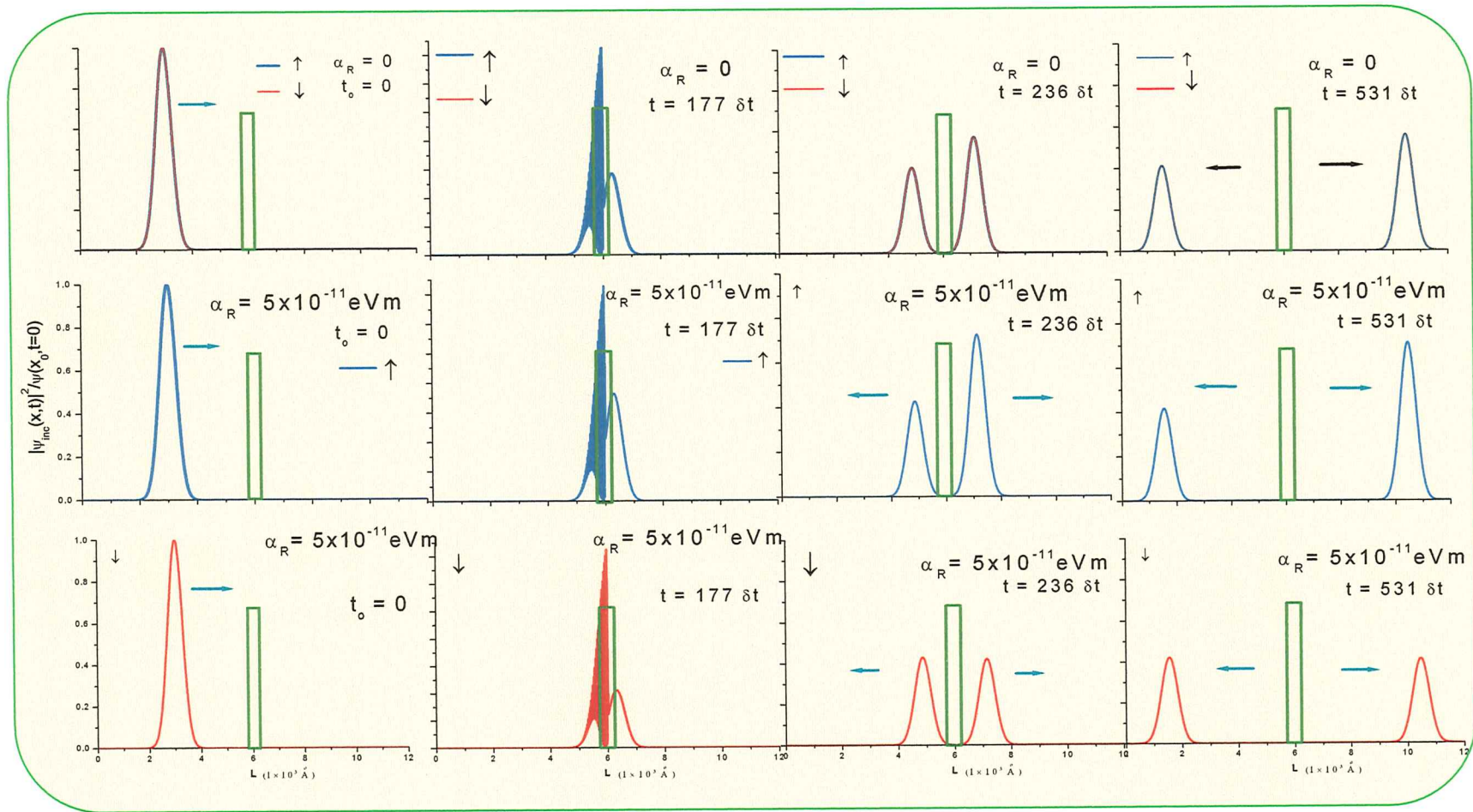


Fig. 5.2. Gráfica de la evolución temporal del paquete de la simulación de la figura 5.1 para los siguientes tiempos: $t = 0, 177 \delta t, 236 \delta t, 531 \delta t$ ($\delta t = 1$). Que ilustra la posición del paquete en su posición inicial, cuando interactúa con la barrera y la posición final del paquete.

En la fig. 5.3 se muestra graficado el coeficiente de transmisión dependiente del valor promedio de la energía E , para distintos valores de la altura del potencial V_0 (0.23 eV, 0.30 eV, 0.50 eV), la línea continua es para el caso de polarización "arriba" y la línea discontinua es para el caso de la polarización "abajo".

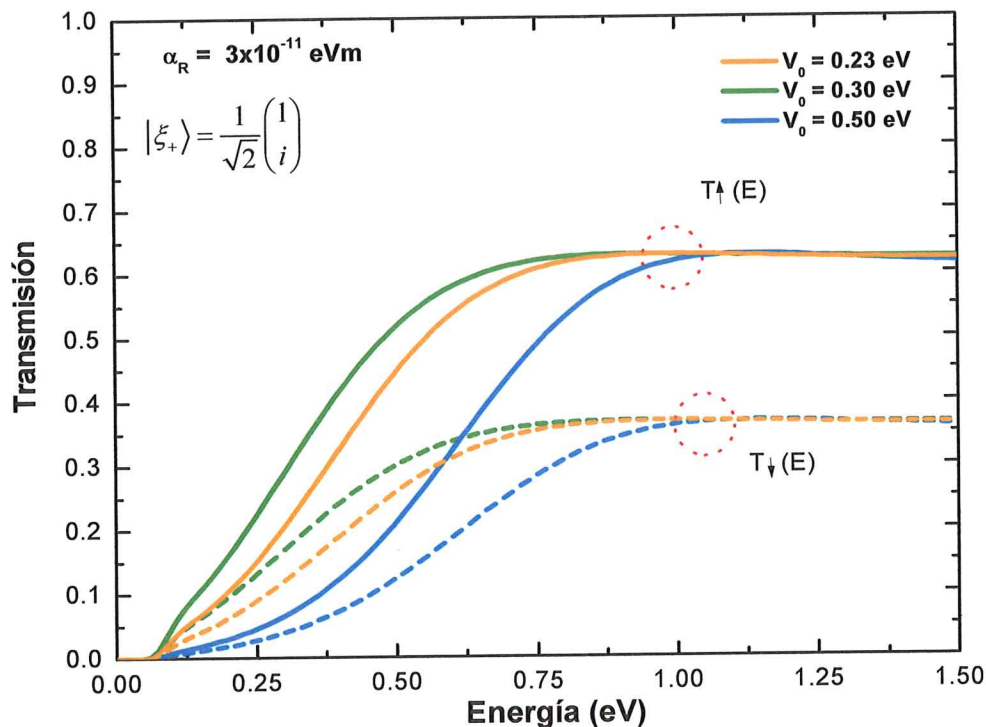


Fig. 5.3. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes valores del potencial V_0 y con polarización incidente $|\xi_+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, el resto de los parámetros son, $\sigma = 1200 \text{ \AA}$, longitud del sistema $L = 12000 \text{ \AA}$, $\delta x = 2 \text{ \AA}$ y $\delta t = 59 f$.

Es evidente de la figura 5 que entre menor sea el valor de $V_0=0.23 \text{ eV}$ mas suave es la curva de transmisión. Note que la transmisión se satura para energías $E > 0.75 \text{ eV}$. Ahora bien, para la gráfica de la figura 5.4 al igual que las anteriores se calculó el coeficiente de transmisión dependiente de la energía E , pero ahora para distintos valores de α_R y para un valor fijo de $V_0 = 0.5 \text{ eV}$.

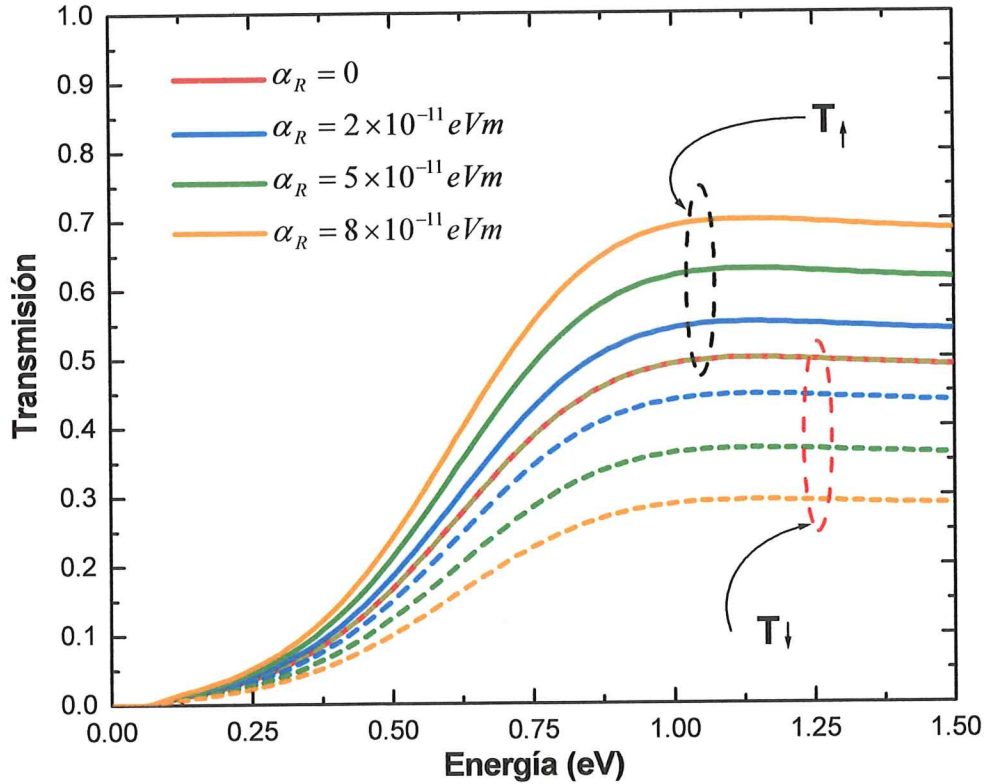


Fig. 5.4 Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes valores del parámetro α_R , con $V_0 = 0.5 \text{ eV}$ el resto de los parámetros son idénticos a los usados en la fig. 5.3. Las líneas continuas son el resultado para el caso de la polarización con espín “arriba” (grupo de curvas en el círculo de color negro) y la línea punteada o discontinua es para el caso del espín “abajo” (grupo de curvas en el círculo de color rojo).

Para el caso de $\alpha_R = 0$ la transmisión con dirección “arriba” y “abajo” se traslapan tal como uno esperaría para los demás casos, se puede observar que entre mayor es el valor de α_R menor es la transmisión con polarización “abajo” (T_{\downarrow}) y por lo tanto la transmisión con dirección “arriba” aumenta reflejo de la presión de espín inducida por el acoplamiento espín-órbita.

Similarmente, en la fig. 5.5, se fijó un valor del parámetro de Rashba α_R y se calculó el coeficiente de transmisión como función de la energía, pero ésta vez variando la polarización del paquete incidente. Note que dependiendo de la orientación de la

polarización inicial (y energía), la transmisión puede ser máxima (cerca de 1) o mínima (casi cero).

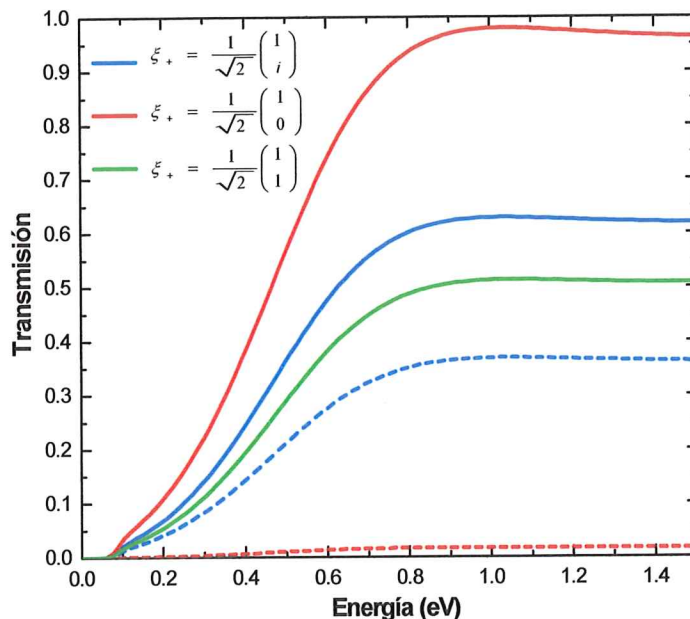


Fig. 5.5. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía para diferentes polarizaciones iniciales, con $V_0 = 0.4$ eV y con una dispersión del paquete de $\sigma = 230 \text{ \AA}$, con valor del parámetro de Rashba $\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ con la dimensión de la longitud del sistema $L = 12000 \text{ \AA}$, con un $\delta x = 2 \text{ \AA}$ y con un $\delta t = 59 \text{ f}$. Las líneas continuas son el resultado para el caso de la polarización con espín "arriba" y la línea punteada o discontinua es para el caso del espín "abajo".

De la figura 5.5 se observa ciertamente como las polarizaciones del paquete incidente afectan dramáticamente la transmisión respecto a la energía, debido a la configuración del sistema y de la dirección del transporte. Note por ejemplo para la línea de color rojo la transmisión es casi en su totalidad espín arriba, si se hubiese incidido un paquete con la polarización "abajo" lo que esperaríamos ver sería que la transmisión tendría la contribución más importante en dirección "abajo".

5.3 Barrera Ancha

Las gráficas que se mostrarán en esta sección corresponden solo al caso de la barrera ancha de 100 \AA de longitud, los demás parámetros de simulación se mostrarán en cada gráfica respectivamente para los distintos cálculos.

Inicialmente, con la finalidad de comparar los resultados analíticos (ecuaciones 5.1 y 5.2) con el numérico, se realizó el cálculo para el valor de $\alpha_R = 0$, i.e. sin acoplamiento espín-órbita. Observamos que hay un claro traslape entre las curvas de transmisión. Asimismo en la figura 5.6, se calculó la variación de la transmisión respecto a la energía con un valor arbitrario del parámetro de Rashba ($\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eVm}$) para ambas polarizaciones de espín. De la gráfica es evidente que el parámetro α_R es un valor muy pequeño, debido a que la polarización incidente es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ se esperaría que la contribución en la transmisión con dirección “abajo” fuera significativa, de tal manera que α_R no es lo suficientemente grande para cambiar la polarización de la transmisión.

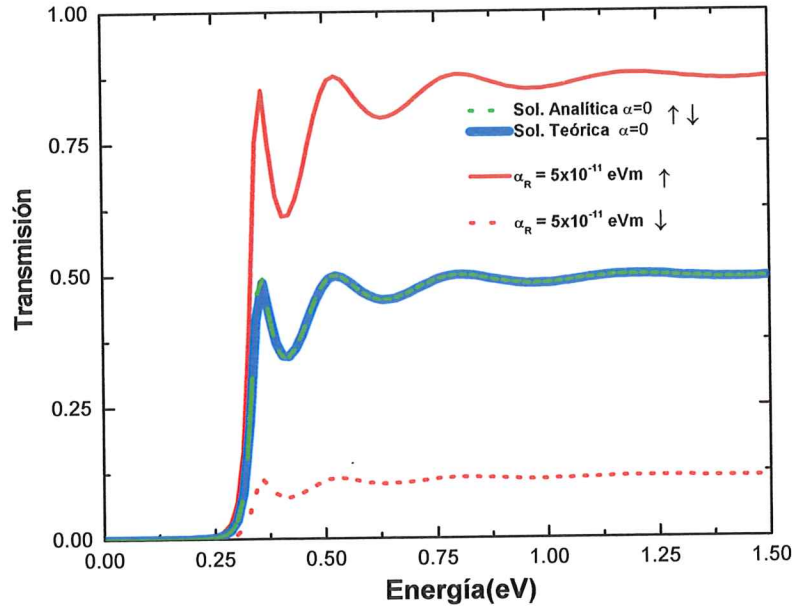


Fig. 5.6. Coeficiente de transmisión dependiente de la energía con $V_0 = 0.3$ eV y una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$, con la longitud del sistema $L = 12000 \text{ \AA}$, con un $\delta x = 2 \text{ \AA}$ con un $\delta t = 59 f$.

Las líneas continuas son el resultado para el caso de la polarización con espín “arriba” y la línea punteada o discontinua es para el caso del espín “abajo”. Si se suma la transmisión “arriba” y “abajo” vemos que a las energías de resonancia: $T_{\uparrow} + T_{\downarrow} = 1$.

Ahora bien, en la fig. 5.7 se muestran, en 4 tiempos diferentes (0, 295, 472 y $531 \delta t$), la evolución del paquete Gaussiano graficando la variación del coeficiente de transmisión respecto a la posición; para la simulación se utilizó un valor de la energía incidente de $E = 0.45 \text{ eV}$ y un $V_0 = 0.4 \text{ eV}$.

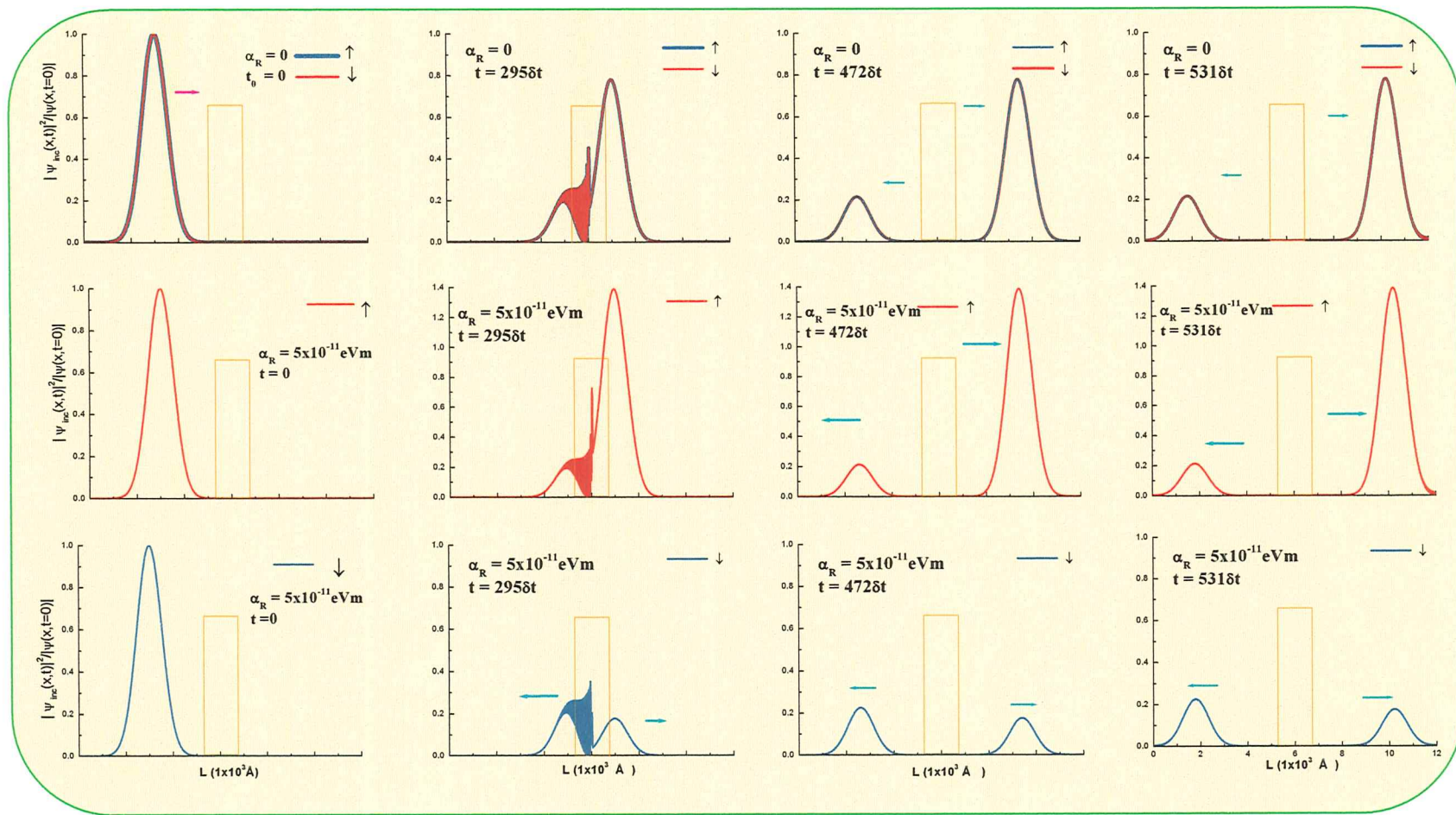


Fig. 5.7. Gráfica de la evolución temporal del paquete Gaussiano para 4 tiempos $t = 0, 295 \delta t, 472 \delta t, 531 \delta t$ ($\delta t = 59 f$). La polarización inicial del paquete incidente es de $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con $V_0 = 0.4 eV$, una dispersión de $\sigma = 700 \text{ \AA}$, con una energía incidente de $E = 0.45 eV$, $\delta y = 2 \text{ \AA}$.

En las primeras 4 gráficas de la figura 5.7 para el caso de $\alpha_R = 0$, se ve claramente un traslape entre las curvas de las polarizaciones “arriba” (color azul) y “abajo” (color rojo), debido a la ausencia de acoplamiento espín-órbita. En la siguiente serie de gráficas de la figura 5.7 se calculó para el caso de $\alpha_R = 5 \times 10^{-11} eVm$ para ambas polarizaciones de espín.

Asimismo, se calculó la variación del coeficiente de transmisión respecto a la energía, para diferentes valores del acoplamiento espín-órbita (α_R), al igual que algunos casos anteriores se incluyó la solución analítica y la solución numérica, con la intención de comparar ambos métodos.

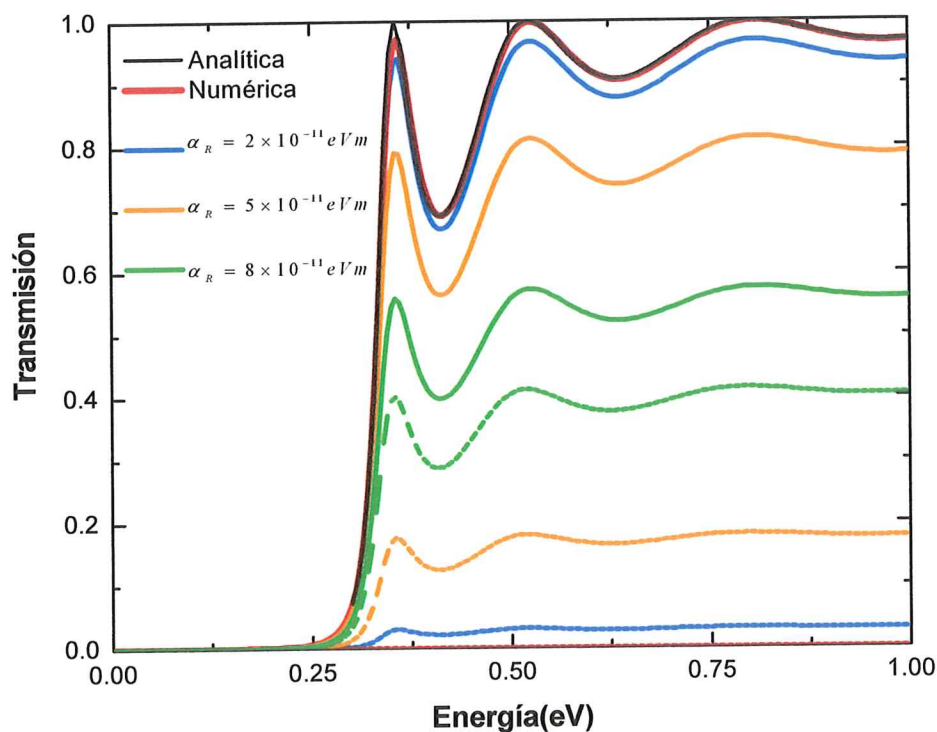


Fig. 5.8. Variación del coeficiente de transmisión con respecto a la energía para diferentes valores del parámetro de Rashba, con un $V_0 = 0.3 eV$ con la dispersión del paquete de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ y polarización inicial de $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$, la línea continua es para el caso de la transmisión con dirección “arriba” y la línea punteada es para el caso de la dirección “abajo”.

Para el caso de la gráfica de la figura 5.9 se calculó también la variación del coeficiente de transmisión respecto a la energía pero ahora se dejó fijo el valor de α_R para diferentes valores de V_0 .

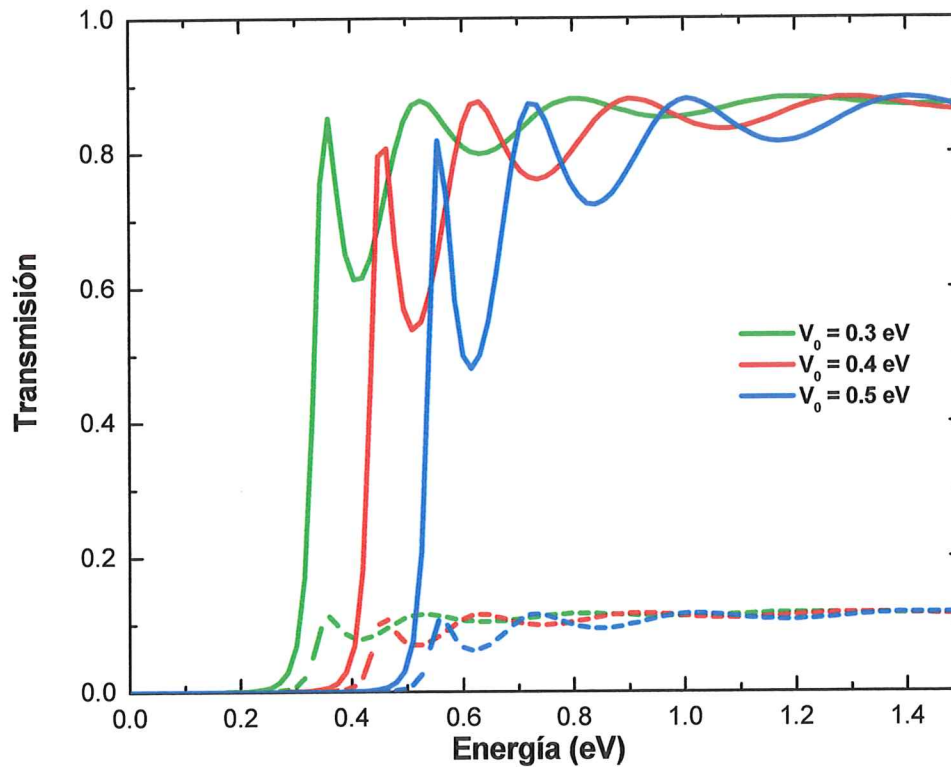


Fig. 5.9. Variación del coeficiente de transmisión con respecto a la energía para diferentes valores de V_0 , dejando fijo el valor del parámetro de Rashba ($\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eV}\text{\AA}$), la dispersión del paquete es de $\sigma = 1200 \text{ \AA}$ y polarización inicial de $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$. La línea continua es para el caso de la transmisión con dirección “arriba” y la línea punteada es para el caso de la dirección “abajo”.

5.4 Dependencia con el espesor de la barrera

En esta sección se mostrarán los cálculos obtenidos de la variación de la coeficiente de transmisión con respecto a la extensión espacial ($2a$) de la barrera, dejando el valor de la energía fijo para las dos regiones: $E > V_0$ y $E < V_0$. Ahora bien, como se mostró al inicio de cada sección del capítulo, se contempló también en esta parte la comparación de la solución analítica con la solución numérica sin incluir el término del acoplamiento espín-órbita. De la gráfica de la figura 5.10 es evidente un traslape en las dos soluciones ilustrando la exactitud de nuestra solución numérica.

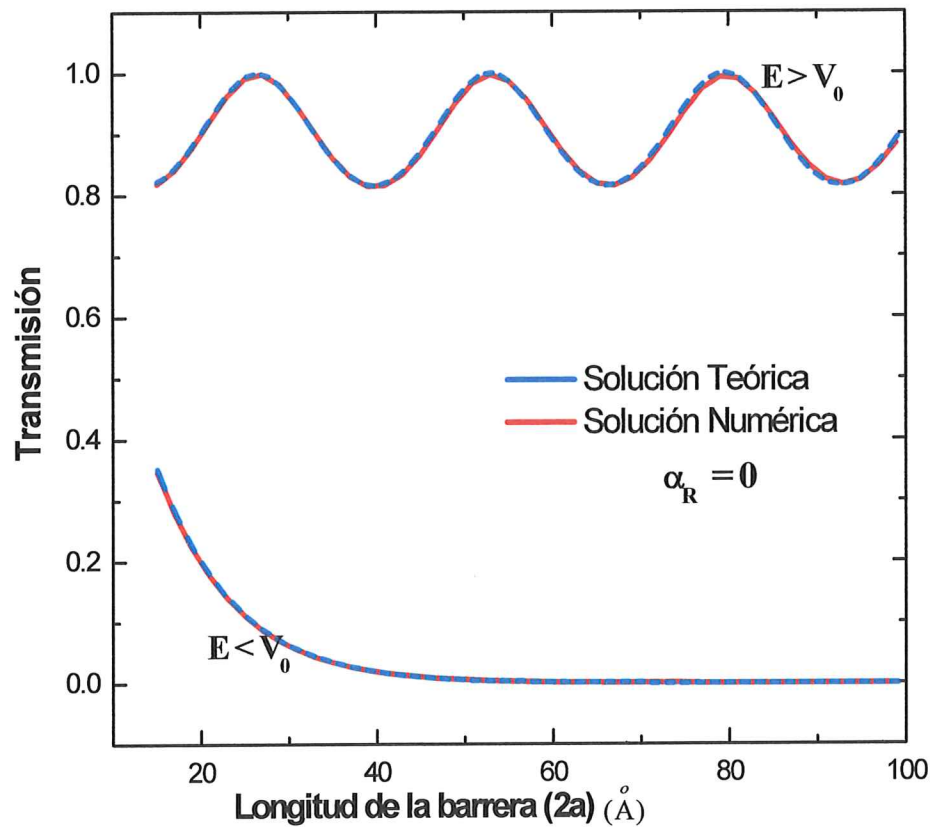


Fig. 5.10. Cálculo de la transmisión variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial de 15 Å a 100Å, sin la presencia del acoplamiento espín-órbita (analítico y numérico). Se usó el valor de $E_{inc} = 0.25eV$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.5eV$ para el caso de $E > V_0$ con $V_0 = 0.3eV$.

En la figura 5.11 se grafica la variación de la transmisión respecto a la longitud del potencial ($2a$, en Å), para diferentes valores de la intensidad del parámetro de Rashba, para los casos: $E > V_0$ y $E < V_0$. La línea punteada es para el caso de la dirección de polarización “abajo” mientras que para la dirección “arriba” es la línea continua.

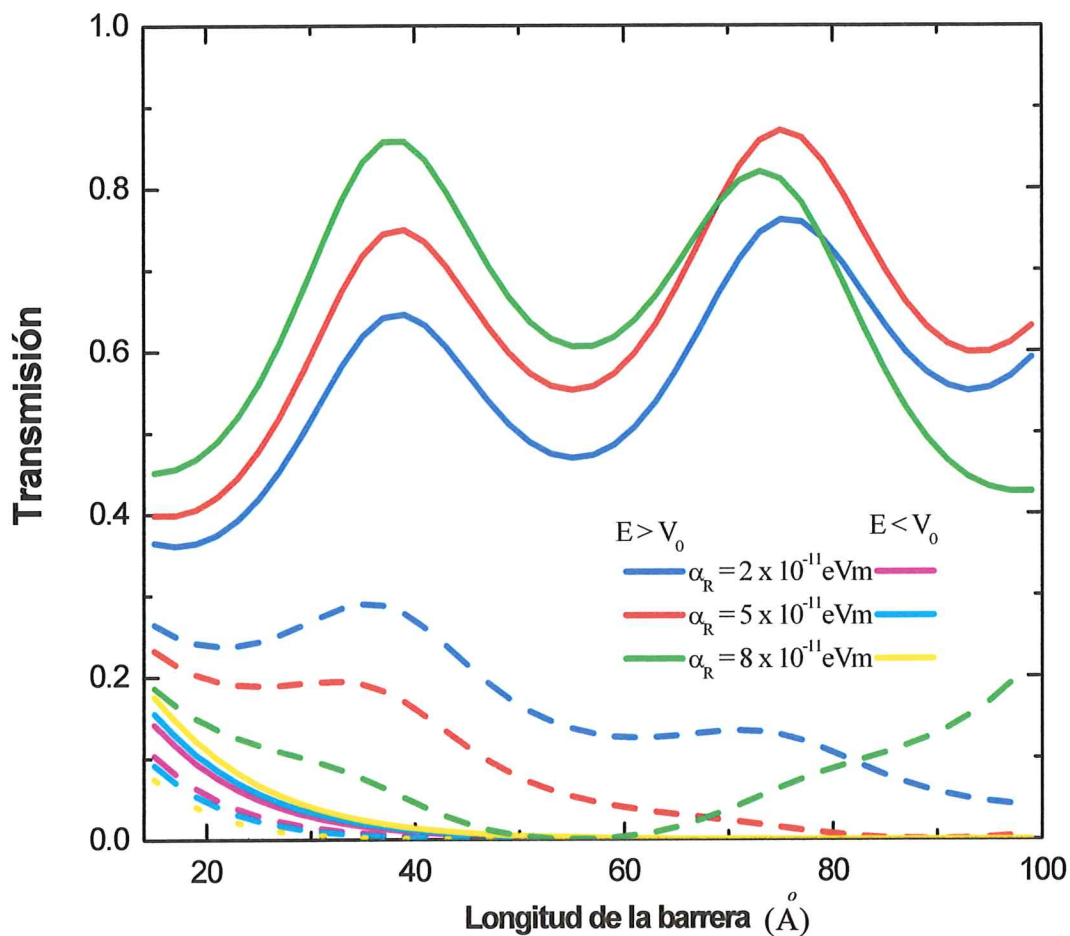


Fig. 5.11. Cálculo de la transmisión variando el ancho de la barrera del potencial desde 15 Å a 100 Å , para diferentes valores de α_R . Se usó $E_{inc} = 0.25 eV$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.4 eV$ para el caso de $E > V_0$, con $V_0 = 0.3 eV$. La polarización incidente del paquete es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con una dispersión de $\sigma = 1200 \text{ Å}$.

Para el caso de la polarización “arriba” (líneas continuas) cuando $E > V_0$ el coeficiente de transmisión es mayor para $\alpha_R = 8 \times 10^{-11} eVm$ en el régimen de la longitud de la barrera menor que 70 \AA después de esta región la transmisión es mayor para valores de $\alpha_R = 5 \times 10^{-11} eVm$. Asimismo, para el caso de $E < V_0$ es evidente que solo se obtiene transmisión para valores menores que 60 \AA en la longitud de la barrera, mostrando que la transmisión para los diferentes valores de α_R no varía considerablemente. Análogamente para el caso de la polarización “abajo”.

En la figura 5.12 se observa graficado el cuadrado del valor esperado de σ_x y la transmisión como función de la amplitud de potencial. Para los diferentes casos en donde $E > V_0$ y $E < V_0$. El valor esperado de la polarización y del cuadrado se obtuvo a través de las fórmulas (Shankar, 1994):

$$\langle \sigma_x \rangle = \frac{\langle \psi | \sigma_x | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad \text{y} \quad \text{análogamente} \quad \langle \sigma_x^2 \rangle = \frac{\langle \psi | \sigma_x^2 | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

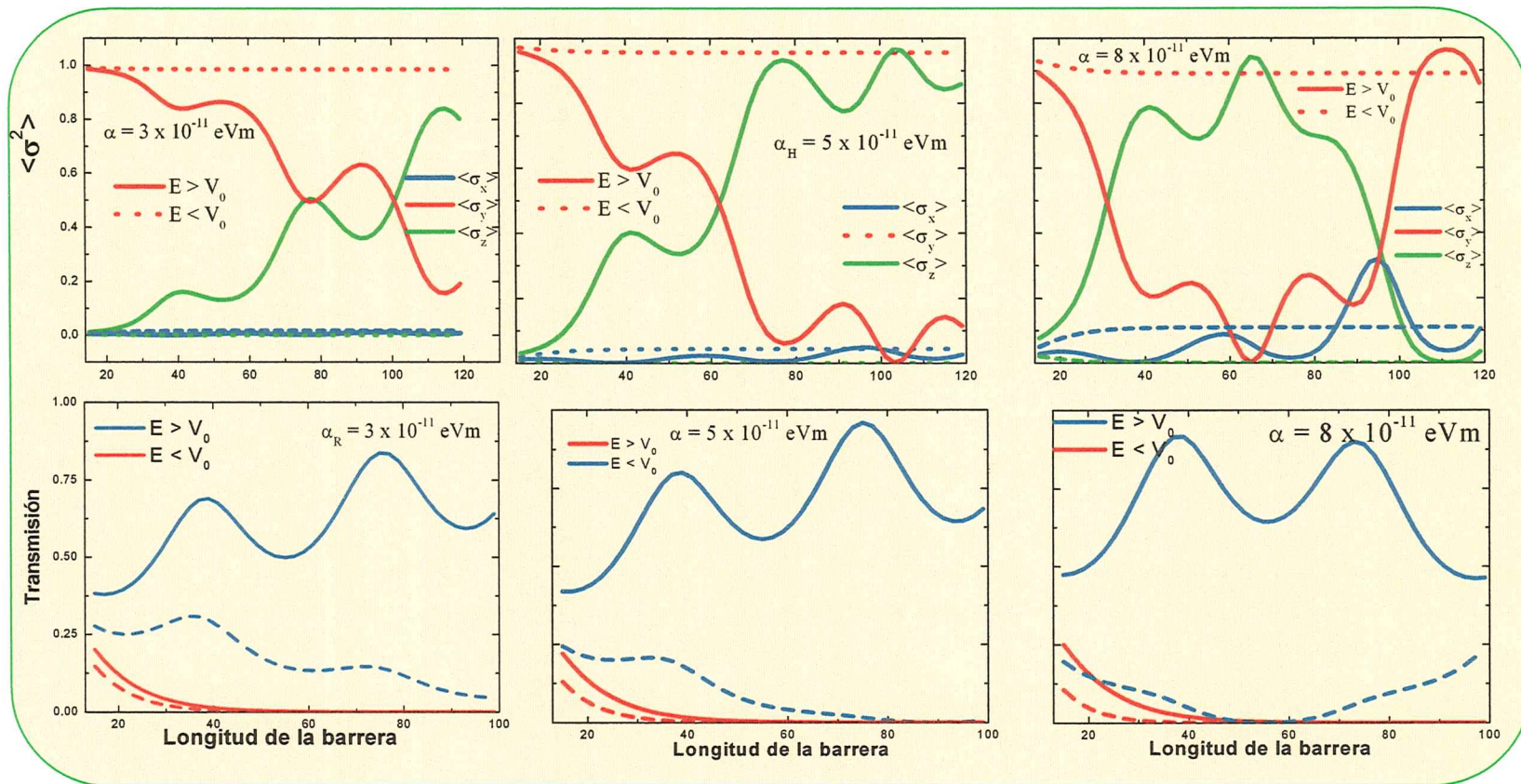


Fig. 5.12. Cálculo del valor esperado de las polarizaciones y $\langle \sigma^2 \rangle$ variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial desde 15\AA a 100\AA , para diferentes valores de α_R . Se usó $E_{inc} = 0.25eV$ para el caso de $E < V_0$ y el de $E_{inc} = 0.4eV$ para el caso de $E > V_0$, con $V_0 = 0.3eV$. La polarización incidente del paquete es $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ con una dispersión de $\sigma = 1200\text{\AA}$.

Por último en la figura 5.13 se muestra graficado la variación del cuadrado de la polarización respecto un intervalo de la amplitud del potencial, para distintos valores de la polarización del estado inicial. Lo anterior se hace para cada componente de la polarización ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$).

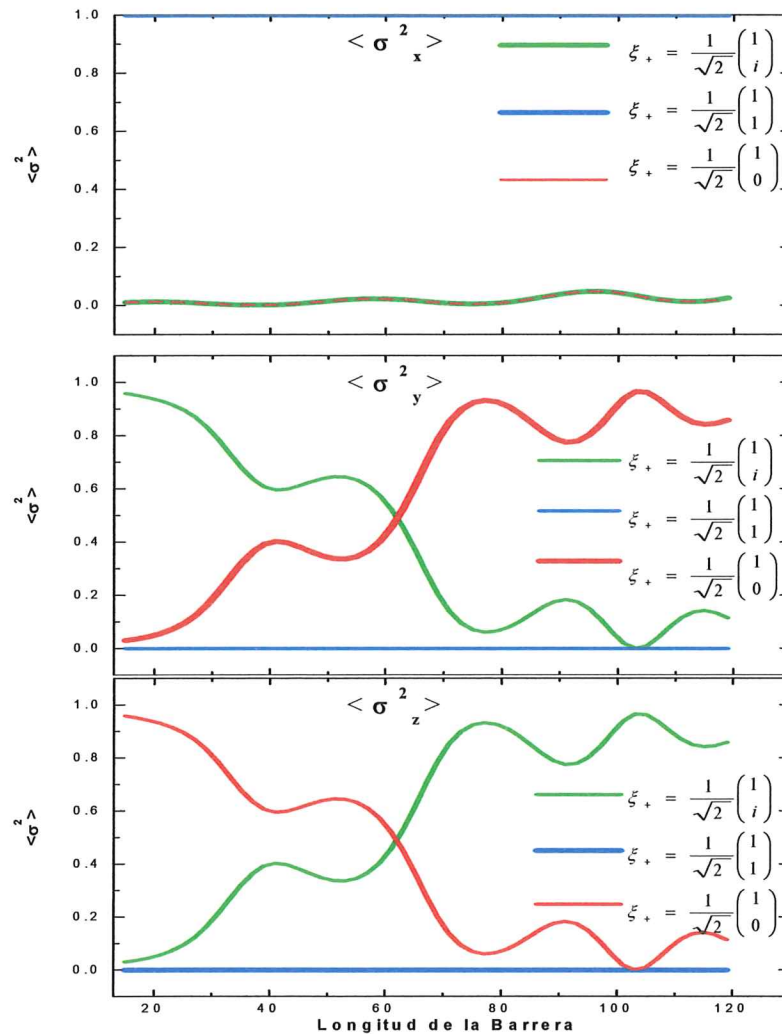


Fig. 5.13. Cálculo del cuadrado de la polarización variando la amplitud del ancho de la barrera de potencial de 15 \AA a 120 \AA para un valor fijo de $\alpha_R = 5 \times 10^{-11} \text{ eVm}$. La energía de los paquetes incidentes usada fue de $E_{inc} = 0,4 \text{ eV}$ con $V_0 = 0,3 \text{ eV}$ para las diferentes polarizaciones incidentes.

Note que para el caso de $\langle \sigma_x^2 \rangle$, el paquete incidente con polarización $\xi_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ se transmite en su totalidad, debido a que coincide con la dirección del transporte (y). Por lo que dicha polarización no contribuye a la polarización total. Claramente, para cualquier espesor de la barrera siempre se cumple que la suma de las polarizaciones arroja el valor unitario como era de esperarse por conservación de flujo de espín.

VI Conclusiones

Inspirados en el modelo del transistor de espín de Datta-Das, estudiamos el transporte de paquetes de onda electrónicos *espín polarizados* a través de una heteroestructura semiconductor unidimensional en presencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba. En particular, se estudió los efectos que el acoplamiento espín-órbita de Rashba introduce en la transmisión electrónica de electrones con espines polarizados a través de barreras de potencial estacionarias. La solución numérica del sistema se describió por medio del método de diferencias finitas. Específicamente discretizamos la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo en una dimensión, generalizando el formalismo desarrollado por Goldberg para incorporar la dependencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba unidimensional. Se elaboró un algoritmo computacional que resuelve la ecuación de onda con acoplamiento espín-órbita a través de la solución de un sistema tridiagonal y de ecuaciones de recursión. Se reprodujo los resultados de la solución analítica para la transmisión para los casos sin acoplamiento espín órbita, mostrando la excelente precisión de la solución numérica. Se realizaron cálculos de la variación de la transmisión respecto a la energía, para distintos valores del parámetro de Rashba, altura del potencial, longitud de la barrera y distinta polarización de espín.

En particular se calculó el coeficiente de transmisión como función de la energía para el caso de una barrera delgada y una barrera ancha, variando α_R , la polarización incidente y altura del potencial. Asimismo fue posible calcular el coeficiente de

transmisión como función del espesor de la barrera de potencial (variando α_R , polarización del paquete Gaussiano incidente, energía incidente, entre otros parámetros).

El modelo que se implementó para la solución numérica del sistema pueda ser modificado sin mucha dificultad, para simular otros sistemas o bien incorporar otros efectos, tales como: el potencial arbitrario sin importar el perfil (barrera, pozo, entre otros), así como su dependencia explícita en la posición y en el tiempo. Similarmente se pueden considerar situaciones físicas en la que el parámetro de Rashba dependa a su vez del tiempo y posición, $\alpha_R(x,t)$, por ejemplo. Efectos de la interacción con campos magnéticos y eléctricos también podrían considerarse para el cálculo de corrientes espín polarizadas. El modelaje del efecto *Zitterbewegung* podría asimismo implementarse con el esquema presentado en esta tesis, por mencionar algunos.

VII Literatura

Alvarado S. F. y P. Renaud. 1992. *Phys. Rev. Lett.* 9:1387.

Aronov A. G. and G. E. Pikus, *Fiz. Tekh.* 1976. *Poluprovodn.* 10:1177

Awshalom D.D., M. E. Flatté y N. Smarth. 2002. *Scientific American Latinoamericana.* 3:56.

Awschalom D. D. y J. M. Kikkawa, 1999. *Physics Today* 52:33.

Baibich M. N., J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, y F. Petroff, *Phys Rev. Lett.* 61:2472.

Burgos L., 2005, *Estudio del acoplamiento espín órbita en sistemas periódicos*, Cap.2. Tesis de Licenciatura.

Bychkov Y. A. y É. I. Rashba (1984), *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, *J. Phys. C* 17:6039 .

Das S. 2001. *Spintronics*, *American Scientist*, 89: 518 .

Datta S. y B. Das. 1990. *Electronic analog of the electro – optic modulator*, *Appl. Phys. Lett.* 56: 665.

David Z.-Y. Ting, Xavier Cartoixµa, David H. Chow, Jeong S. Moon, Darryl L. Smith, Thomas C. McGill, and Joel N. Schulman. 2002. *Rashba effect resonant tunneling spin-filters*. *IEEE Trans. Magn.* to be published.

Davies J. H. 1993. *The Physics of Low-Dimensional Semiconductors*. Cap. 5, Cambridge University Press.

Dyakanov M. I y V. I. Perel.1971. *Intrinsic Spin Hall Edges*, Sov. Phys. JETP 33:467.

Engels G., J. Lange y H. Luth. 1997. *Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped InxGal-xAs/InP quantum wells*, Phys. Rev. B 55: R1958 .

Feynman R. 1959. Am. Phys. Soc..

Fiederling R., M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag y L. W. Molenkamp. 1999. *Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode*, Nature 402:787.

Fu Y. y M. Willander. 2005. Electron wave-packet transport through nanoscale semiconductor device in time domain, Journal of applied physics 97:094311.

Gary A. Prinz. 1998. *Magnetoelectronics*, Science 282:1660.

Goldberg A, H. M. Schey, 1967. Am. J. Phys., 35:177.

Hacian S. 2002. Cuando La Ciencia Nos Alcance II, CFE. México D.F. 186.

Hirsch J. E. 1999. *Spin Hall Effect*, Phys. Rev. Lett. 83: 1834.

Kato K., R. C. Myers, A. C. Gossard y D.D. Awschalom. 2004. *Observation of the Spin-Hall Effect in Semiconductors*, Science 306:1910.

Kawakami K., Y. Kato, M. Hanson, I. Malajovich, J. M. Stephens, E. Johnston-Halperin, G. Salis, A. C. Gossard, y D.D. Awschalom. 2001. *Science* 294:131.

Koonin S., D. C. Meredith. 1990. *Computacional Physics*. Cap. 7 Addison-Wesley Publishing Company.

Mireles F. 1995. *Efectos Inelásticos en el tunelaje electrónico: Simulación numérica*, apéndice B. Tesis de Maestría.

Mireles F. y G. Kirczenow. (2001). *Ballistic spin – polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*, *Phys. Rev. B* 64:24426.

Moroz A. V. y C. H. Barnes. 1999. *Effect of the spin – orbit interaction on the band structure and conductance of quasi – one – dimensional systems*, *Phys. Rev. B* 60:14272.

Moya M. y J.S. Helman. 1979. *Am. J. Phys.* Vol 47: 453.

Nitta J., T. Akazaki, H. takayanagi y T. Enoki. 1997. *Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted In_{0.53}Ga_{0.47}As/In_{0.52}Al_{0.48}As*, *Phys. Rev. Lett.* 78:1335.

Ohno Y., D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno and D. D. Awschalom, 1999. *Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure*, *Nature* 402:790.

Prins M. W. J., H. van Kempen, H. van Leuken, R. A. de Groot, W. van Roy, and J. de Boeck, J. 1995. *Phys.: Condens. Matter* 7:9447 .

Romo R. y S. Ulloa. 2005. *Dynamic polarization tunneling: A spin filtering mechanism*, Phys. Rev. B **72**: 121305(R).

Sakurai J.J. 1999. *Modern quantum Mechanics*. Cap. 3 Addison-Wesley Publishing Company.

Scifres D. R., B. A. Huberman, R. M. White, and R.S. Bauer.1973. *Solid Stated*. 13:1615 .

Shankar R, 1994, *Principes of Quantum Mechanics*, Cap. 20 Second Edition, Plenum Press.

Sinova J, D. Culcer, Q.Niu, N. A. Sinitsyn, T. Jungwirth, y A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. **92**, 126603 (2004).

Schliemann J., Loss D., and R.M Westervelt, 2005,*Zitterbewegung of Electronic Wave Packets in III-V Zinc-Blende Semiconductor Quantum Wells*, Phys. Rev. Lett. **94**, 206801.

Winkler R., H. Noh, E. Tutuc y M. Shayegan, Phys Rev. B **65**, 155303.(2002)

Wunderlich J., B. Kaestner, J. Sinova y T. Jungwirth. 2005. *Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*, Phys. Rev. Lett. 94:047204.

Paginas WEB:

www.Intel.com

Apéndice A

Análisis de la función de onda incluyendo el espín

Si incorporamos el grado de libertad del espín de las partículas en la ecuación de Schrödinger entonces su función de onda asociada dependerá no sólo de la posición y el tiempo, si no también del estado del espín de la partícula. Para la descripción matemática de este grado de libertad, se introduce adicionalmente la componente del espín en dirección arbitraria, por conveniencia escogemos la dirección Z, de manera que el espín S_z se agrega como argumento de la función de onda conocida. La componente S_z puede tomar solo dos valores, $\pm \frac{1}{2}\hbar$, si las partículas son fermiones la representación de la función de onda será entonces:

$$\psi = \psi(\vec{r}, S_z, t) \quad (\text{A.1})$$

Donde ψ es un *espinor*, i.e. $\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{r}, t) \end{pmatrix}$, con componentes

$\psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, +\frac{1}{2}\hbar, t)$ y $\psi_{\downarrow}(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}, -\frac{1}{2}\hbar, t)$ respectivamente. Por tanto podemos reescribir (1) de la siguiente forma:

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) \\ \psi_{\downarrow}(\vec{r}, t) \end{pmatrix} = \psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) |\uparrow\rangle + \psi_{\downarrow}(\vec{r}, t) |\downarrow\rangle = \psi_{\uparrow}(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_{\downarrow}(\vec{r}, t) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

La introducción convenientemente de la función $|\sigma\rangle$ con $\sigma = \uparrow, \downarrow$ nos indica únicamente el estado del espín, espín arriba o espín abajo del electrón. Interpretamos $|\psi_{\uparrow}(r, t)|^2$ y a $|\psi_{\downarrow}(r, t)|^2$ como la densidad de probabilidad de encontrar un electrón en una localización \vec{r} a un tiempo t con espín arriba y espín abajo, respectivamente. Tal interpretación sugiere entonces que la probabilidad total de encontrar en cualquier tiempo e independientemente de la dirección del espín debe ser 1; esto es,

$$\int \psi^{\dagger} \psi(\vec{r}, t) dV = \int (\psi_{\uparrow}^* \psi_{\downarrow}^*) \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix} dV = \int (|\psi_{\uparrow}(\vec{r}, t)|^2 + |\psi_{\downarrow}(\vec{r}, t)|^2) dV = 1 \quad (\text{A.3})$$

La notación del espinor ofrece una formulación clara y mas útil pues permite de manera transparente actuar los operadores de espín, (escrita en términos de las matrices de Pauli) sobre tales espinores. Por ejemplo, las matrices de Pauli están dadas por:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \text{ y } \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

por lo tanto:

$$\begin{aligned} \sigma_x |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = |\downarrow\rangle \\ \sigma_y |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -i \\ 0 \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = -i |\uparrow\rangle \\ \sigma_z |\uparrow\rangle &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = |\uparrow\rangle \end{aligned}$$

similarmente para el caso de $|\downarrow\rangle$.

Apéndice B

Diferencias finitas para la ecuación de onda

A continuación se mostrará como se obtuvo la ecuación de onda total en términos de diferencias finitas:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + V(y) \right) \mathbf{I} - i\sigma_x \left\{ \alpha_R(y) \frac{\partial}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial \alpha_R(y)}{\partial y} \right\} \right] |\psi(y,t)\rangle = \frac{i\hbar \partial}{\partial t} |\psi(y,t)\rangle \quad (\text{B.1})$$

Con el fin de convertir las ecuaciones anteriores en términos de diferencias finitas proponemos que:

$$\begin{aligned} t &\rightarrow n\delta t \\ j &\rightarrow j\delta y \end{aligned} \quad \text{entonces:} \quad \psi(y,t) \rightarrow \psi_j^n$$

Donde la posición y en forma discreta es $j\delta y$ con $j = 0, 1, 2, \dots, J$, donde δy es el ancho de cada intervalo en el espacio, mientras que para caso de la variable temporal se utilizó $n\delta t$ con $n = 0, 1, 2, \dots$, donde similarmente δt define el intervalo temporal.

Para derivar la ecuación diferencial requerimos empezar por considerar la variación espacial de la función de onda ψ_j suprimiendo el índice dos tiempos y de espín haciendo el desarrollo de la serie de Taylor:

$$\begin{aligned} \psi_{j+1} &= \psi_j + \delta y \psi_j' + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi_j'' + \frac{1}{6} \delta y^3 \psi_j''' + O(\delta y^4) \\ \psi_{j-1} &= \psi_j - \delta y \psi_j' + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi_j'' - \frac{1}{6} \delta y^3 \psi_j''' + O(\delta y^4) \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Sumando ambas ecuaciones anteriores obtenemos lo siguiente:

$$\psi_{j+1} + \psi_{j-1} = 2\psi_j + \delta y^2 \psi_j'' + O(\delta y^4) \quad (\text{B.3})$$

Reescribiendo (B.2) tenemos lo siguiente:

$$\psi_j'' = \frac{1}{\delta y^2} (\psi_{j+1} - 2\psi_j + \psi_{j-1}) - O(\delta y^2) \quad (\text{B.4})$$

vemos que de (B.3) tenemos el valor de la segunda derivada en donde la ecuación (4.2) queda de la siguiente forma:

$$\hat{H}_o \psi \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{1}{\delta y^2} (\psi_{j+1}'' - 2\psi_j'' + \psi_{j-1}'') + V_j \psi_j'' \quad (\text{B.5})$$

en donde el valor del potencial solo depende de j , debido a que el potencial es independiente del tiempo.

Ahora bien, para el valor de H_{so} se obtiene similarmente quedando de la siguiente forma:

$$H_{soj} |\psi(x, t)\rangle \rightarrow -i \begin{pmatrix} 0 & \alpha_{Rj} \left(\frac{\phi_{\downarrow(j+1)}'' - \phi_{\downarrow j}''}{\delta y} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\downarrow j}'' \\ \alpha_{Rj} \left(\frac{\phi_{\uparrow(j+1)}'' - \phi_{\uparrow j}''}{\delta y} \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{\alpha_{R(j+1)} - \alpha_{Rj}}{\delta y} \right) \phi_{\uparrow j}'' & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{B.6})$$

En donde el término en paréntesis de la ecuación (B.6) corresponde a la primera derivada y el valor de α_j depende del valor espacial, debido a que su localización esta definida solo en la región del potencial.