

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS



**ESTUDIO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN ÓRBITA EN
SISTEMAS PERIÓDICOS**

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO PROFESIONAL DE

FÍSICO

PRESENTA

LUIS ALBERTO BURGOS ACOSTA

Ensenada, B. C.

Enero de 2006

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE BAJA CALIFORNIA

FACULTAD DE CIENCIAS

**ESTUDIO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN ÓRBITA EN
SISTEMAS PERIÓDICOS**

TESIS PROFESIONAL

QUE PRESENTA

LUIS ALBERTO BURGOS ACOSTA

APROBADO POR:



DR. FRANCISCO MIRELES HIGUERA
Presidente del Jurado



DR. JORGE ALBERTO VILLAVICENCIO AGUILAR
Secretario



DR. ROBERTO ROMO MARTÍNEZ
1er. Vocal

Ensenada B.C.

Enero de 2006

DEDICATORIA

A MIS PADRES

Por Impulsarme a Alcanzar mis Sueños

A VANESSA Y MARLET

Por su Amor y Comprensión en Todo Momento

A LA Sra. QUETA

Por su Cariño e Infinito Apoyo

AGRADECIMIENTOS

Deseo dar mis más sinceros agradecimientos a:

El Dr. Francisco Mireles por haberme brindado su tiempo, paciencia y apoyo en el transcurso de la elaboración de esta tesis, pero sobre todo quiero agradecerle el haberme transmitido su pasión por la investigación científica.

El profesor Jesús Lerma por haberme brindado su amistad, apoyo y paciencia en el transcurso de la carrera.

El Dr. Roberto Vázquez por su ayuda incondicional.

Los profesores Jorge Villavicencio, Roberto Romo, Álvaro Álvarez, Héctor Aceves, Fernando Rojas, David Hiriart, Wencel de la Cruz, Gloria Rubí, Selene Solórzano, Juan Tapia, y Javier Villegas por los valiosos cursos que me impartieron en el transcurso de mi licenciatura.

Es un honor para mí expresar mi gratitud a mis 2 mejores amigos y compañeros (miembros del Megateam) a los cuales quiero y admiro mucho: Ramón Carrillo y Fermín Franco. Gracias por su amistad y apoyo en todo momento.

Quiero dar las gracias a Mónica, Adriana, Laura, Ivonne, Tania, Gerardo, Andrés, Carlos, Yadira, Yuridia y Mariana por haber hecho más agradables y divertidos los días en la facultad.

Finalmente, quiero agradecer a CONACyT por haberme otorgado una beca durante la elaboración de este trabajo gracias al proyecto No. J40521F.

RESUMEN de la tesis de Luis Alberto Burgos Acosta presentada como requisito parcial para la obtención de la Licenciatura en Física. Ensenada, Baja California, México. Diciembre de 2005.

ESTUDIO DEL ACOPLAMIENTO ESPÍN ÓRBITA EN SISTEMAS PERIÓDICOS

Resumen aprobado por:



Dr. Francisco Mireles Higuera
Director de tesis

Resumen. *Espintrónica* es uno de los campos de investigación de frontera en física del estado sólido. Uno de los propósitos fundamentales de la *espintrónica* es el de estudiar maneras novedosas de manipular el grado de libertad del espín de los electrones. En el presente trabajo estudiamos las propiedades espectrales y de transporte de electrones dependientes del espín a través de un alambre cuántico semiconductor. En particular, se estudió el efecto de colocar una serie de placas metálicas localizadas periódicamente en el alambre cuántico en la presencia de una interacción *espín-órbita* (*efecto Rashba*). Las placas metálicas son modeladas a través de una red periódica de potenciales tipo delta de *Dirac*. Consideramos dos casos: (i) red periódica infinita (modelo de *Kronig - Penney*) y (ii) red periódica finita. Para el caso (i) se utiliza un método de transformada de *Fourier* y el teorema de *Bloch* para obtener una forma explícita de la función de onda y la ecuación de dispersión del sistema. Mostramos que la interacción *espín-órbita* produce un rompimiento de la degeneración de espín en las bandas de energía semejante a la esperada en un sistema bidimensional en ausencia de potenciales externos. Asimismo se estudian propiedades de espín relevantes del sistema, tales como la densidad de corriente por espín y la densidad de estados de espín. Tales propiedades arrojan que el acoplamiento *espín-órbita* puede inducir por ejemplo, una acumulación de espín a pesar de no existir una corriente neta de electrones en el alambre. Para el caso (ii) de la red periódica finita, se estudia la probabilidad de transmisión dependiente del espín utilizando el método de la *matriz de transferencia*. Encontramos que la transmisión de los electrones experimenta un corrimiento en energía respecto al caso con ausencia de *efecto Rashba*. Se observa además que la transmisión es idéntica para las dos orientaciones de espín. Calculamos también la conductancia de electrones espín polarizados a través de heteroestructuras ferromagneto/semiconductor/ferromagneto en 1D. Encontramos que los efectos de interferencia cuántica debido a las múltiples reflexiones de los electrones producen oscilaciones no triviales de las conductancias de espín como función del acoplamiento *espín-órbita*. Tales efectos podrían ser explotados para el diseño de posibles dispositivos *espintrónicos*.

ÍNDICE

	Página
I. INTRODUCCIÓN	1
I.1 Introducción al mundo de la espintrónica	1
I.2 Manipulación eléctrica del espín de los electrones	7
I.3 Sistemas periódicos con espines	15
I.4 Objetivo del proyecto de tesis	17
II. ANTECEDENTES: El espín y el acoplamiento espín-órbita	19
II.1 El espín del electrón: Antecedentes históricos	19
II.2 Acoplamiento espín-órbita en átomos	22
II.3 Acoplamiento espín-órbita en semiconductores	24
II.4 Acoplamiento <i>Rashba</i> en alambres cuánticos	29
III. MODELO DE KRONIG-PENNEY CON ACOPLAMIENTO ESPÍN ÓRBITA DE RASHBA	35
III.1 Sistema físico: Alambre cuántico con placas metálicas localizadas periódicamente	35
III.2 Modelo teórico: Generalización del modelo de <i>Kronig-Penney</i> con acoplamiento espín-órbita	37
III.3 Cálculo del espectro de energía I: Método de la transformada de <i>Fourier</i>	40
IV. PROPIEDADES DE ESPÍN DEL SISTEMA INFINITO POTENCIALES DELTA DE DIRAC	45
IV.1 Densidad de estados de espín	45
IV.2 Densidad de corriente por espín	47

V. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS DEL SISTEMA INFINITO	50
VI. TRANSMISIÓN EN UN SISTEMA FINITO	68
V.1 Transmisión dependiente del espín un sistema finito	68
V.2 Conductancia de espín a través de heteroestructuras F/S/F	77
VII. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS DEL SISTEMA FINITO	88
VIII. CONCLUSIONES	95
IX. BIBLIOGRAFIA	98
X. APÉNDICES:	105
Apéndice A: Hamiltoniano para el acoplamiento espín-órbita	105
Apéndice B: Cálculo de la función periódica $U^\sigma(x)$	110
Apéndice C: Cálculo del espectro de energía con el método de condiciones de frontera periódicas	115
Apéndice D: Densidad de corriente por espín	121
Apéndice E: Condición de frontera para las interfases F/S y S/F	123

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. En un metal ordinario, las densidades de estados entre espines arriba y espines bajo están al mismo nivel en energía, mientras que en un metal ferromagnético, las densidades de estados entre espines arriba y espines bajo están corridas en energía. E es la energía electrónica, E_F es la energía de Fermi y $N(E)$ es la densidad de estados. (G. Printz [3]).

Figura 2. Representación esquemática del transporte paralelo al plano de las capas que conforman la estructura tipo “emparedado”, formada por una capa de un metal no magnético entre dos capas de metales ferromagnéticos, orientados en direcciones (a) paralelas y (b) antiparalelas. (G. Printz [3]).

Figura 3. (a) Vista esquemática del transistor de efecto campo de espín propuesto por *Datta-Das* (S. Datta y B. Das, [9]). (b) Direcciones relativas del campo eléctrico, campo “magnético efectivo” y del movimiento de los electrones. (c) Densidad de estados de los ferromagnetos fuente y colector.

Figura 4. Vista esquemática de la cadena de diamantes. Las fronteras son alambres cuánticos con *acoplamiento espín-órbita* (M. Governale *et al* [26]). a_R es la intensidad del *efecto Rashba*, γ_1 y γ_2 son las trayectorias que pueden tomar los electrones.

Figura 5. Vista esquemática del alambre cuántico con intensidad del *acoplamiento espín-órbita* modulada periódicamente. α_1 , l_1 y α_2 , l_2 son las intensidades y longitudes del *acoplamiento espín-órbita* en sus respectivas regiones. (X. F. Wang y P. Vasilopoulos [27]).

Figura 6. Vista esquemática del experimento de *O. Stern – W. Gerlach* (1921), con el que demuestran la cuantización espacial, asociada posteriormente al espín de los electrones.

Figura 7. Potencial de confinamiento del gas de electrones bidimensional (2DEG) en una heteroestructura semiconductor, por ejemplo InAs/InAlAs.

Figura 8. Gráfica esquemática de la relación de dispersión de un gas de electrones bidimensional con *acoplamiento espín-órbita* (Rashba). Se muestra que para una energía de Fermi dada, se tienen dos vectores.

Figura 9. (a) Vista esquemática del dispositivo utilizado para confinar un Q1DEGS. (b) Sección transversal esquemática del dispositivo usado para crear un Q1DEGS. (c) Vista del alambre cuántico cuasi-unidimensional. (F. Mireles y G. Kirczenow [17]).

Figura 10. Dispersión del gas de electrones para la n -ésima subbanda en el Q1DEGS, *línea azul y roja*: con acoplamiento espín órbita, *línea verde*: sin acoplamiento espín órbita.

Figura 11. (a) Vista esquemática del dispositivo propuesto para confinar un Q1DEG, en el cual se tienen placas metálicas localizadas periódicamente. (b) Vista del alambre cuántico cuasi-unidimensional con placas metálicas localizadas periódicamente. (c) Vista esquemática del perfil de potencial formado por las placas metálicas.

Figura 12. Vista esquemática del potencial periódico de potenciales tipo delta de *Dirac* de magnitud λ , con una intensidad α_R uniforme del *acoplamiento espín-órbita* (ASO) entre las deltas de *Dirac*. Se tendrían barreras de potencial para $\lambda > 0$ y pozos de potencial para $\lambda < 0$.

Figura 13. Dispersión para el caso del electrón libre. Parámetros: $\lambda = 0$, $\alpha_R = 0$.

Figura 14. Dispersión para el caso del electrón con acoplamiento espín-órbita. *Línea Azul y Roja*: Electrón con espín arriba, y abajo, respectivamente. *Línea verde*: Electrón libre. Parámetros: $\lambda = 0$, $\alpha_R = 1.5 \pi$.

Figura 15. Dispersión de electrones. *Línea roja*: Dispersión para el caso del electrón en presencia de un potencial periódico. *Línea verde*: Dispersión para el electrón libre. Parámetros: $P = 4$, $\alpha_R = 0$.

Figura 16. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones en presencia de un potencial periódico. Parámetros: $P = 4$, $\alpha_R = 0$.

Figura 17. Representación reducida de las bandas de energía de la dispersión de los electrones en presencia de un potencial periódico de pozos de potencial. Parámetros: $P = -4$, $\alpha_R = 0$.

Figura 18. f_{KP} Vs Energía. Parámetros: $P = 4$, $\alpha_R = 0$. Región sombreada: valores de energía prohibidos.

Figura 19. Desigualdad de *Kronig-Penney* Vs Energía. Línea azul: C_{KP} , Línea roja: R_{KP} . Parámetros: $P = 4$, $\alpha_R = 0$. Región sombreada: valores de energía prohibidos

Figura 20. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P = 4$, $k_R L = \frac{1}{8} \pi$.

Figura 21. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P = 4$, $k_R L = \frac{1}{4} \pi$.

Figura 22. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P = 4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

Figura 23. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P = -4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

Figura 24. Densidad de estados del sistema. *Línea verde:* Densidad de estados para un potencial periódico sin acoplamiento espín órbita. *Línea roja:* Densidad de estados para un potencial periódico con acoplamiento espín órbita. Parámetros: $P = 4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

Figura 25. Acumulación de espín del sistema como función de la Energía. Parámetros: $k_R L = \frac{1}{2} \pi$ y $k_R L = \frac{1}{4} \pi$.

Figura 26. Esquema del sistema periódico finito de n -barreras de potencial tipo delta de Dirac, en presencia de la *interacción espín-órbita* de Rashba (en verde).

Figura 27. Vista esquemática del transistor de espines propuesto por Datta-Das. (Cortesía: F. Mireles).

Figura 28. (a) Vista esquemática del dispositivo utilizado para confinar un Q1DEG, en el cual se tienen placas metálicas localizadas periódicamente y dos contactos ferromagnéticos: ferromagneto fuente (a la izquierda del dispositivo) y ferromagneto colector (en el extremo opuesto del dispositivo). (b) Vista del Q1D alambre cuántico con placas metálicas localizadas periódicamente con dos contactos ferromagnéticos (emisor y colector).

Figura 29. Esquema del Q1D alambre cuántico con contacto ferromagnéticos. En los ferromagnetos $\alpha_R = 0$ y en el semiconductor se tiene un *acoplamiento espín-órbita* uniforme ($\alpha_R \neq 0$).

Figura 30. Diagrama esquemático de las bandas de energía para la unión F/S/F. (a) Caso con orientación de magnetización de los ferromagnetos paralela (P). (b) Caso con orientación de magnetización de los ferromagnetos antiparalela (AP).

Figura 31. Transmisión de los electrones a través de n -barreras de potencial tipo delta de Dirac. (a) caso para $n=1$ (b) caso para $n=2$ (c) caso para $n=4$ (d) caso para $n=8$ (e) caso para $n=16$ (f) caso para $n=32$. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

Figura 32. Logaritmo de la transmisión como función de la energía. Parámetros: $P = 4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$, y $n=30$.

Figura 33. Conductancia dependiente del espín de los electrones a través de una heteroestructura F/S/F como función de la intensidad del acoplamiento espín-órbita. (a) Energía incidente de $E = 28 E_0$ (b) Energía incidente de $E = 120 E_0$, Parámetros: $P = 4$, $k_v^\uparrow L = 4.4$, $k_v^\downarrow L = 10.5$.

Figura 34. Logaritmo natural de la conductancia dependiente del espín a través de una heteroestructura F/S/F como función de la energía. Parámetros: $P=4$, $k_v^\uparrow L=4.4$, $k_v^\downarrow L=10.5$, $k_R L=0.15$, $n=2$.

Figura 35. Logaritmo natural de la conductancia dependiente del espín a través de una heteroestructura F/S/F como función de la energía. Parámetros: $P=4$, $k_v^\uparrow L=4.4$, $k_v^\downarrow L=10.5$, $k_R L=0.15$, $n=10$.

I. INTRODUCCIÓN

I.1 Introducción al mundo de la espintrónica

Hasta el presente (2005) la tecnología del procesamiento de la información y la electrónica ha descansado en dispositivos que mueven en su interior cargas eléctricas para representar unos y ceros, los bloques fundamentales de la lógica binaria. Sin embargo, en los años recientes, con el desarrollo de la nanotecnología, se avanza con sorprendente rapidez en la miniaturización de los dispositivos semiconductores y chips con dimensiones nanométricas ($\leq 100 \text{ nm}$)¹. A éstas pequeñísimas dimensiones los efectos cuánticos y las propiedades ondulatorias dominan el comportamiento de los electrones. Debido a lo anterior se cree tener una oportunidad sin precedente para implementar una clase de dispositivos radicalmente nuevos que explotarían las virtudes y propiedades del mundo cuántico (tal como el espín del electrón) para dar ventajas únicas sobre las tecnologías de información existentes.

En esta dirección, recientemente se ha desarrollado un campo de investigación en la Física del Estado Sólido denominado *espintrónica*. El nombre del área proviene de las palabras espín (momento angular intrínseco) y electrónica. Uno de los propósitos fundamentales de este campo de frontera es el de manipular el grado de libertad del

¹ De acuerdo con el reporte anual presentado en el 2005 por la SIA (Semiconductor Industry Association) el transistor tendrá unas dimensiones de 18 nm para el año 2010 y de 9 nm para el año 2016 [1].

espín de los electrones, además ó en vez de su carga eléctrica. Se espera que al incorporar el grado de libertad del espín en la micro- y nano-electrónica, se agregarían muchas más funciones y capacidades a los dispositivos electrónicos convencionales basados en la carga eléctrica del electrón. De lograrse por completo la generación, control y detección eficiente de corrientes eléctricas espín-polarizadas tendría importantes implicaciones en la industria electrónica, ya que se abriría la posibilidad de una nueva era tecnológica en la cual se podrían diseñar novedosos dispositivos basados enteramente en el espín de los electrones, tales como memorias no volátiles, baterías, diodos y transistores de espín, entre otros; así mismo se preveen importantes implicaciones en el desarrollo de la computación cuántica (S.A. Wolf *et al* [2]). Entre las ventajas que tendrían estos novedosos dispositivos (*espintrónicos*) sobre los dispositivos electrónicos actuales se encuentran: el decrecimiento en el consumo de energía eléctrica, el aumento de la velocidad de procesamiento de datos y el incremento de las densidades de integración de transistores y por ende de información, lo anterior hasta por un orden de magnitud o quizás más, por mencionar sólo algunas.

Mientras que en una corriente eléctrica ordinaria, el espín apunta en una dirección aleatoria y no desempeña ningún papel (por ejemplo, en la determinación de la resistencia de un alambre o en la amplificación de un circuito transistor), en contraste, los dispositivos *espintrónicos* se basan en las diferencias existentes en el transporte de los electrones con espines “arriba” o “abajo”. En un ferromagneto como el hierro o el cobalto, por ejemplo, existe un imbalance entre las poblaciones de electrones con espín

“arriba” y “abajo” a la energía de conducción (energía de Fermi). Cuando pasa corriente a través de un ferromagneto, este imbalance entre las poblaciones de espín tiende a favorecer la conducción de electrones (por el principio de exclusión de *Pauli*²) con una dirección de espín, dando como resultado una corriente polarizada de espines en la que todos los espines de los electrones apuntan en una dirección preferencial. Esto hace de los materiales ferromagnéticos candidatos ideales para generar corrientes de espines polarizados y por lo tanto funcionar como filtros polarizadores de espín.

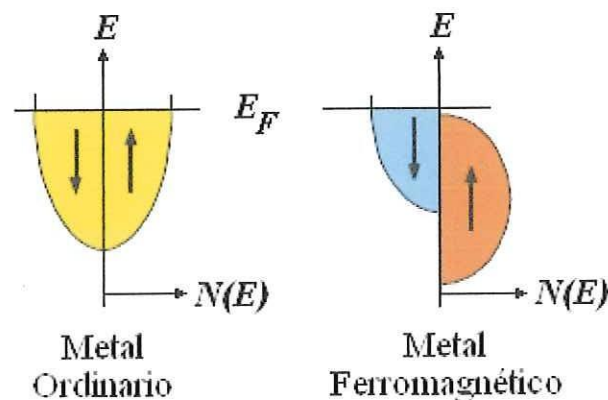


Figura 1. En un metal ordinario, las densidades de estados entre espines arriba y espines bajo están al mismo nivel en energía, mientras que en un metal ferromagnético, las densidades de estados entre espines arriba y espines bajo están corridas en energía. E es la energía electrónica, E_F es la energía de Fermi y $N(E)$ es la densidad de estados. (G. Prinz [3]).

El inicio de la *espintrónica* está ligado al descubrimiento del fenómeno de Magnetoresistencia Gigante (GMR, por sus siglas en inglés). El efecto GMR tiene un origen netamente cuántico y se observa típicamente en estructuras de películas delgadas

² Este principio dicta la imposibilidad de que dos partículas tengan todos los números cuánticos iguales.

compuestas por capas alternadas de materiales ferromagnéticos y no magnéticos. El efecto GMR se presenta cuando una corriente eléctrica se hace pasar a través de una estructura produciéndose un cambio en la resistencia eléctrica si se cambia la dirección de la magnetización de una de las capas ferromagnéticas. Este cambio en la resistencia resulta ser un orden de magnitud mayor a la Magnetoresistencia Ordinaria³ (MR), de ahí su nombre de Magnetoresistencia Gigante. Explícitamente, cuando los momentos magnéticos de las capas ferromagnéticas se encuentran en posiciones paralelas (figura 2(a)), la dispersión dependiente del espín de los electrones es minimizada, y el dispositivo tiene su resistencia mínima ante una corriente a lo largo de la estructura. Cuando los momentos magnéticos de las capas ferromagnéticas se encuentran antiparalelos (figura 2(b)), la dispersión dependiente del espín de los portadores se maximiza debido a las múltiples dispersiones con las interfases y al principio de exclusión de *Pauli*, por lo que el dispositivo tiene su resistencia máxima.

Si se procura que una de las capas sea un material ferromagnético que mantenga fija su orientación magnética ante un campo magnético externo, mientras que la dirección del momento magnético de la otra pueda ser manipulada por dicho campo externo, entonces se puede lograr que pequeños cambios en el campo magnético externo produzcan un sustancial cambio en la señal del GMR, fenómeno que puede utilizarse para construir sensores magnéticos de campos extremadamente pequeños (G. Prinz [3]).

³ El fenómeno de la Magnetoresistencia Ordinaria es un cambio que presenta la resistencia eléctrica de un material conductor al aplicar un campo magnético, debido esencialmente a la fuerza de *Lorentz*.

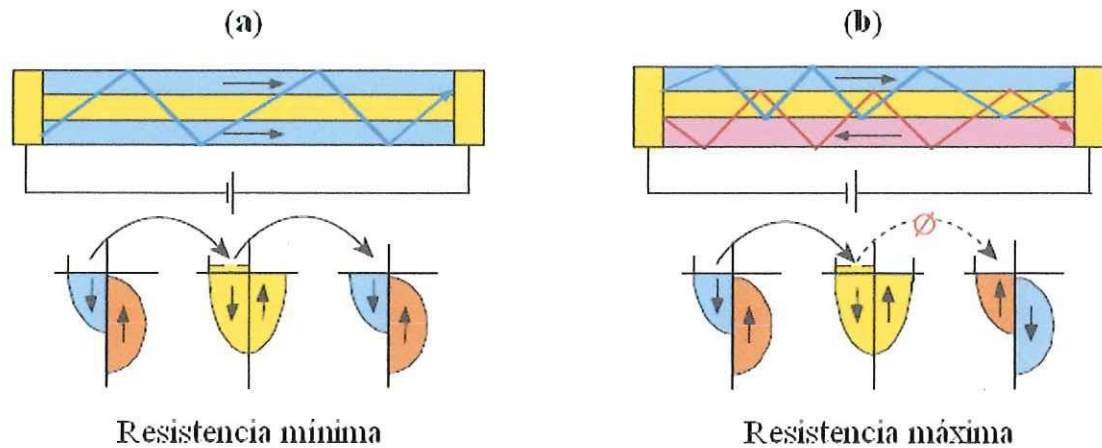


Figura 2. Representación esquemática del transporte paralelo al plano de las capas que conforman la estructura tipo “emparedado”, formada por una capa de un metal no magnético entre dos capas de metales ferromagnéticos, orientados en direcciones (a) paralelas y (b) antiparalelas. (G. Prinz [3]).

El dispositivo *espintrónico* de almacenamiento de información sofisticado más reciente es la Memoria Magnética de Acceso Aleatorio (MRAM, por sus siglas en inglés). Las MRAM conservan su estado aún cuando se desconecte la potencia, pero, a diferencia de las memorias no volátiles actuales, tendrían velocidades de encendido y reescritura que retarían a las RAM convencionales.

En las actuales cabezas de lectura de las computadoras y las MRAM, los elementos fundamentales están hechos de aleaciones metálicas ferromagnéticas; se espera que en los próximos años las corrientes polarizadas del espín fluyan en semiconductores en vez de en metales. Aun cuando los dispositivos *espintrónicos* metálicos proporcionan nuevas formas de almacenar información, la *espintrónica* con semiconductores brinda posibilidades todavía más interesantes, ya que lograr incorporar la *espintrónica* en

semiconductores permitiría utilizar la riqueza de técnicas existentes en la microelectrónica, y también desencadenaría la creación de muchos más tipos de dispositivos que serían posibles gracias a las propiedades optoelectrónicas de los semiconductores, tal como su habilidad para amplificar las señales eléctricas y ópticas.

Se espera que entre los futuros dispositivos *espintrónicos* se encuentren aquellos que puedan manipular los estados cuánticos del espín de los electrones individuales, permitiendo la construcción de compuertas lógicas cuánticas *espintrónicas*. Dando paso al desarrollo y creación de computadoras cuánticas a gran escala, las cuales prometen superar de manera extraordinaria a las computadoras convencionales en todas las áreas. Sin duda, los desarrollos más excitantes en la *espintrónica* serán probablemente en dispositivos que aún no imaginamos (D.D. Awschalom *et al* [4]).

Como consecuencia del potencial e impacto que tendrían los dispositivos *espintrónicos* ha motivado recientemente un gran interés en investigar el rol del espín en diferentes sistemas físicos semiconductores, metálicos y ferromagnéticos.

I.2 Manipulación eléctrica del espín de los electrones

Para la implementación práctica de dispositivos *espintrónicos*, además de generar y detectar efectivamente corrientes de espín polarizadas, es necesario lograr la *manipulación* de los estados de espín de los electrones. En esta dirección, uno de los fenómenos físicos que ha recibido particular atención en *espintrónica* es el denominado *acoplamiento espín-órbita*. Este efecto es de origen relativista, y se presenta como consecuencia del acoplamiento del momento orbital de los electrones con su momento magnético angular intrínseco (el espín) debido a la presencia de un gradiente de potencial eléctrico no uniforme.

Tal potencial eléctrico no uniforme se puede producir artificialmente en la práctica en la interfase de una heteroestructura semiconductor, confinando a los electrones en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, formando así un gas de electrones bidimensionales (2DEG, por sus siglas en inglés). Como veremos mas adelante, el efecto neto del *acoplamiento espín-órbita* puede ser visualizado como un “campo magnético efectivo” que actúa sobre el espín de los electrones confinados en un pozo cuántico, rompiendo la degeneración en el número de onda k de los estados del espín del gas de electrones bidimensional (2DEG)⁴. Lo anterior hace posible explotar el *acoplamiento espín-órbita* para inducir la presesión (manipulación) de los espines de los electrones transmitidos a través del gas de electrones por medios puramente electrostáticos.

⁴ A diferencia del *efecto Zeeman*, que rompe la degeneración en energía.

En 1984, *Y. A. Bychkov* y *E. I. Rashba* (Y. Bychkov y E. I. Rashba [5]) introdujeron un modelo que describe apropiadamente la interacción *espín-órbita* en gases de electrones bidimensionales en semiconductores, por lo que a tal interacción en heteroestructuras semiconductoras (pozos cuánticos) le es popularmente referida como *Efecto Rashba*.

El *efecto Rashba* puede ser modificado experimentalmente aplicando una diferencia de potencial a través de electrodos externos, como fue mostrado por *G. Engels* (G. Engels *et al* [6]) y *J. Nitta* (J. Nitta *et al* [7]), quienes realizaron experimentos sobre el efecto que tiene un campo eléctrico en el desdoblamiento del espín de los electrones en heteroestructuras con compuertas de voltaje. Se ha encontrado que los valores experimentales del parámetro de *Rashba* para materiales III-V tipo *zinc-blenda*⁵ varían desde 0.06 a 0.4 $eV - \text{Å}$, lo cual conduce a una energía de desdoblamiento de espín del orden de 1 a 10 meV a la energía de Fermi.

Un trabajo pionero en *espintrónica* fue el realizado por *Supriyo Datta* y *Biswajit A. Das* en 1990 (S. Datta y B. Das, [9]), en el cual proponen un diseño para un transistor de espín de efecto campo (SFET, por sus siglas en inglés). Cabe señalar que en un FET convencional hay un canal semiconductor estrecho que corre entre dos electrodos llamados fuente y colector. Al aplicar una diferencia de potencial entre la fuente y el colector se hace fluir una corriente eléctrica a través del canal. Esta corriente puede ser

⁵ Ver libro *Introduction to Solid State Physics*, de C. Kittel, página 20 [8].

interrumpida aplicando un voltaje a un electrodo de compuerta localizado sobre el canal, de manera que el campo eléctrico resultante produce que los electrones sean repelidos del canal, volviendo al canal aislante. En contraste, el SFET de *Datta-Das* (Figura 3) tiene una fuente y un colector ferromagnéticos, de modo que la corriente que se inyecta de la fuente y que fluye en el canal tiene espines polarizados. Una heteroestructura semiconductor (por ejemplo, InAlAs/InGaAs) es la que proporciona el canal de transporte para los electrones. Cuando se aplica un voltaje en la compuerta, los espines de los electrones inyectados tienden a presar (debido al *efecto Rashba*) a medida que se mueven en el canal. El colector ferromagnético actúa entonces como filtro de espín rechazando (por el principio de exclusión de *Pauli*) a los electrones con espines no alineados con la orientación de la magnetización del colector, dejando fluir libremente aquellos con la misma polarización que el colector ferromagnético, produciéndose así el efecto transistor (interruptor).

Un SFET tiene varias ventajas sobre un FET convencional, ya que cambiar la orientación del espín del electrón consume menos energía y se haría más rápidamente que sacar a un electrón del canal. Uno también se imaginaria cambiar la orientación de la fuente o el colector con un campo magnético, introduciendo así un tipo adicional de control que no es posible en un FET convencional: compuertas lógicas cuyas funciones se pueden cambiar al instante. Sin embargo, en la práctica resulta complicado incorporar metales ferromagnéticos en dispositivos semiconductores por sus diferencias en estructura electrónica y cristalina, siendo esto un obstáculo fundamental en la inyección

de electrones de un ferromagneto a un semiconductor, como fue mostrado recientemente por *G. Schmidt* y colaboradores (*G. Schmidt, et al* [10]). De tal manera que la opción más viable parecería ser utilizar semiconductores magnéticos en lugar de metales ferromagnéticos para los contactos fuente y colector del transistor.

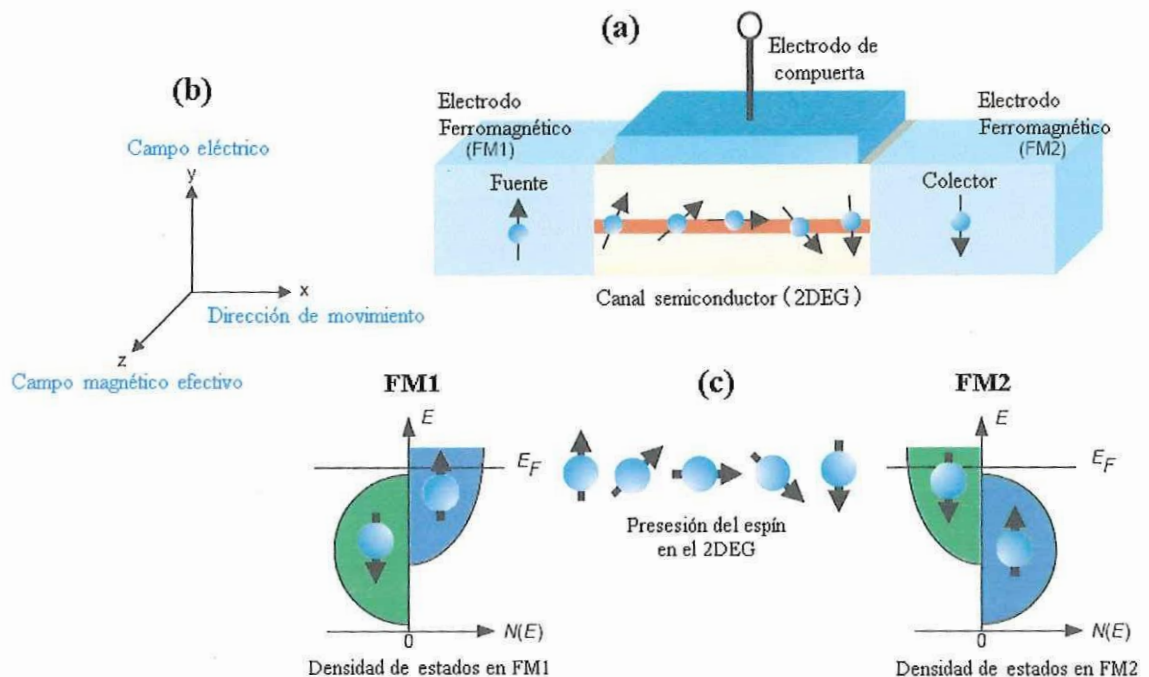


Figura 3. (a) Vista esquemática del transistor de efecto campo de espín propuesto por *Datta-Das* (*S. Datta y B. Das, [9]*). (b) Direcciones relativas del campo eléctrico, campo “magnético efectivo” y de movimiento de los electrones. (c) Densidad de estados de los ferromagnetos fuente y colector.

En esta dirección, *H. Ohno* y colaboradores en 1999 realizaron experimentos ópticos (*H. Ohno, et al* [11]) que indican que es posible inyectar eficientemente electrones con espines polarizados mediante el uso de materiales no convencionales (aleaciones semiconductoras III-V) denominados semiconductores magnéticos diluidos (DMS, por

sus siglas en inglés). Estos materiales incorporan el magnetismo impurificando los cristales semiconductores con átomos magnéticos, por ejemplo, como los del manganeso.

Se cree que algunos semiconductores magnéticos se podrían diseñar de tal manera que proporcionen un componente *espintrónico* llamado ferromagneto válvula. En este dispositivo, un pequeño voltaje cambiaría a un semiconductor entre estados no magnéticos y ferromagnéticos. Un ferromagneto válvula a su vez funcionaría como un filtro de espín. Se piensa que este efecto de filtrado podría amplificarse colocando materiales ferromagnéticos en un diodo túnel resonante. Los diodos túnel resonantes convencionales permiten que las corrientes fluyan a un voltaje específico, aquel para el que los electrones tienen una energía resonante con la estructura. La versión que incorpora ferromagnetos tendría un pozo con diferentes energías resonantes para espines “arriba” y “abajo” (I. Zutic *et al* [12]).

Existen un par de experimentos que han dado gran motivación e ímpetu a la *espintrónica* recientemente, ya que demostraron la factibilidad de obtener una inyección eficiente de electrones con espines polarizados, y que además estos podrían alcanzar largos tiempos de relajación y grandes longitudes de coherencia en la práctica. El primero fue realizado por *J. M. Kikkawa* y sus colaboradores (*J. M. Kikkawa et al* [13]) en 1997, en el cual se utilizó pulsos de luz polarizada circularmente para excitar grupos de electrones hacia estados idénticos de espín, los cuales permanecieron coherentes por

varios cientos de nanosegundos y fueron desplazados por más de $100 \mu\text{m}$ en heteroestructuras semiconductoras de GaAs.

El segundo fue realizado en 1999 independientemente por *R. Fiederling* (R. Fiderling *et al* [14]) y *Y. Ohno* (Y. Ohno *et al* [15]) mostrando experimentalmente una inyección de electrones con espines polarizados con una eficiencia del 90% de un semiconductor magnético a un semiconductor no magnético.

En el aspecto teórico ha habido importantes avances, en 2000 *A. V. Moroz* y *C.H. Barnes* (A. Moroz y C. H. Barnes [16]) realizaron un estudio teórico sobre el efecto de la *interacción espín-órbita* en la conductancia y en la estructura de bandas en sistemas cuasi-unidimensionales (Q1D, por sus siglas en inglés). En dicho estudio encontraron que un cambio drástico en la dependencia en k del espectro, ocurre cuando se considera un *acoplamiento espín-órbita* relativamente grande, dando lugar a picos anómalos en la conductancia en tales sistemas. En el 2001, *F. Mireles* y *G. Kirczenow* (F. Mireles y G. Kirczenow [17]) realizaron cálculos de propiedades de transporte de electrones con espines polarizados en alambres cuasi-unidimensionales en presencia de la interacción espín órbita, desarrollando un método de amarre fuerte que modela apropiadamente el *efecto Rashba*. En su trabajo mostraron que una fuerte *interacción espín-órbita* puede producir cambios dramáticos en la transmisión de electrones con espines polarizados inyectados a alambres cuánticos semiconductores, lo cual podría tener importantes consecuencias para la implementación práctica del SFET.

Después de los pioneros artículos teóricos de *Moroz – Barnes* en 2000 y *Mireles – Kirczenow* en 2001, ha crecido exponencialmente los trabajos teóricos donde se investiga el *acoplamiento espín-órbita* (*Rashba* y *Dresselhaus*⁶), realizados por diferentes grupos de investigación, en una gran variedad de sistemas nano- y mesoscópicos (*e.g.* puntos cuánticos, alambres cuánticos, pozos de potencial, heteroestructuras, etc.). Lo anterior por su gran relevancia y potencial práctico en la manipulación activa del espín de los electrones por medios puramente eléctricos.

Cabe mencionar que otro trabajo teórico de gran importancia en este campo de investigación es el realizado por *J. Schliemann, C. Egues y D. Loss* (*J. Schliemann et al* [18]), en el cual proponen de manera teórica un transistor de efecto campo de espín basado en los dos tipos de *acoplamiento espín-órbita* relevantes en semiconductores, *Rashba* y *Dresselhaus*. En su estudio encontraron que este transistor es robusto ante procesos de dispersión dependientes del espín cuando la intensidad del *efecto Rashba* es igual a la intensidad del *efecto Dresselhaus*, lo que sugiere que al menos en este régimen no es necesario el transporte de forma balística.

Recientemente, han surgido una serie de trabajos teóricos en los cuales se estudia el transporte de electrones a través de sistemas de barreras de potencial en presencia del *acoplamiento espín-órbita* de *Rashba* y *Dresselhaus*. En tales sistemas se considera que

⁶ Es un *acoplamiento espín-órbita* producido por la asimetría de inversión del bulto, en semiconductores el efecto *Dresselhaus* es proporcional al cubo del número de onda (como se verá con más detalle en el siguiente capítulo).

si la incidencia de los electrones no es puramente *normal* a la superficie de las barreras de potencial, entonces es posible generar una corriente de electrones espín polarizada, tal como lo muestran los trabajos de *V. I. Perel* (V. Perel *et al* [19]) y *M. M. Glazov* (M. Glazov *et al* [20]), quienes resolvieron los sistemas en estado estacionario de una barrera y el de doble barrera de potencial con *acoplamiento espín-órbita* de *Dresselhaus*, respectivamente. En este año (2005) *R. Romo y S. Ulloa* (R. Romo y S. Ulloa [21]) realizaron un estudio de la dinámica del tunelaje dependiente del espín de estos sistemas.

Ciertamente el año 2005 ha sido particularmente excitante en *espintrónica*, en particular *J. Wunderlich* (J. Wunderlich *et al* [22]), y de manera independiente, *Y. K. Kato* (Y. K. Kato *et al* [23]) descubrieron de manera experimental *El Efecto Hall de Espín*⁷, cuyo origen se atribuye al *acoplamiento espín-órbita*. Este efecto fue predicho teóricamente por *M. I. Dyakanov* y *V.I. Perel* en 1971 (M.I. Dyakanov y V. I. Perel [24]) y redescubierto por *J. E. Hirsch* (J. E. Hirsch [25]) en 1999. *El efecto Hall de espín* es una de los efectos en *espintrónica* que ha capturado la atención, ya que ofrece la posibilidad de lograr el filtrado y acumulación de espines por medios puramente eléctricos.

⁷ El *efecto Hall* clásico describe que cuando se tiene un flujo de corriente longitudinal en un conductor y al aplicar un campo magnético perpendicular al flujo de la corriente, se crea un campo eléctrico transversal en el conductor. Este campo eléctrico se origina debido a que los electrones experimentan una fuerza en dirección perpendicular a su movimiento, dicha fuerza es la de Lorentz $\mathbf{F} = e\mathbf{E} + e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$, provocando una acumulación de carga transversal en el conductor.

Debido a todos los avances recientes, tanto teóricos como experimentales, la *espintrónica* es en la actualidad una prometedora y excitante área de investigación, tanto en el ámbito científico como en el tecnológico.

I.3 Sistemas periódicos con espines

Muy recientemente, ha surgido un interés de estudiar el efecto que tendría la interacción *espín-órbita* en las propiedades espectrales y transporte balístico de electrones en sistemas periódicos, por ejemplo, *M. Governale* y sus colaboradores (*M. Governale et al* [26]), realizaron un estudio teórico sobre las propiedades espectrales y de transporte de electrones a través de una red periódica cuántica infinita y finita, respectivamente. Tal red consiste de una cadena lineal de cuadrados conectados en uno de sus vértices, llamada cadena de diamantes (Figura 4), con la cual modelan alambres cuánticos con interacción *espín-órbita* de *Rashba*.

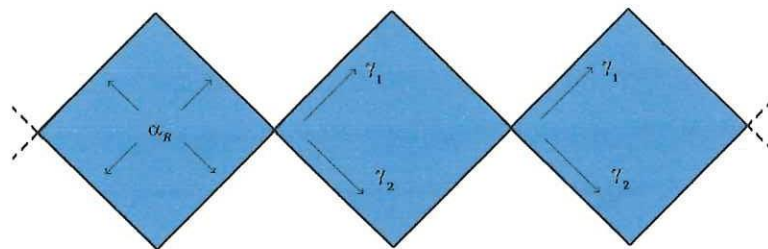


Figura 4. Vista esquemática de la cadena de diamantes. Las fronteras son alambres cuánticos con *acoplamiento espín-órbita* (*M. Governale et al* [26]). α_R es la intensidad del *efecto Rashba*, γ_1 y γ_2 son las trayectorias que pueden tomar los electrones.

En su estudio encontraron que el *efecto Rashba* da origen al fenómeno de localización electrónica similar al producido por un campo magnético. Además, encontraron que el *efecto Rashba* producía un desdoblamiento de los estados de espín en el espectro de energía del sistema.

Otro trabajo interesante en este contexto es el realizado por *X. F. Wang y P. Vasilopoulos* (*X. F. Wang y P. Vasilopoulos [27]*), en el cual se realizó un estudio teórico sobre la transmisión de electrones a través de un alambre cuántico con una *interacción espín-órbita* periódica (Figura 5). En su trabajo mostraron que la transmisión de los electrones como función de la intensidad del *acoplamiento espín-órbita* ó de la longitud de una de las 2 sub-unidades de la celda unitaria exhibe la acción de un transistor de espín. Además observaron que un comportamiento similar (pero no periódico) ocurre en la transmisión de los electrones como la función de la energía incidente.

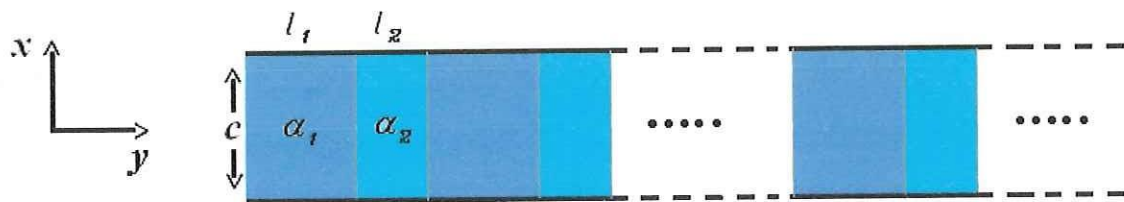


Figura 5. Vista esquemática del alambre cuántico con intensidad del *acoplamiento espín órbita* modulada periódicamente. α_1 , l_1 y α_2 , l_2 son las intensidades y longitudes del acoplamiento espín-órbita en sus respectivas regiones. (*X. F. Wang y P. Vasilopoulos [27]*).

El presente trabajo de tesis va a lo largo de estas líneas de investigación precisamente, a continuación se describirá el objetivo general del proyecto de tesis.

I.4 Objetivo del proyecto de tesis

Como se mostró anteriormente, el estudio del *efecto Rashba* en materiales semiconductores y su influencia en fenómeno de transporte en heteroestructuras es en la actualidad un tópico de creciente interés en *espintrónica*. Esto ha sido fuertemente estimulado con el propósito de establecer este transistor de espines y otros dispositivos *espintrónicos*, además de su potencial en la aplicación a la computación cuántica.

El presente trabajo de tesis esta dedicado al estudio teórico de las propiedades espectrales y de transporte balístico de electrones a través de un sistema periódico de barreras de potencial tipo delta de *Dirac* en presencia de una interacción *espín-órbita* periódica con intensidad uniforme α_R . Este problema corresponde a una generalización para el caso dependiente del espín del modelo estándar de *Kronig – Penney*, vía el *acoplamiento espín-órbita*. Se espera que un estudio sistemático de este modelo arroje información valiosa sobre la física del comportamiento correlacionado del espín y carga electrónica en sistemas periódicos.

El resto de la presente tesis esta dividido de la siguiente manera: en el capítulo II se presentan brevemente algunos antecedentes históricos del espín y del *acoplamiento espín-órbita* tanto en átomos como en semiconductores. Además, se describirá el modelo a utilizar para el acoplamiento espín órbita en alambres cuánticos. En el capítulo III mostramos un sistema físico que podría en principio, implementarse experimentalmente;

y se utilizan el método de transformada de *Fourier* y el teorema de *Bloch* para encontrar de forma explícita la ecuación de dispersión y función de onda del sistema físico modelado. En el capítulo IV se calculan algunas propiedades relevantes del sistema tales como la densidad de estados, y la corriente de probabilidad por espín. En el capítulo V se analizarán y discutirán las propiedades obtenidas para el caso del sistema infinito de potenciales tipo delta de *Dirac*. En el capítulo VI se estudia la transmisión y conductancia dependientes del espín de los electrones a través de un sistema periódico finito de barreras de potencial tipo delta de *Dirac*. En el capítulo VII se analizarán y discutirán los resultados obtenidos para la transmisión y conductancia para el caso del sistema finito, y en capítulo VIII se presentarán las conclusiones de este trabajo. Finalmente, en los Apéndices A, B, C, D, y E se muestran: la deducción del Hamiltoniano del *acoplamiento espín-órbita* a partir de la ecuación de *Dirac* (apéndice A), algunos cálculos relevantes que se realizaron para encontrar la ecuación de dispersión del sistema (apéndice B), deducción de la ecuación de dispersión y la función de onda del sistema infinito de potenciales con un método en el cual se utilizan las condiciones de frontera periódicas (apéndice C), deducción de la ecuación de la densidad de corriente por espín (apéndice D) y, por último se encuentran las condiciones de frontera para las interfases F/S y S/F, respectivamente (apéndice E).

II. ANTECEDENTES:

El espín y el acoplamiento espín-órbita

En este capítulo, por completés y por ser de relevancia para el desarrollo de la tesis se presentará brevemente algunos antecedentes históricos del espín del electrón y del origen del *acoplamiento espín-órbita* tanto en átomos como en semiconductores. Además, se describirá la construcción de los sistemas cuasi-unidimensionales, los cuales se utilizarán para el estudio del transporte de electrones en alambres cuánticos con *acoplamiento espín-órbita*.

II.1 El espín del electrón: Antecedentes históricos

En 1921 *Otto Stern* y *Walter Gerlach* descubrieron experimentalmente la cuantización espacial de los electrones, mostrando la necesidad de introducir un momento magnético intrínseco al electrón (el espín). En su experimento (Figura 6) dirigieron un haz de átomos de plata neutros a través de un conjunto de ranuras de colimación hacia un campo magnético no homogéneo. Una placa fotográfica recogió la configuración del haz después de su paso a través del campo. Suponiendo que el momento magnético dipolar total de un átomo⁸ de plata se debe al electrón de su última capa (Ag^{47}), y por tener este un número impar de electrones, entonces, cada dipolo

⁸ Relacionado con el momento orbital angular L .

magnético de cada átomo de plata estará sujeto a una fuerza neta ($\vec{F} = \nabla(\vec{m} \cdot \vec{B})$) debida a la presencia del campo magnético no homogéneo \vec{B} . De acuerdo la física clásica, todas las orientaciones (de momento magnético, \vec{m}) deben estar presentes en un haz de átomos, lo que daría un trazo grueso sobre la placa fotográfica en lugar de la línea delgada que se forma en la ausencia de cualquier campo magnético. No obstante, *Stern y Gerlach* encontraron que el haz inicial se desdoblaba en dos partes diferentes, demostrando así, la existencia de una contribución adicional al momento angular orbital del átomo (el momento angular intrínseco del electrón), el cual se comportaba como si tuviera solo dos orientaciones discretas de momento magnético (después identificado como el momento angular intrínseco del electrón - el espín) produciendo la cuantización espacial (desdoblamiento del haz, figura 6).

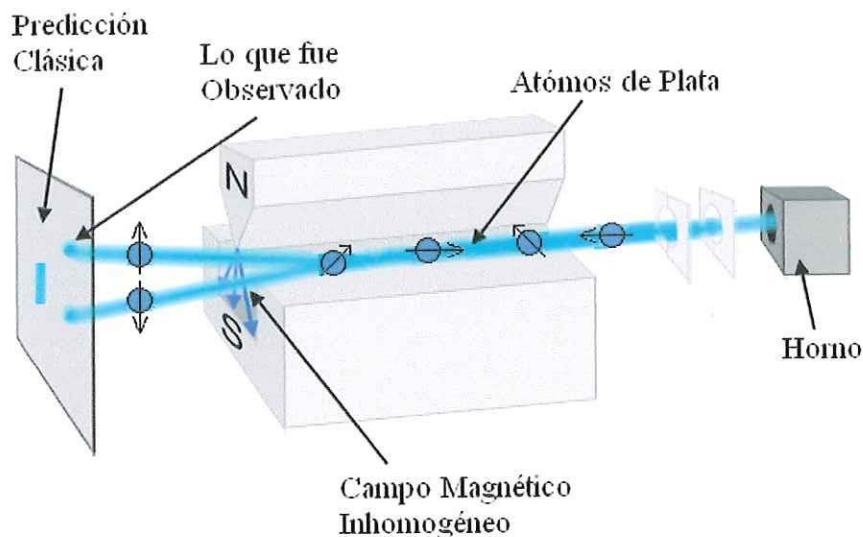


Figura 6. Vista esquemática del experimento de *O. Stern – W. Gerlach* (1921), con el que demuestran la cuantización espacial, asociada posteriormente al espín de los electrones.

Para explicar el experimento de *Stern y Gerlach*, y en un esfuerzo por explicar la *estructura fina*⁹ y el *efecto Zeeman*¹⁰, en 1925 *S.A. Goudsmit y G.E. Uhlenbeck* propusieron que los electrones además de su masa y carga eléctrica, poseen un momento angular intrínseco, independiente de cualquier momento angular orbital que pueda tener. Argumentando que asociado a este momento angular, el electrón posee un cierto momento magnético con únicamente dos posibles orientaciones, $|\uparrow\rangle$ (arriba) y $|\downarrow\rangle$ (abajo), con valores $\frac{\hbar}{2}$ y $-\frac{\hbar}{2}$ respectivamente, siendo $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ con h la constante de *M. Planck*. Lo que *Goudsmit y Uhlenbeck* tenían presente era la imagen clásica de un electrón como una esfera cargada girando sobre su propio eje, por lo que a este momento angular intrínseco se le llamó espín.

Evidentemente, la idea de que los electrones son esferas cargadas que están girando no concuerda con la mecánica cuántica. *P. Dirac*, en 1928, demostró sobre una base teórica de los fenómenos cuánticos en el régimen relativista, que todas las partículas que tienen la carga y masa del electrón deben tener exactamente el momento angular intrínseco y el momento magnético que les atribuyeron *Goudsmit y Uhlenbeck*. Así pues en un marco relativista de la mecánica cuántica, la teoría arroga en forma natural al espín del electrón como un número cuántico adicional.

⁹ Hecho experimental de que algunas líneas espectrales en realidad están formadas por dos o más líneas separadas.

¹⁰ Este efecto consiste en el desdoblamiento de una línea espectral en varias líneas espectrales aplicando un campo magnético.

II.2 Acoplamiento espín-órbita en átomos

La ecuación de *Schrödinger* describe perfectamente el comportamiento de los electrones a escalas microscópicas en el régimen no relativista. Sin embargo, para fenómenos cuánticos en los que se tomen en cuenta los efectos relativistas es necesario aplicar otra ecuación más general. Esta ecuación fue desarrollada por *P. Dirac*, partiendo de argumentos físicos que toman en cuenta la teoría relativista de *A. Einstein*. Sorprendentemente algunas propiedades de los electrones (tales como el espín) emergen de forma natural de su famosa ecuación.

Al describir la dinámica de un electrón en presencia de un potencial eléctrico externo $V(r)$ partiendo de la ecuación de *Dirac* y considerando términos solo hasta el orden $(v/c)^4$ encontramos que emergen de forma natural nuevos términos de interacción que no aparecen al aplicar la ecuación de *Schrödinger* al mismo problema. Uno de estos términos es el conocido como el término del *acoplamiento espín-órbita*, que explícitamente está dado por (Apéndice A):

$$H_{so} = \frac{\hbar}{4m^2c^2} \nabla V(r) \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{p}) \quad (1)$$

Donde m es la masa del electrón libre, c es la velocidad de la luz, $\vec{p} = -i\hbar\nabla$ es el operador del momento, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de espín de *Pauli*,

$V(r)$ es el potencial eléctrico que experimenta la partícula cargada y ∇ se define como el gradiente espacial.

Si se considera el caso en el cual el electrón experimenta un potencial radial de la forma:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r} ,$$

tal como sucede en el átomo de Hidrógeno, se puede mostrar que después de algunas manipulaciones algebraicas la ecuación (1) toma la forma (Apéndice A):

$$H_{so} = \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} , \quad (2)$$

donde $\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$ es el momento magnético intrínseco del electrón y $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{P}$ define el momento angular orbital, por lo que tal expresión es típicamente conocida como el término del *acoplamiento espín-órbita* atómico.

Como veremos más adelante, en sólidos como en materiales semiconductores y en heteroestructuras semiconductoras existe similarmente un *acoplamiento espín-órbita* que influye las propiedades electrónicas de estos sistemas.

II.3 Acoplamiento espín-órbita en semiconductores

En el lenguaje químico, los átomos que forman los sólidos cristalinos como los semiconductores, están unidos a través de enlaces electrónicos. Físicamente, estos enlaces son distribuciones de carga que mantienen juntos a los átomos por que comparten los electrones de su última capa. En cierto tipo de semiconductores existe una asimetría de inversión estructural debida a su estructura cristalina, y esta asimetría genera un gradiente de potencial no uniforme finito, por lo que los electrones al moverse por la red cristalina del semiconductor experimentan un *acoplamiento espín-órbita* (*efecto Dresselhaus*).

Por otro lado, es posible crear artificialmente un gradiente de potencial eléctrico. Este se forma en la interfase de una heteroestructura semiconductor, que confina así a los electrones en dos dimensiones, formando un gas bidimensional de electrones (2DEG). Esto se hace en la práctica por ejemplo, construyendo heteroestructuras semiconductoras dopadas utilizando una técnica de crecimiento tal como la de haces moleculares epitaxiales (MBE, por sus siglas en inglés), en el cual se elige que sólo uno de los materiales que conforman la heteroestructura semiconductor sea afectado con impurezas. Una vez que las impurezas liberan electrones, estos emigran hacia el material intrínseco, cuya energía de banda de conducción esta por debajo de la banda de conducción del material dopado; esto causa un desequilibrio en la carga y crea con ello un campo eléctrico efectivo. Se forma así un pozo de potencial triangular que confina a

los electrones en la dirección de crecimiento de la heteroestructura semiconductor (dirección y en la figura 7), pero manteniéndolos libres en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento (plano $x-z$).

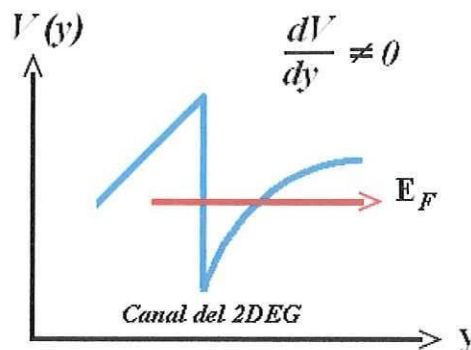


Figura 7. Potencial de confinamiento del gas de electrones bidimensional (2DEG) en una heteroestructura semiconductor, por ejemplo InAs/InAlAs.

El acoplamiento del espín del electrón con su movimiento orbital constituye una de las interacciones de fundamental importancia en 2DEGS, ya que en ausencia de campos magnéticos, es el responsable del rompimiento en la degeneración de las bandas de energía en sistemas bidimensionales para $k \neq 0$. Este acoplamiento es originado debido a la asimetría del potencial de confinamiento que se crea en la interfase de la heteroestructura semiconductor y que contiene al gas de electrones. La dispersión involucra un término lineal en k , como fue introducido por vez primera por *Bychkov* y *Rashba* (Y. Bychkov y E. I. Rashba [5]). El modelo espín órbita (*Rashba*) es descrito por el siguiente Hamiltoniano:

$$H_{so} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{\sigma} \times \vec{p})_y = i\alpha_R \left(\sigma_x \frac{d}{dz} - \sigma_z \frac{d}{dx} \right) \quad (3)$$

Aquí el eje y es perpendicular a el 2DEGS (formado en el plano $x - z$), α_R es el parámetro de la intensidad del acoplamiento espín órbita (parámetro de *Rashba*).

En 1994, *E.A. de Andrada e Silva* y colaboradores (*E.A. de Andrada e Silva et al* [28]), dedujeron una expresión analítica del parámetro de *Rashba* en una heteroestructura semiconductor, en la cual se observa explícitamente la dependencia que tiene el parámetro de *Rashba* (α_R) con el campo eléctrico efectivo en la interfase de la heteroestructura semiconductor, además de otros parámetros físicos relevantes de los materiales semiconductores que conforman el pozo cuántico. Como el parámetro de *Rashba* depende del campo eléctrico efectivo en la interfase de la heteroestructura semiconductor, entonces es posible modular la intensidad de este parámetro por medios puramente electrostáticos (aplicando voltajes de compuerta), como fue mostrado de manera independiente por *G. Engels* (*G. Engels et al* [5]) y *J. Nitta* (*J. Nitta et al* [6]).

Los valores experimentales de α_R para diferentes materiales están en el rango de 6×10^{-12} eV m a 3.0×10^{-11} eV m para densidades electrónicas de $n = 0.7 \times 10^{12}$ cm⁻² a $n = 2 \times 10^{12}$ cm⁻², respectivamente (*G. Engels et al* [5], *J. Nitta et al* [6], *T. Matsuyama et al* [29], *Y. Sato et al* [30]).

Es importante mencionar que el *efecto Rashba* no puede producir una polarización espontánea de espín de los estados electrónicos (*F. Mireles y G. Kirczenow* [17]). Sin embargo, como mencionamos anteriormente, es capaz de inducir un desdoblamiento de

los estados de espín del gas de electrones en ausencia de campos magnéticos (para $k \neq 0$). 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. Esto se hace mas claro notando que el Hamiltoniano total para el 2DEGS tiene la forma:

$$H = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_z^2) + \alpha_R k_x & -\alpha_R k_z \\ -\alpha_R k_z & \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_z^2) - \alpha_R k_x \end{bmatrix}, \quad (4)$$

donde $H = H_0 + H_{SO}$, con $H_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_z^2)$ la parte de la energía cinética electrónica en la ausencia del *efecto Rashba*. Claramente este Hamiltoniano produce dos brechas separadas en la relación de dispersión de los electrones (figura 8), dadas por:

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

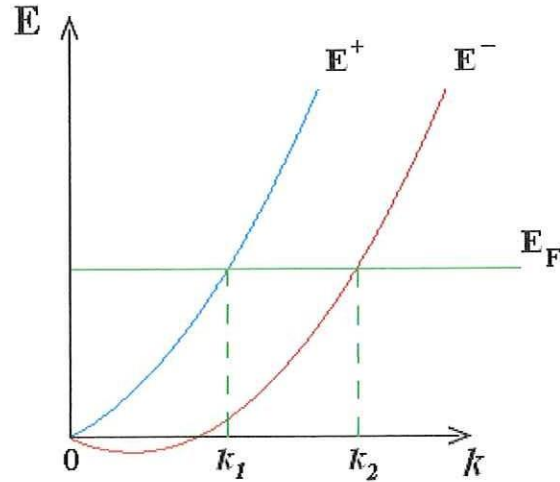


Figura 8. Gráfica esquemática de la relación de dispersión de un gas de electrones bidimensional con *acoplamiento espín-órbita* (Rashba). Se muestra que para una energía de Fermi dada, se tienen dos

vectores de onda k_1 y k_2 para los estados $|+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{|k|+k_x}{k_z} \end{pmatrix}$ y $|-\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{|k|-k_x}{k_z} \end{pmatrix}$, respectivamente.

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

Dado que el parámetro del acoplamiento espín órbita depende del campo eléctrico en la interfase, es posible modular la intensidad de desdoblamiento entre las dos brechas aplicando un voltaje externo.

Cabe mencionar que en semiconductores de estructura cristalina tipo *zinc-blenda*, existe una asimetría de inversión del bulto (3D). *G. Dresselhaus* (G. Dresselhaus [31]) mostró que esta propiedad produce una contribución al desdoblamiento en la bandas de

conducción de los estados de espín inducido por el *acoplamiento espín-órbita*. La magnitud de este desdoblamiento es proporcional al cubo del número de onda de los electrones (k^3) y ha sido investigado ampliamente con el uso de métodos ópticos y de transporte. Este efecto es conocido como *efecto Dresselhaus*. El parámetro de la intensidad del *acoplamiento espín-órbita* de *Dresselhaus*, es intrínseco del material y a diferencia del parámetro del *efecto Rashba* este no puede modificarse experimentalmente. Dependiendo del material semiconductor, la intensidad del *efecto Dresselhaus* es del orden o menor que la del *efecto Rashba* (S.D. Ganichev *et al* [32]).

En el presente trabajo ignoraremos este tipo de interacción (*efecto Dresselhaus*) y nos concentraremos a estudiar el caso del *efecto Rashba* que es el que finalmente es modulable experimentalmente.

II.4 Acoplamiento de Rashba en alambres cuánticos

La primera realización experimental de un sistema quasi-unidimensional de gas de electrones (Q1DEGS) fue hecha por *T.J. Thornton* en 1986 (*T.J. Thornton et al* [33]), a través de confinamiento electrostático de un sistema bidimensional de gases de electrones (2DEGS). Desde entonces, esto ha traído un extenso interés tanto teórico y experimental para entender las propiedades básicas de estos sistemas. El interés de estos sistemas viene de los siguientes dos hechos. Primero, el tamaño transversal efectivo de

un Q1DEGS puede ser fácilmente controlado experimentalmente y tan pequeño, como la longitud de onda de *de Broglie* de los electrones. Esto hace posible fabricar sistemas que tengan un número arbitrario de modos transversales ocupados. Segundo, la alta pureza de los 2DEGS crecida por haces moleculares epitaxiales le permite al electrón moverse a través del Q1DEGS prácticamente sin colisionar, lo cual da lugar al transporte balístico de electrones.

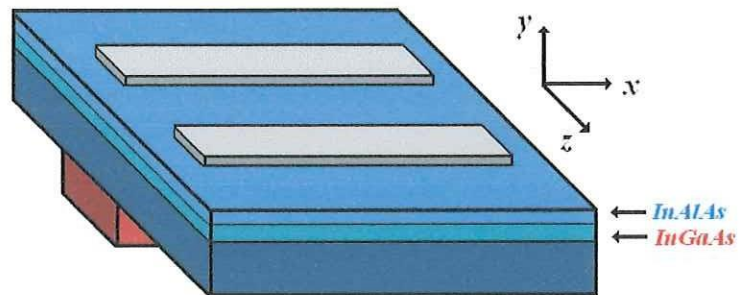
La coexistencia de estos dos factores hace a los Q1DEGS objetos únicos para la investigación de fenómenos de transporte. Recientemente ha incrementado la atención en el estudio del comportamiento de los Q1DEGS en presencia del *acoplamiento espín-órbita de Rashba*.

A continuación se explicará una forma experimental de como se construyen los sistemas cuasi-unidimensionales y se discutirán los efectos que hay en el sistema al tomar en cuenta la interacción *espín-órbita de Rashba*.

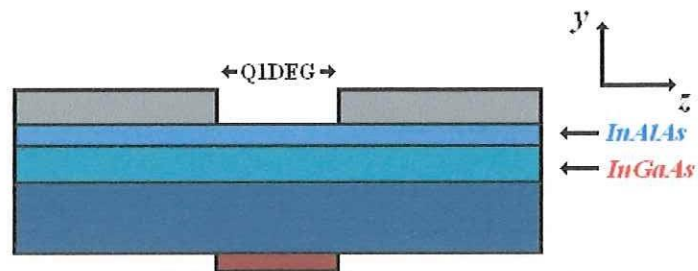
Considere entonces un 2DEG definido en el plano x - z , producido por el confinamiento de un potencial $V(y)$ en una heteroestructura semiconductor. Una vez realizado el confinamiento del gas bidimensional de electrones en este plano, se aplica otro potencial de confinamiento $V(z)$ en la dirección z como se muestra en las figuras 9(a) y 9(b). Al aplicar el potencial $V(z)$ el movimiento de los electrones puede ser cuantizado

en la dirección z , creando así un gas de electrones cuasi-unidimensional (Q1DEG), como se muestra esquemáticamente en la figura 9(c).

(a)



(b)



(c)

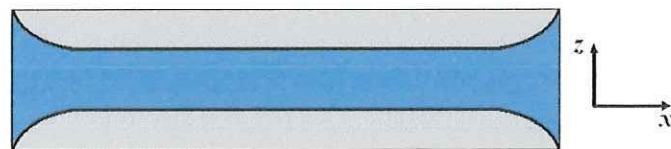


Figura 9. (a) Vista esquemática del dispositivo utilizado para confinar un Q1DEGS. (b) Sección transversal esquemática del dispositivo usado para crear un Q1DEGS. (c) Vista del alambre cuántico cuasi-unidimensional. (F. Mireles y G. Kirczenow [17]).

Si ahora suponemos ahora que el acoplamiento espín órbita es suficientemente débil, entonces su efecto puede ser incorporado como una perturbación al sistema. Para tal caso, el Hamiltoniano no perturbado ($\alpha_R=0$) satisface $H_0|n, k_x, \sigma\rangle = E_n^0|n, k_x, \sigma\rangle$, donde los eigenvalores están dados por $E_n^0 = E_n + \hbar^2 k_x^2 / 2m^*$, con n denotando el subíndice de las sub-bandas discretas provenientes del potencial de confinamiento $V(z)$.

Los eigenestados no perturbados degenerados de espín tienen la forma $\Psi_0 = |n, k_x, \sigma\rangle \rightarrow e^{ik_x x} \Phi_n(z) |\sigma\rangle$, donde $\sigma = \uparrow, \downarrow$ con la definición de los espinores $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, respectivamente. Hay que notar que $\Phi_n(z)$ es la solución de:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right) \Phi_n(z) = E_n \Phi_n(z) \quad (5)$$

Donde se asume que el potencial de confinamiento $V(z)$ es simétrico y suficientemente alto de tal manera que $\Phi_n(z)$ se anula en las fronteras.

Los eigenestados perturbados ($H_{SO} \neq 0$) se pueden expresar como $\Psi = \sum_{n, \sigma} A_n^\sigma \phi_n(z) |\sigma\rangle$. Usando está última en la ecuación $H\Psi = (H_0 + H_{SO})\Psi = E\Psi$, donde $H_{SO} = \alpha_R (\vec{\sigma} \times \vec{k}) \cdot \hat{y}$, el cual puede expresarse como $H_{SO} = H_{SO}^{(x)} + H_{SO}^{(z)}$, se obtiene la expresión:

$$\begin{bmatrix} E_n^0 + \alpha_R k_x - E & 0 \\ 0 & E_n^0 - \alpha_R k_x - E \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_n^\uparrow \\ A_n^\downarrow \end{pmatrix} - \alpha_R \sum_m W_{nm} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_m^\uparrow \\ A_m^\downarrow \end{pmatrix} = 0, \quad (6)$$

donde $W_{nm} = \langle n, \sigma | H_{SO}^{(z)} | m, \sigma' \rangle$ es la contribución al acoplamiento espín-órbita de la parte transversal (dirección z). Pero si el sistema satisface la condición:

$$\left| \frac{(H_{SO})_{nm}^{\sigma\sigma'}}{(E_n^0 - E_m^0)} \right| \ll 1 \quad (\sigma \neq \sigma'), \quad (7)$$

donde $(H_{SO})_{nm}^{\sigma\sigma'} = \langle n, \sigma | H_{SO} | m, \sigma' \rangle$, se puede tomar $W_{nm} \approx 0$. Lo que implica que se desprecian las mezclas entre las sub-bandas de energía, y se considera entonces el transporte de los electrones solo por un canal (modo) en el alambre cuántico.

Por lo tanto, encontramos que para cada canal n ,

$$\begin{bmatrix} E_n^0 + \alpha_R k_x - E & 0 \\ 0 & E_n^0 - \alpha_R k_x - E \end{bmatrix} \begin{pmatrix} A_n^\uparrow \\ A_n^\downarrow \end{pmatrix} = 0, \quad (8)$$

que conduce a los eigenvalores: $E^{\uparrow,\downarrow}(k_x) = E_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} k_x^2 \pm \alpha_R k_x$ (9)

La ecuación (9) muestra que para un Q1DEGS, la interacción *espín-órbita* de *Rashba* introduce un rompimiento de la degeneración de espín para cada sub-banda de estado n .

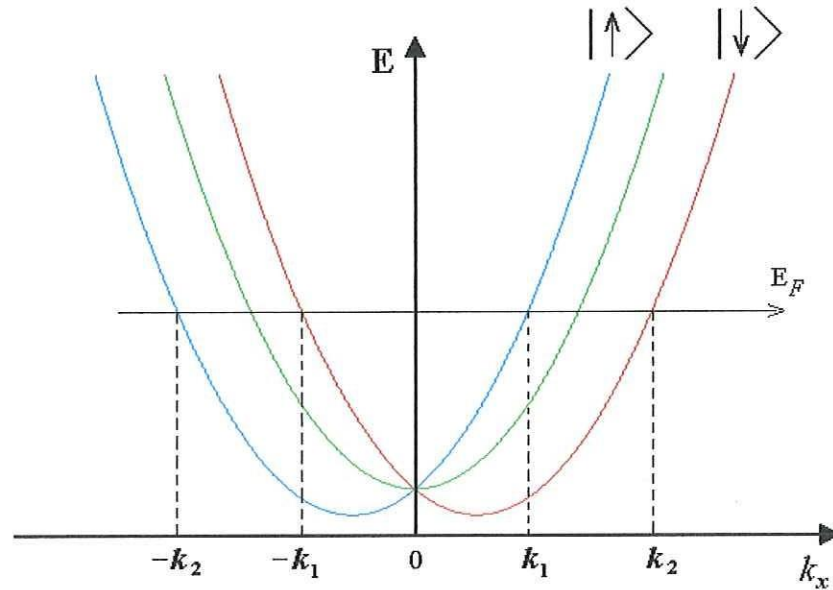


Figura 10. Dispersión del gas de electrones para la n -ésima subbanda en el Q1DEGS, *línea azul y roja*: con acoplamiento espín órbita, *línea verde*: sin acoplamiento espín órbita.

Note que 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, $E^\uparrow(k_1) = E^\downarrow(k_2)$ (ver figura 10), donde k_1 es el vector de onda asociado con la subbanda E^\uparrow con eigenvector $|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, y k_2 representa al vector de onda asociado con la subbanda E^\downarrow con eigenvector $|\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Basándose en el resultado anterior, en el siguiente capítulo se calculará la estructura de las bandas de energía de un alambre cuántico que contiene una serie de placas metálicas localizadas periódicamente, el cual se modelara analíticamente con una red periódica infinita de potenciales tipo delta de *Dirac*.

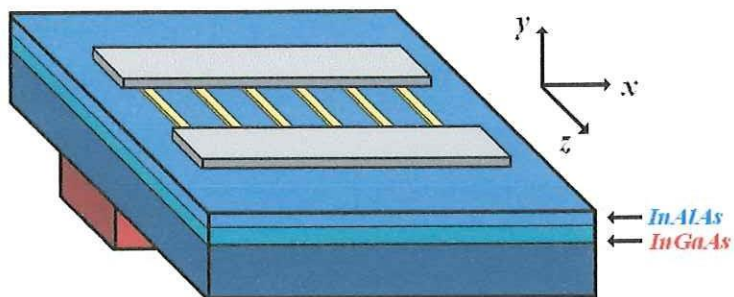
III. MODELO DE KRONIG-PENNEY CON ACOPLAMIENTO ESPÍN-ÓRBITA DE RASHBA

III.1 Sistema Físico: Alambre cuántico con placas metálicas localizadas periódicamente

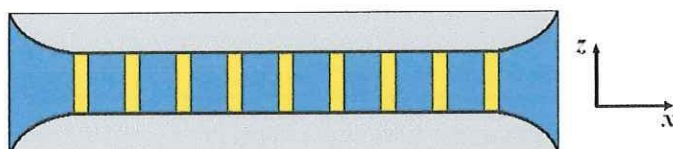
En este trabajo consideraremos un gas de electrones cuasi-unidimensional (Q1DEG), el cual se supone es producido por el confinamiento de un gas de electrones bidimensional (2DEG) en una heteroestructura semiconductor (por ejemplo, InAlAs/InGaAs). En la superficie de la heteroestructura y en dirección de movimiento del gas de electrones se considera que existen placas metálicas localizadas periódicamente, como se muestra esquemáticamente en las figuras 11(a) y 11(b).

Al aplicar una diferencia de potencial a estas placas el gas de electrones experimentará un perfil de potencial periódico a lo largo de la dirección de movimiento, como se muestra esquemáticamente en la figura 11(c):

(a)



(b)



(c)

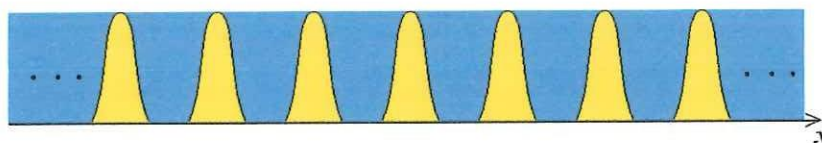


Figura 11. (a) Vista esquemática del dispositivo propuesto para confinar un Q1DEG, en el cual se tienen placas metálicas localizadas periódicamente. (b) Vista del alambre cuántico cuasi-unidimensional con placas metálicas localizadas periódicamente. (c) Vista esquemática del perfil de potencial formado por las placas metálicas.

Si consideramos que el ancho de estas placas metálicas es de alrededor de 10 \AA y que la separación entre estas es de 100 \AA (dimensiones que son factibles experimentalmente), en un alambre cuántico de una longitud $\sim 10 \text{ }\mu\text{m}$, se podrían tener 10^3 placas metálicas. Debido a esto, creemos que se puede modelar apropiadamente este

sistema físico mediante una red periódica infinita de barreras de potencial infinitamente delgadas.

III.2 Modelo teórico: generalización del modelo de *Kronig-Penney* con acoplamiento espín-órbita

En este trabajo modelaremos el perfil de potencial mostrado en la figura 11(c) a través de una red periódica infinita de barreras de potenciales tipo delta de *Dirac* en la dirección x , con una interacción *espín-órbita* uniforme entre las barreras de potencial como se muestra en la figura 12.

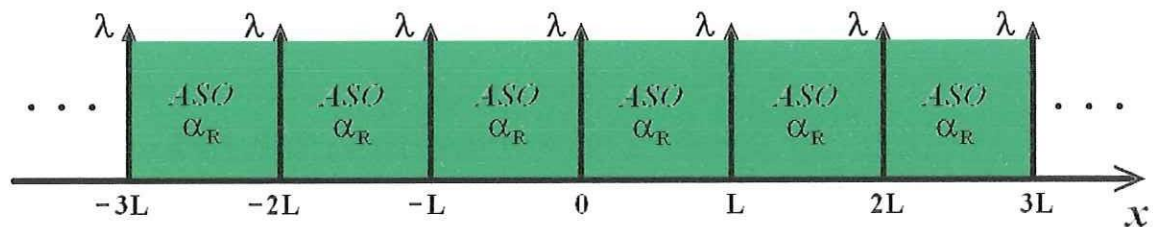


Figura 12. Vista esquemática del potencial periódico de potenciales tipo delta de *Dirac* de magnitud λ , con una intensidad α_R uniforme del *acoplamiento espín-órbita* (ASO) entre las deltas de *Dirac*. Se tendrían barreras de potencial para $\lambda > 0$ y pozos de potencial para $\lambda < 0$.

Cabe mencionar que el modelo estándar *Kronig – Penney* es muy importante en la física del Estado Sólido ya que explica, en una forma relativamente simple, el mecanismo principal del comportamiento de los electrones en potenciales periódicos (*i.e.* en sólidos cristalinos). Este modelo incorpora el teorema de *Bloch* en la forma de la función de onda, y arroja las bandas de energía permitidas y las brechas de energías

prohibidas, las singularidades permitidas en la densidad de estados, y permite también calcular las masas efectivas de electrones y huecos de semiconductores y metales cristalinos. De esta manera el sistema de la figura 12 conforma una generalización dependiente del espín en el que se incorpora el ASO al modelo estándar de *Kronig-Penney*.

En el presente modelo supondremos que los electrones que conforman al gas tienen una masa efectiva m^* y que experimentan una distribución de un potencial $V(x)$ definido como:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda \delta(x - nL), \quad (10)$$

donde λ es la intensidad de los potenciales delta de *Dirac* (con $\lambda > 0$ para barreras y $\lambda < 0$ para pozos) y L es el constante de separación de la red.

El Hamiltoniano total en presencia de los potenciales periódicos tipo delta de *Dirac* y de la interacción *espín-órbita* de *Rashba* se puede expresar como:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) - i\alpha_R (\vec{\sigma} \times \nabla) \cdot \hat{y} \quad (11)$$

Aquí el eje y es perpendicular al 2DEGS, ∇^2 es el operador de *Laplace*, α_R es el parámetro de la intensidad del acoplamiento espín órbita, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ como antes,

denota las matrices de *Pauli* y $V(\vec{r})=V(x)+V(y)+V(z)$ es el potencial que experimenta el gas de electrones.

Dado que el gas de electrones está confinado al plano x - z , y el acoplamiento espín órbita en la dirección z es muy débil, se considerara el transporte del gas de electrones en un sólo canal (modo) del sistema¹¹ (con simetría traslacional en el eje y). Por lo cual la ecuación de *Schrödinger* se reduce a 1D y esta dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}I\frac{d^2}{dx^2}\Psi(x)+\sum_{n=-\infty}^{\infty}\lambda I\delta(x-nL)\Psi(x)-i\alpha_R\sigma_z\frac{d}{dx}\Psi(x)=EI\Psi(x) \quad (12)$$

Donde I es la matriz identidad y $\Psi(x)$ es el espinor definido por $\Psi(x)=[\psi^\uparrow(x),\psi^\downarrow(x)]^T$, donde $\psi^\uparrow(x)$ y $\psi^\downarrow(x)$ son los componentes del espinor *arriba* y *abajo* respectivamente, (T denota la transpuesta) y σ_z es la matriz de *Pauli* definida explícitamente como:

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Note que la ecuación (12) es diagonal, por lo tanto se pueden obtener dos ecuaciones diferenciales independientes para las componentes del espinor $\Psi(x)$, una para el caso con espín “arriba” y otra para el caso de espín “abajo”, esto es:

¹¹ Aquí estaremos despreciando el efecto de la mezcla inter-subbanda.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi^\sigma(x) - \gamma_\sigma i \alpha_R \frac{d}{dx} \psi^\sigma(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda \delta(x-nL) \psi^\sigma(x) = E \psi^\sigma(x), \quad (14)$$

donde

$$\sigma = \uparrow, \downarrow \quad \text{y} \quad \gamma_\sigma = \begin{cases} 1, & \sigma = \uparrow \\ -1, & \sigma = \downarrow \end{cases}, \quad \text{denotan las dos orientaciones del espín.}$$

En la siguiente sección se describe el procedimiento analítico para obtener la función de onda y el espectro de energía de los electrones en el arreglo infinito de potenciales tipo delta de *Dirac* unidimensionales con interacción *espín-órbita* de *Rashba* (*i.e.* para la solución de (14)).

III.3 Cálculo del espectro de energía: Método de transformada de Fourier

Dado que el sistema lo modelamos con una red infinita periódica de potenciales, se puede utilizar el teorema de *Bloch*¹² el cual dicta básicamente que si tenemos un potencial periódico de periodo L , la ecuación de *Schrödinger* es invariante con respecto a cualquier translación que sea múltiplo de este periodo, por lo que la función de onda tiene un conjunto completo de soluciones. Por tanto para cada componente de espín tendremos:

$$\psi_+^\sigma(x) = e^{+iKx} U^\sigma(x), \quad (15)$$

¹² Ver libro *Solid State Physics*, de N. Ashcroft and N. Mermin, página 133 [34].

donde $U^\sigma(x)$ satisface $U^\sigma(x) = U^\sigma(x + nL)$, y K es el número de onda correspondiente al "momento cristalino" $\hbar K$.

Insertando la expresión (15) en la ecuación (14) y después de realizar álgebra elemental encontramos:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*}(\partial_x + iK)^2 U^\sigma(x) + \sum_{n=-\infty}^{\infty} \lambda \delta(x - nL) U^\sigma(x) - \gamma_\sigma \alpha_R (i\partial_x - K) U^\sigma(x) = E U^\sigma(x), \quad (16)$$

donde ∂_x denota la diferenciación respecto de x . Haciendo ahora una expansión de

$U^\sigma(x)$ en términos de ondas planas $\phi(k, x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(ikx)$, se tiene:

$$U^\sigma(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi(k, x) a^\sigma(k) dk \quad (17)$$

Si ahora insertamos (17) en (16) tenemos,

$$\begin{aligned} \frac{2P}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - nL) U^\sigma(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[k_E^2 + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + 2iK \frac{\partial}{\partial x} - K^2 + 2i\gamma_\sigma k_R \frac{\partial}{\partial x} - 2i\gamma_\sigma k_R K \right] a^\sigma(k) e^{ikx} dk \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g^\sigma(k) e^{ikx} dk, \end{aligned}$$

$$\text{con } g^\sigma(k) = \left[k_E^2 - (k + K)^2 - 2\gamma_\sigma k_R (k + K) \right] a^\sigma(k), \quad (18)$$

donde se han definido las constantes: $k_E^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}$, $P = \frac{m^* \lambda L}{\hbar^2}$ y $k_R = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2}$.

Lo anterior conduce a:

$$\frac{2P}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-nL)U^\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} g^\sigma(k)e^{ikx} dk \equiv G^\sigma(x), \quad (19)$$

observe que el lado derecho de la ecuación (19) es simplemente la transformada de *Fourier* de $g(k)$.

Ahora si multiplicamos la ecuación (19) por $\phi^*(k,x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(-ikx)$ e integrando $x \in (-\infty, \infty)$, obtenemos:

$$\frac{2P}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-nL)U^\sigma(x)\phi^*(k,x)dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} G^\sigma(x)e^{-ikx} dx.$$

Utilizando las propiedades de la función delta de *Dirac* y aplicando la transformada inversa de *Fourier* a la función $G(x)$ encontramos que:

$$\frac{2P}{L} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi^*(k,nL)U^\sigma(nL) = g^\sigma(k) = \left[k_E^2 - (k+K)^2 - \gamma_\sigma 2k_R(k+K) \right] a^\sigma(k), \quad (20)$$

que nos permite despejar $a^\sigma(k)$ (de la ecuación (20)), que al sustituirla en (17) se obtiene,

$$U^\sigma(x) = \left(\frac{P}{\pi L} \right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} U^\sigma(nL) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[ik(x-nL)]}{k_0^2 - (k+K_\sigma)^2} dk, \quad (21)$$

con la definición de las constantes: $k_0^2 = k_E^2 + \gamma_\sigma^2 k_R^2$ y $K_\sigma = K + \gamma_\sigma k_R$.

Es posible resolver la integral en (21) por métodos de contorno, de manera que al hacer la suma (Apéndice B), se obtiene explícitamente:

$$U^\sigma(x) = \left(\frac{P}{k_0 L}\right) U^\sigma(0) \exp(-iK_\sigma x) \left[\frac{\exp(iK_\sigma L) \sin(k_0 x) + \sin(k_0(L-x))}{\cos(K_\sigma L) - \cos(k_0 L)} \right] \quad (22)$$

Se puede observar que si tomamos el límite $x \rightarrow 0$, y sustituyendo $K_\sigma = K + \gamma_\sigma k_R$ encontramos la relación de dispersión de tipo “*Kronig – Penney*” que incorpora la *interacción espín-órbita de Rashba*:

$$\cos[(K + \gamma_\sigma k_R)L] = \cos(k_0 L) + \left(\frac{P}{k_0 L}\right) \sin(k_0 L) \quad (23)$$

La expresión anterior dicta que solamente habrá ciertos valores de la energía, K y k_R para los cuales se satisfaga la igualdad para cada estado de espín σ , lo cual dará origen a que existan valores de energías permitidos y valores para las energías que estarán prohibidos, como se discutirá en detalle mas adelante. Note que cuando $k_R = 0$ ($\alpha_R = 0$), que implica $k_0 = k_E$, la ecuación (23) se reduce a la relación de dispersión estándar del modelo de *Kronig-Penney*.

Note que usando las ecuaciones (22) y (23) en (15) nos permite encontrar la función de onda del sistema:

$$\psi_+^\sigma(x) = \psi_+^\sigma(0) \left[\frac{\exp[iKL + i\gamma_\sigma k_R(L-x)] \sin(k_0 x) + \exp[-i\gamma_\sigma k_R x] \sin(k_0(L-x))}{\sin(k_0 L)} \right], \quad (24)$$

donde $\psi_+^\sigma(0)$ es la constante de normalización. Por otro lado, la ecuación: $\psi_-^\sigma(x) = e^{-iKx} U^\sigma(x)$ es también un conjunto completo de soluciones de la ecuación de onda, por lo que podemos escribir la función de onda total del sistema como una combinación lineal de estas dos soluciones, esto es;

$$\psi^\sigma(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_+^\sigma(x) + \psi_-^\sigma(x)], \quad (25)$$

En general, la función de onda del sistema estará dada por:

$$\psi^\sigma(x) = \psi^\sigma(0) \left[\frac{\exp[i\gamma_\sigma k_R(L-x)] \sin(k_0 x) \cos(KL) + \exp[-i\gamma_\sigma k_R x] \sin(k_0(L-x))}{\sin(k_0 L)} \right], \quad (26)$$

$$\text{donde } \psi^\sigma(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_+^\sigma(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi_-^\sigma(0).$$

Note que la función de onda satisface: $\psi^\sigma = (\psi^{-\sigma})^*$.

Las ecuaciones (23) y (24) son idénticas a las encontradas por otro método en el cual se utilizan condiciones de frontera periódicas llamadas condiciones de *Born-Von Karman* (Apéndice C).

IV. ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE ESPÍN DEL SISTEMA INFINITO DE POTENCIALES DELTA

IV. 1 Densidad de estados de espín

De la definición general (unidimensional) de la densidad de estados,¹³ podemos escribir la densidad de estados por espín para nuestro sistema periódico con *acoplamiento espín-órbita* como:

$$n^\sigma(E) = \frac{1}{\pi} \frac{dK_\sigma}{dE} \quad (27)$$

Note que la densidad de estados total es $n(E) = n^\uparrow(E) + n^\downarrow(E)$.

Por otro lado, de la ecuación (23) del capítulo anterior se observa que K_σ y E están relacionadas explícitamente por:

$$K_\sigma = \frac{1}{L} \cos^{-1} \left[\cos(k_0 L) + \frac{P}{k_0 L} \sin(k_0 L) \right] \quad \text{donde} \quad k_0 = \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2} + k_R^2}$$

¹³ La densidad de estado en una dimensión tomando en cuenta la degeneración de espín está dada por $n(E) = \frac{2}{\pi} \frac{dK}{dE}$. Ver libro *The physics of low dimensional semiconductors*, de J. H. Davies, pag. 22 [36].

Y como $\frac{dK_\sigma}{dE} = \frac{dK_\sigma}{dk_0} \frac{dk_0}{dE}$, después de hacer álgebra elemental, se obtiene el siguiente

resultado para la densidad de estados de espín del sistema:

$$n^\sigma(E) = \frac{\left[P \left(\frac{\text{sen}(k_0 L)}{(k_0 L)^2} - \frac{\text{cos}(k_0 L)}{k_0 L} \right) + \text{sen}(k_0 L) \right]}{\pi \frac{\hbar^2 k_0}{2m^*} \left[1 - \left(\frac{P}{k_0 L} \text{sen}(k_0 L) + \text{cos}(k_0 L) \right)^2 \right]^{1/2}} \quad (28)$$

En la expresión (28) se muestra la dependencia no trivial que tiene la densidad de estados con la energía. Además se observa que $n^\uparrow(E) = n^\downarrow(E)$, ya que la dependencia en la orientación de espín se anula idénticamente. Sin embargo, cabe mencionar que el efecto del *acoplamiento espín-órbita* en la densidad de estados esta implícita en las k_0 $\left(= \sqrt{\frac{2m^* E}{\hbar^2} + k_R^2} \right)$, por lo que no es difícil ver que el *acoplamiento espín-órbita* causará un corrimiento en energía en la densidad de estados de espín con respecto a la densidad de estados en ausencia del *acoplamiento espín-órbita*. Este corrimiento lo discutiremos más en detalle en el capítulo V.

Note que cuando $k_R = 0$, $n^\sigma(E) \rightarrow \frac{1}{2} n(E)$, donde $n(E)$ es la densidad de estados para el modelo estándar de *Kronig-Penney* (J. C. Wolfe [37]).

IV. 2 Densidad de corriente de probabilidad por espín

Partiendo de la ecuación de continuidad unidimensional (con $\rho = e|\Psi|^2$), y utilizando un Hamiltoniano que toma en cuenta la interacción *espín-órbita*, es posible encontrar una ecuación explícita para la densidad corriente de probabilidad por espín para sistemas unidimensionales con *acoplamiento espín-órbita* de *Rashba* (Apéndice D). La densidad de corriente de probabilidad de espín (F. Mireles y G. Kirczenow [38]) es dada explícitamente por:

$$J(x) = \frac{e\hbar}{2mi} \left(\Psi^\dagger(x) \frac{d\Psi(x)}{dx} - \frac{d\Psi^\dagger(x)}{dx} \Psi(x) \right) + \frac{e\alpha_R}{\hbar} (\Psi^\dagger(x) \sigma_z \Psi(x)) \quad (29)$$

Donde $J(x) = [j^\uparrow(x), j^\downarrow(x)]^T$. Al sustituir $\Psi(x) = [\psi^\uparrow(x), \psi^\downarrow(x)]^T$ se tiene que las componentes de la corriente de probabilidad de espín se puede expresar como:

$$j^\sigma(x) = \frac{e\hbar}{2im^*} \left((\psi^\sigma(x))^* \frac{d\psi^\sigma(x)}{dx} - \frac{d(\psi^\sigma(x))^*}{dx} \psi^\sigma(x) \right) + \gamma_\sigma \frac{e\alpha_R}{\hbar} |\psi^\sigma(x)|^2 \quad (30)$$

Esta ecuación a su vez se pueden expresar como:

$$j^\sigma(x) = j_e^\sigma(x) + \gamma_\sigma j_{so}^\sigma(x) \quad (31)$$

Donde j_e^σ es la contribución de la corriente electrónica y j_{so}^σ es la contribución a la corriente de espín originada por el *acoplamiento espín-órbita*. Se define la corriente total del sistema como:

$$j_T = j^\uparrow + j^\downarrow \quad (32)$$

Sustituyendo la expresión de la función de onda (ecuación (26)) en la ecuación (30) y realizando manipulaciones algebraicas se obtiene que la expresión de la densidad de corriente por espín del sistema está dada por:

$$j^\sigma = \chi_0^2 \frac{e\hbar}{m^* L} (k_0 L) \sin(k_0 L) \cos(KL) \sin(\gamma_\sigma k_R L), \quad (33)$$

donde $\chi_0^2 = \frac{|\psi^\sigma(0)|^2}{\sin^2(k_0 L)}$, siendo χ_0 la normalización de la función de onda, tal que:

$$\chi_0^2 = \frac{1}{L} \frac{1}{[2 \cos(KL) \cos(k_R L)] [\text{sinc}(k_0 L) - \cos(k_0 L)] + [1 + \cos^2(KL)] [1 - \text{sinc}(2k_0 L)]}$$

Note que si sustituimos la expresión (33) en (32) se encuentra que $j_T = 0$, resultado físicamente consistente pues en el sistema (red infinita de barreras/pozos de potencial) no hay inyección neta de electrones.

Ahora calcularemos la acumulación de espín en el sistema (M. Governale y U. Zülicke [39]), la cual se define como:

$$\Delta j = j^{\uparrow} - j^{\downarrow} \quad (34)$$

Al sustituir la ecuación (33) en (34) se obtiene:

$$\Delta j = 2\chi_0^2 \frac{e\hbar}{m^*L} (k_0L) \sin(k_0L) \cos(KL) \sin(k_RL) \quad (35)$$

Lo cual indica que aunque la corriente total del sistema es cero, existe una acumulación de espín finita en el sistema modulada armónicamente. Note que si $k_R = 0 \Rightarrow \Delta j = 0$, esto es, no existe acumulación de espín en ausencia del *acoplamiento espín-órbita*. En el capítulo V se mostrarán algunos resultados numéricos mostrando tales efectos.

V. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS PARA EL SISTEMA INFINITO

A continuación analizaremos los resultados teóricos obtenidos en los capítulos III y IV de este trabajo. Primero analizaremos el origen de las energías prohibidas para los electrones en una red periódica de potenciales tipo delta de *Dirac* en ausencia del acoplamiento espín-órbita, mostrando dos formas distintas para determinarlas (una gráfica y otra analítica). Después analizaremos la dispersión de los electrones en la red periódica de potenciales tipo delta de *Dirac* en presencia del *acoplamiento espín-órbita*. Se analizará también la densidad de estados por espín, y la acumulación de espín del sistema.

Antes de empezar a discutir las propiedades físicas encontradas en este trabajo, en la tabla I, presentamos los parámetros utilizados para las siguientes gráficas, en la cual se fija una longitud y masa efectiva de $L = 100 \text{ \AA}$ y $m^* = 0.07m_e$, donde m^* es la masa efectiva de los electrones en GaAs, y m_e es la masa del electrón en reposo.

MAGNITUDES	
$\lambda = 4.3 \text{ eV-Å}$	$\longrightarrow P = 4$
$\alpha_R = 0.4 \text{ eV-Å}$	$\longrightarrow k_R L = \frac{\pi}{8}$
$\alpha_R = 0.8 \text{ eV-Å}$	$\longrightarrow k_R L = \frac{\pi}{4}$
$\alpha_R = 1.6 \text{ eV-Å}$	$\longrightarrow k_R L = \frac{\pi}{2}$

Tabla I. Valores correspondientes a las magnitudes utilizadas.

Antes de discutir el caso de los electrones una red periódica de potenciales tipo delta de Dirac ($\lambda \neq 0$), analizaremos el caso $\lambda = 0$, esto es sin potenciales tipo deltas de Dirac.

En las figuras 13 y 14 se muestran la dispersión de un gas cuasi-unidimensional de electrones en ausencia ($\alpha_R = 0$) y en presencia ($\alpha_R \neq 0$) del *acoplamiento espín-órbita*.

Los eigenvalores de las energías para los Hamiltonianos $H = H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2}$ y

$H = H_0 + H_{SO}^{(x)} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} - i\gamma_\sigma \alpha_R \frac{d}{dx}$ están dados explícitamente por:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (\alpha_R = 0) \quad \text{y} \quad E^\sigma = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma_\sigma \alpha_R k \quad (\alpha_R \neq 0)$$

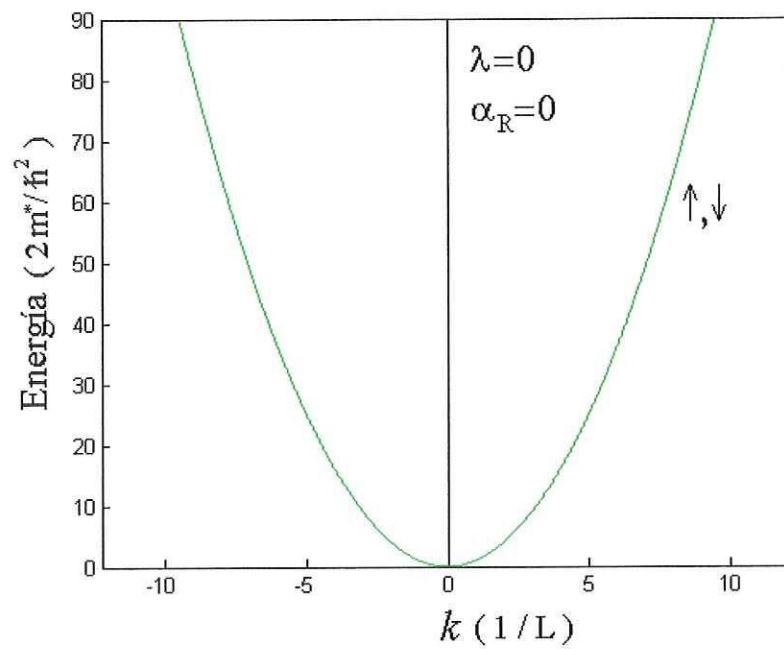


Figura 13. Dispersión para el caso del electrón libre. Parámetros: $\lambda=0$, $\alpha_R=0$.

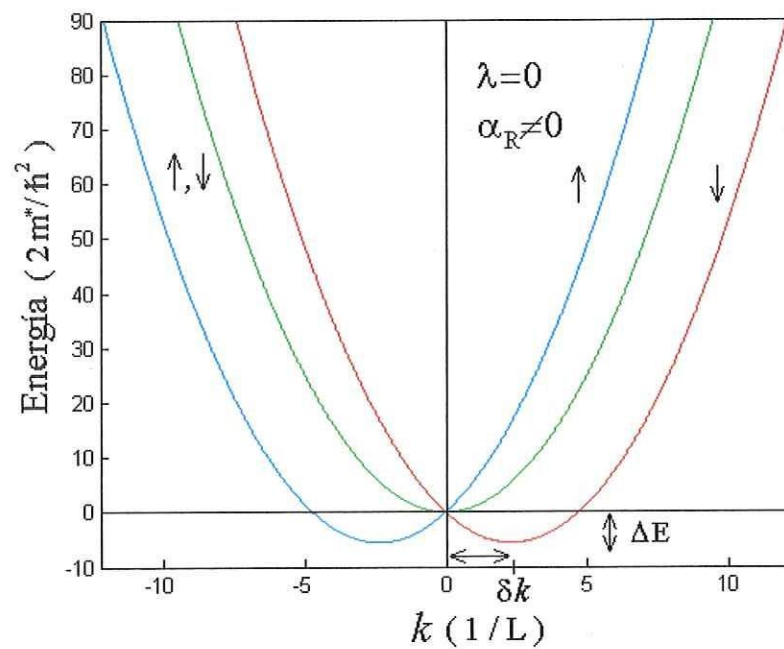


Figura 14. Dispersión para el caso del electrón con acoplamiento espín-órbita.

Línea Azul y Roja: Electrón con espín arriba, y abajo, respectivamente

Línea verde: Electrón libre. Parámetros: $\lambda=0$, $\alpha_R=1.5\pi$.

De estas dos gráficas se observa que el *efecto Rashba* produce un desdoblamiento δk en las bandas de energía, así como también un corrimiento en energía ΔE .

De la ecuación de dispersión para el gas de electrones en ausencia del acoplamiento espín-órbita, es fácil ver que el mínimo de energía se encuentra localizado en $k = 0$, con un valor de $E_{\min} = 0$ (figura 13).

Ahora para la encontrar el valor del desdoblamiento de las bandas de energía y la localización de los mínimos de energía para el gas de electrones en presencia del *acoplamiento espín-órbita*, hacemos,

$$\frac{dE}{dk} = \frac{\hbar^2}{m} k \pm \alpha = 0 \quad \Rightarrow \quad k = \mp \frac{m\alpha_R}{\hbar^2}$$

Por lo que la magnitud del desdoblamiento de las bandas de energía es:

$$\boxed{\delta k = \frac{m\alpha_R}{\hbar^2}} \quad (36)$$

Y los mínimos de la energía se encuentran localizados en $k = \mp \frac{m\alpha_R}{\hbar^2}$ (figura 14). Al sustituir este valor en la ecuación de dispersión se encuentra que el corrimiento en la energía tiene la magnitud:

$$\boxed{\Delta E = \frac{1}{2} \frac{m\alpha_R^2}{\hbar^2}} \quad (37)$$

En las siguientes figuras mostraremos ahora el efecto que provoca un potencial periódico ($\lambda \neq 0$) en la estructura de la dispersión de los electrones (sin tomar en cuenta el acoplamiento espín-órbita). En la figura 15 se observa la dispersión para las primeras tres bandas de energía de los electrones en la red periódica de potenciales (línea roja) y la dispersión de los electrones para el caso el libre (línea verde). Esta figura muestra que en el sistema periódico los electrones solamente pueden tener ciertas energías, a diferencia del caso libre en el cual todas las energías son permitidas. Esta limitación en las energías de los electrones en la red periódica se debe a que estos deben de cumplir la condición de difracción de *Bragg* en 1D.

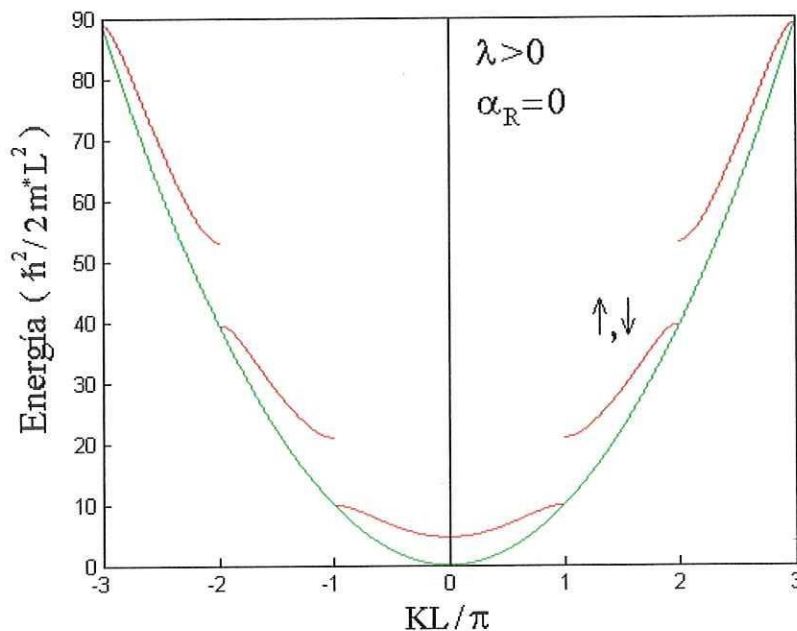


Figura 15. Dispersión de electrones. *Línea roja:* Dispersión para el caso del electrón en presencia de un potencial periódico. *Línea verde:* Dispersión para el electrón libre. Parámetros: $P=4$, $\alpha_R=0$.

En la figura 16 se muestra la representación reducida (primera zona de *Brillouin*) de la dispersión de los electrones en la red periódica de barreras de potencial ($\lambda > 0$) para las primeras tres bandas de energía. Así mismo, en la figura 17 mostramos la representación reducida de la dispersión de los electrones en una red periódica de pozos de potencial ($\lambda < 0$).

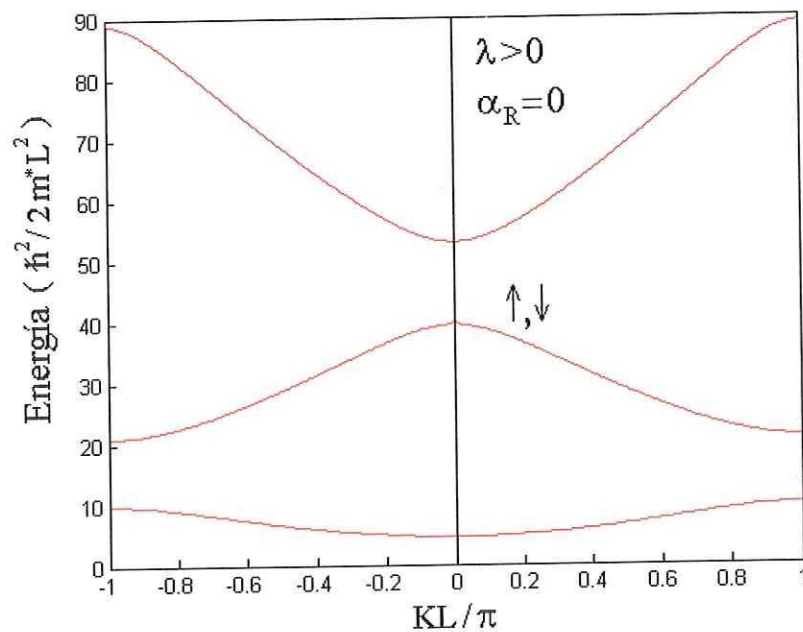


Figura 16. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones en presencia de un potencial periódico. Parámetros: $P=4$, $\alpha_R=0$.

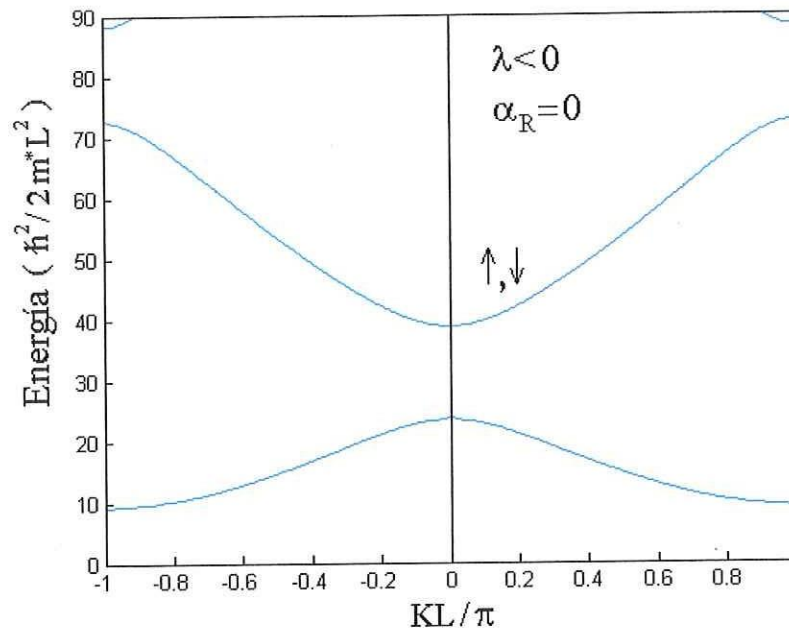


Figura 17. Representación reducida de las bandas de energía de la dispersión de los electrones en presencia de un potencial periódico de pozos de potencial. Parámetros: $P=-4$, $\alpha_R=0$.

Como se mencionó anteriormente, los electrones en la red periódica de barreras de potencial ($\lambda > 0$) solamente podrán tener ciertas energías permitidas, las cuales estarán determinadas por la ecuación de dispersión del sistema (modelo estándar de *Kronig-Penney*, en el cual $\alpha_R = 0$). Esta ecuación es dada explícitamente por:

$$\cos(KL) = \cos(k_E L) + \frac{P}{k_E L} \sin(k_E L) \quad (38)$$

En la figura 16 se observa que el mínimo de energía para la primera banda de energía se encuentra localizado en $KL=0$. Expandiendo en series de potencias las funciones seno y coseno de la ecuación (38),

$$\cos(k_E L) = 1 - \frac{1}{2!}(k_E L)^2 + \frac{1}{4!}(k_E L)^4 - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (k_E L)^{2n}}{2n!},$$

$$\text{sen}(k_E L) = (k_E L) - \frac{1}{3!}(k_E L)^3 + \frac{1}{5!}(k_E L)^5 - \dots = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (k_E L)^{2n+1}}{(2n+1)!},$$

y tomando una aproximación a segundo orden, obtenemos de (38):

$$\left(1 - \frac{1}{2!}(k_E L)^2\right) + \frac{P}{k_E L} \left((k_E L) - \frac{1}{3!}(k_E L)^3\right) = 1 \quad (39)$$

Realizando el álgebra correspondiente y tomando en cuenta que $k_E^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}$

encontramos que el mínimo de la energía para la primera banda es de:

$$\boxed{E_{\min} = \frac{3\hbar^2 P}{m^* L^2 (P+3)}}, \quad (P > 0) \quad (40)$$

Por otro lado, se sabe que $\cos(KL)$ solamente puede tomar valores en el intervalo $[-1,1]$, por lo cual existirán solamente ciertos valores de energía para los cuales este rango no se exceda. Y los valores de energía para los cuales no se cumpla este rango estarán prohibidos para los electrones en la red periódica.

Una forma de determinar la localización de estas energías permitidas es la siguiente:

se define y gráfica la función $f_{KP} = \cos(k_E L) + \frac{P}{k_E L} \text{sen}(k_E L)$ y se acota al intervalo

$[-1,1]$, como se muestra en la figura 18. Los intervalos en los cuales la función f_{KP} excede este intervalo serán las energías prohibidas en el sistema.

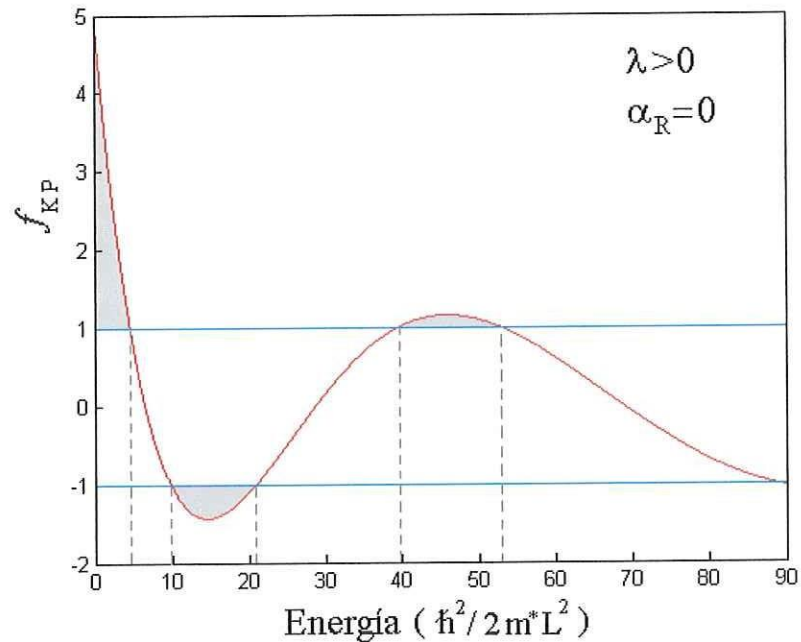


Figura 18. f_{KP} Vs Energía. Parámetros: $P=4$, $\alpha_R=0$.

Región sombreada: valores de energía prohibidos

Los valores de las energías prohibidas se pueden encontrar con un tratamiento más riguroso. Como veremos más adelante se puede encontrar una desigualdad que muestra las condiciones para la existencia o ausencia de las energías permitidas de los electrones en la red periódica de potenciales.

El procedimiento es como sigue:

Dado que $|\cos(KL)| \leq 1$, entonces de la ecuación (38), los valores de las bandas de energías permitidas están dados por:

$$\left| \cos(k_E L) + \frac{P}{k_E L} \sin(k_E L) \right| \leq 1 \quad (41)$$

Tomando $\operatorname{tg}(\theta) = \frac{P}{k_E L}$, y multiplicando por $\cos(\theta)$ se obtiene la expresión:

$$|\cos(\theta) \cos(k_E L) + \sin(\theta) \sin(k_E L)| \leq \cos(\theta), \quad (42)$$

que al utilizar identidades trigonométricas se reduce a;

$$|\cos(k_E L - \theta)| \leq \cos(\theta).$$

Por otro lado, tomando la igualdad: $\operatorname{tg}(\theta) = \frac{P}{k_E L} = \beta$.

Se tiene que $\sin(\theta) = \beta \cos(\theta)$ y $\sin^2(\theta) = \beta^2 \cos^2(\theta)$.

De aquí encontramos que: $1 - \cos^2(\theta) = \beta^2 \cos^2(\theta)$, que conduce a:

$$\cos(\theta) = \frac{1}{\sqrt{1 + \beta^2}},$$

Por lo que la desigualdad (61) se puede escribir como:

$$|\cos(k_E L - \theta)| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + \beta^2}} \Rightarrow \left| \cos \left[k_E L - \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{P}{k_E L} \right) \right] \right| \leq \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{P}{k_E L} \right)^2}} \quad (43)$$

Así pues, los valores de las energías que satisfagan la desigualdad (43) serán las energías permitidas que podrán tener los electrones en el sistema periódico de potenciales tipo delta de *Dirac*.

$$\text{Ahora, si definimos las funciones: } C_{KP} = \left| \cos \left[kL - \operatorname{tg}^{-1} \left(\frac{P}{kL} \right) \right] \right| \text{ y } R_{KP} = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{P}{k_E L} \right)^2}},$$

y se grafican como función de la energía se mostraran las regiones en las cuales se encuentran las energías permitidas del los electrones en el sistema periódico de potenciales (figura 19).

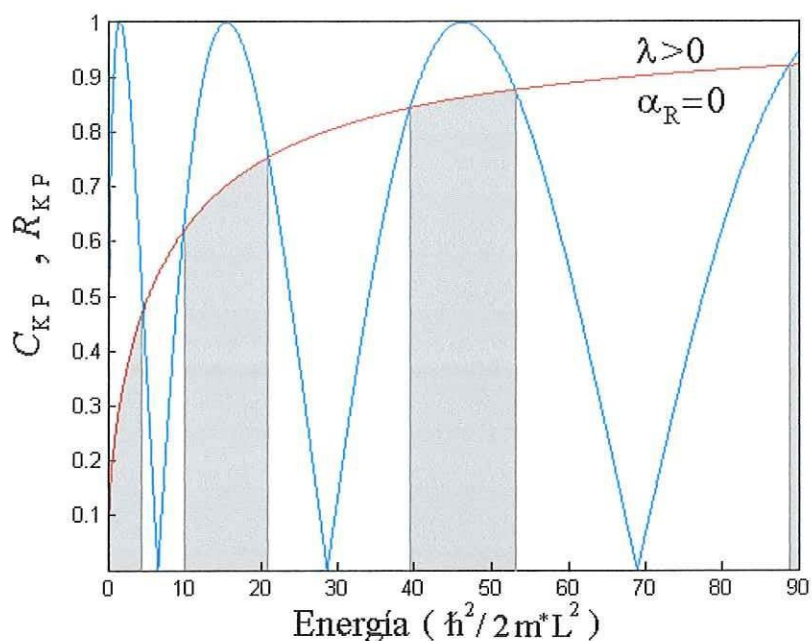


Figura 19. Desigualdad de *Kronig-Penney* Vs Energía. Línea azul: C_{KP} , Línea roja: R_{KP} .
Parámetros: $P=4$, $\alpha_R=0$. Región sombreada: valores de energía prohibidos

En las figuras 20, 21, y 22 se muestran la representación reducida de la dispersión de los electrones en el sistema periódico de barreras ($\lambda > 0$) de potencial tipo delta de *Dirac* en presencia de una interacción *espín-órbita* periódica para primeras tres bandas de energía. Y por completes, en la figura 23 mostramos la representación reducida de la dispersión de los electrones en una red periódica de pozos de potencial ($\lambda < 0$).

La ecuación de dispersión de los electrones en el sistema periódico de potenciales (barreras ó pozos) tipo delta de *Dirac* esta dada explícitamente por la ecuación (23):

$$\cos[(K + \gamma_{\sigma} k_R)L] = \cos(k_0 L) + \frac{P}{k_0 L} \sin(k_0 L)$$

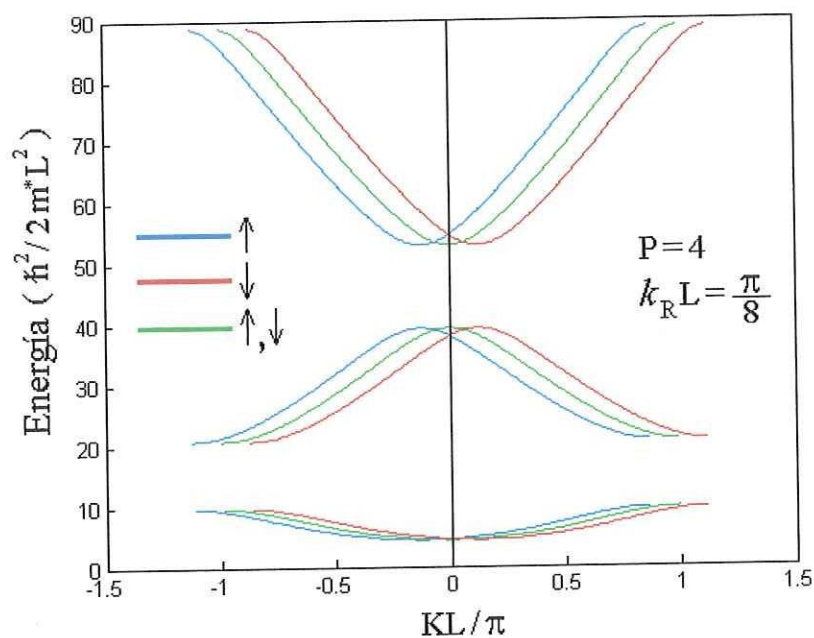


Figura 20. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones.. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{8} \pi$.

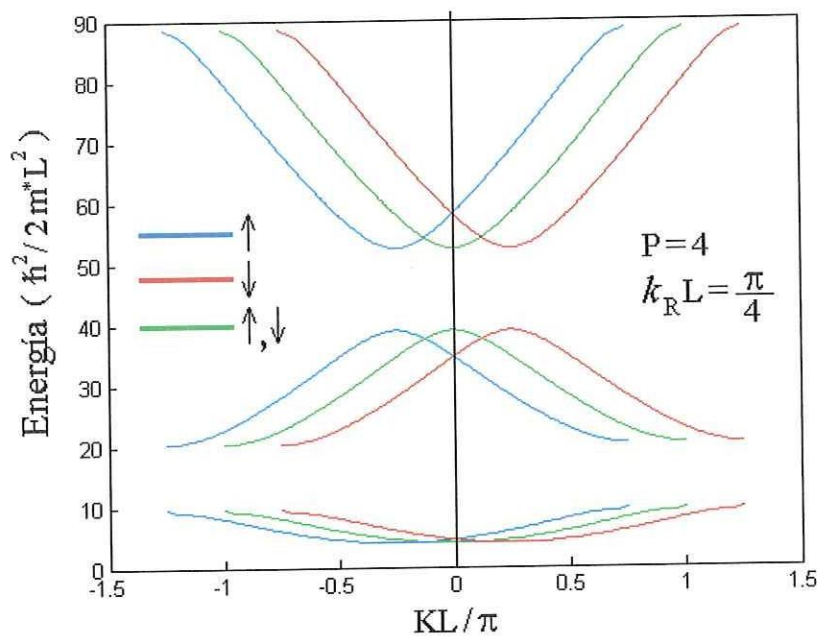


Figura 21. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones.. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{4} \pi$.

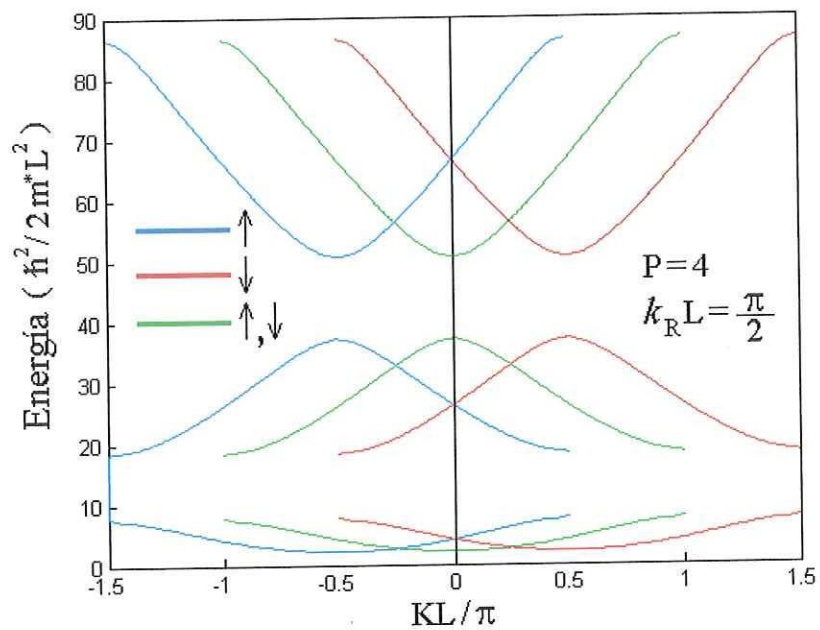


Figura 22. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

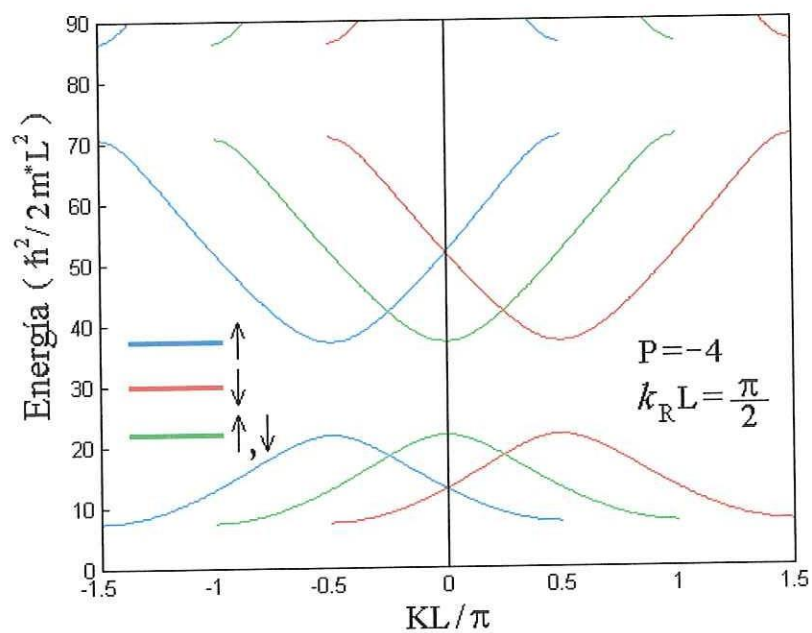


Figura 23. Representación reducida de las primeras tres bandas de energía de la dispersión de los electrones. Parámetros: $P=-4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

En las figuras 20, 21 y 22 se observa que el *efecto Rashba* produce un desdoblamiento de las bandas de energía en KL , así como también un corrimiento en energía similar al del caso de la partícula libre. Este resultado es interesante ya que el desdoblamiento de las bandas es en K asociada al “*momento cristalino*” y no al momento k asociado a la energía del electrón, como sucede en el caso de la partícula libre. Solo se muestra una gráfica para el caso de pozos de potencial ($\lambda < 0$) periódicos ya que el comportamiento para este caso es similar (con su respectivo desdoblamiento y corrimiento de las bandas de energía) para el caso cuando se tienen barreras de potencial ($\lambda > 0$).

Ahora encontraremos el valor del desdoblamiento de las bandas de energía en KL y el valor del corrimiento de la energía (valor en energía de la primera banda), los cuales siguiendo el procedimiento utilizado anteriormente cuando $\alpha_R = 0$, se encuentra que están dados explícitamente por:

$$\delta(KL) = \frac{m^* \alpha_R L}{\hbar^2} \quad E_{\min} = \frac{3\hbar^2 P}{m^* L^2 (P+3)} - \frac{1}{2} \frac{m^* \alpha_R^2}{\hbar^2} \quad (44)$$

Es interesante observar de la ecuación (44) que el *acoplamiento espín-órbita* produce un desdoblamiento en las bandas de energía $\left(\delta = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2} \right)$ y un corrimiento en energía

$\left(\Delta E = \frac{1}{2} \frac{m \alpha_R^2}{\hbar^2} \right)$ similar para los casos de los electrones en ausencia de potenciales y en

presencia de una red periódica de barreras de potencial con una interacción *espín-órbita* uniforme. El valor del corrimiento en energía es conocido en la literatura como la *energía característica del efecto Rashba*, que proviene de:

$$E_R = \frac{\hbar^2 k_R^2}{2m^*}, \text{ y como } k_R = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2} \Rightarrow E_R = \frac{m^* \alpha_R^2}{2\hbar^2}$$

Por otro lado, la desigualdad que nos permite encontrar las regiones prohibidas que toma en cuenta el *acoplamiento espín-órbita* puede obtenerse siguiendo el procedimiento anterior, encontrando que solamente es necesario cambiar $k_E \rightarrow k_0$ en la ecuación (62), donde $k_0 = \sqrt{k_E^2 + k_R^2}$.

En la figura 24 se muestra la densidad de estados por espín del sistema (dada por la ecuación (27)) para los casos en ausencia ($\alpha_R = 0$) y en presencia ($\alpha_R \neq 0$) del *acoplamiento espín-órbita* (líneas verde y roja, respectivamente).

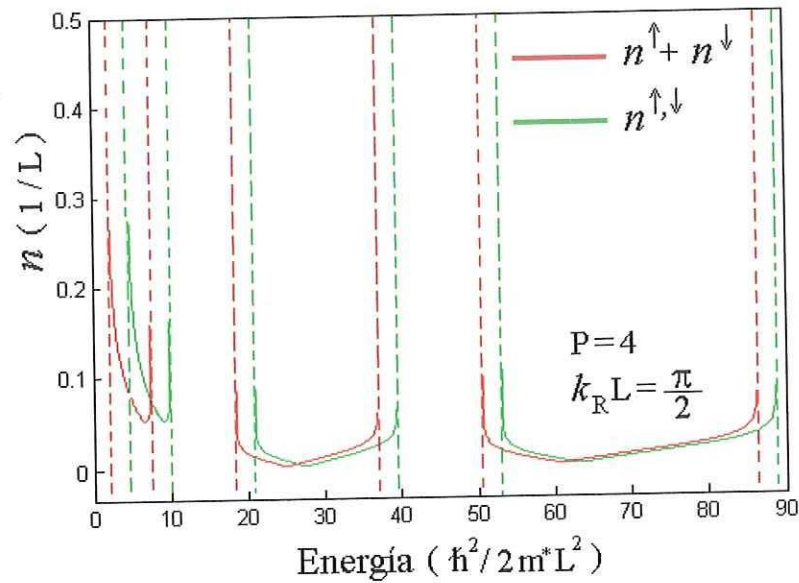


Figura 24. Densidad de estados del sistema. Línea verde: Densidad de estados para un potencial periódico sin acoplamiento espín órbita. Línea roja: Densidad de estados para un potencial periódico con acoplamiento espín órbita. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{2}\pi$.

De esta gráfica se observa que el acoplamiento espín órbita provoca un corrimiento en energía de la densidad de estados del sistema, cuya magnitud se estima que es del orden de $\delta E \approx \frac{1}{2} \frac{m\alpha_R^2}{\hbar^2}$. Además se observa que no hay estados disponibles en las regiones de las energías prohibidas del sistema.

En la figura 25 se muestra la acumulación de espín en el sistema (dada por la ecuación (35)) como función de la energía.

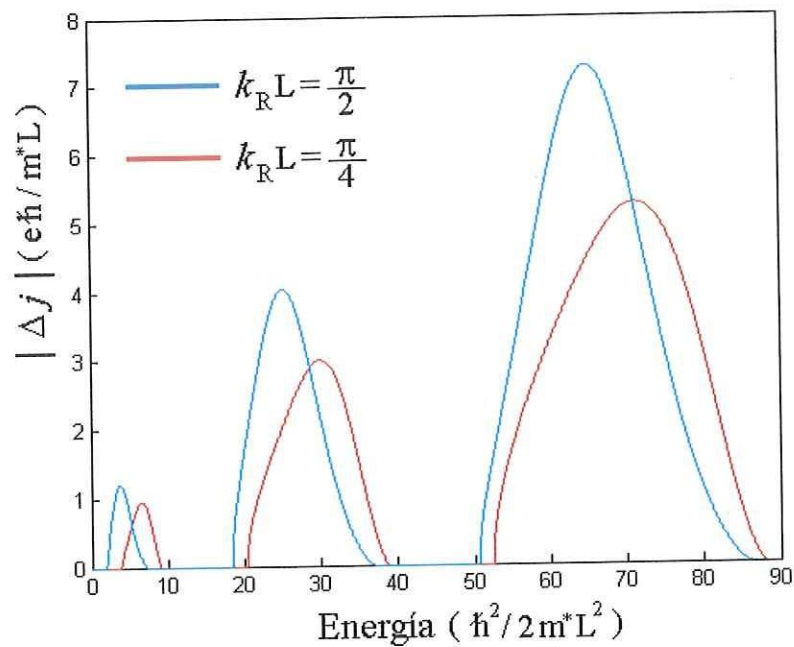


Figura 25. Acumulación de espín del sistema como función de la Energía.
Parámetros: $k_R L = \frac{1}{2} \pi$ y $k_R L = \frac{1}{4} \pi$.

Se observa que la acumulación de espín crece como función de la energía y de la intensidad del *acoplamiento espín-órbita*, además que presenta la propiedad de que se anula en las regiones de energías prohibidas para el sistema.

En el siguiente capítulo estudiaremos el problema de transmisión dependiente del espín de electrones para el caso de un sistema finito de deltas de *Dirac* en la presencia de *acoplamiento espín-órbita* de Rashba.

VI. TRANSMISIÓN EN UN SISTEMA FINITO

En el presente capítulo se estudia la transmisión y reflexión dependientes del espín de electrones a través de un sistema periódico finito de barreras de potencial tipo delta de *Dirac* con *acoplamiento espín-órbita*. Las probabilidades de transmisión y reflexión dependientes del espín se obtienen mediante el uso del formalismo de la *matriz de transferencia*. Este formalismo consiste en conectar las amplitudes de probabilidad de la onda transmitida y reflejada en una región con las amplitudes de probabilidad de la onda transmitida y reflejada en la región vecina mediante una matriz, la *matriz de transferencia*. Además se estudiará la conductancia dependiente del espín de electrones en heteroestructuras ferromagneto/semiconductor/ferromagneto (F/S/F) dentro del formalismo de transporte balístico de *Landauer*,¹⁴ en el que la conductancia es directamente relacionada con la probabilidad de transmisión de los electrones.

VI.1 Transmisión dependiente del espín en un sistema finito

En esta sección calcularemos la transmisión y reflexión dependiente del espín de electrones a través de un sistema periódico finito de n -barreras de potencial tipo delta de *Dirac* con *acoplamiento espín-órbita*. Las probabilidades de transmisión y reflexión dependientes del espín se obtienen mediante una generalización que incluye la

¹⁴ Ver libro *Electronic Transport in Mesoscopic System*, de Supriyo Datta, pág. 57 [40].

dependencia en espín del formalismo utilizado por *D. Griffiths* y *N. Taussing* (*D. J. Griffiths* y *N. F. Taussing* [41]) el cual se basa en hacer una transformación de la *matriz de transferencia* para obtener las probabilidades de transmisión y reflexión en función de polinomios de *Chebyshev*.

La ecuación de *Schrödinger* independiente del tiempo, que gobierna el comportamiento de los electrones en el potencial periódico de barreras de potencial tipo delta de *Dirac* y que incorpora el acoplamiento espín-órbita en 1D (figura 26) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dx^2} \psi^\sigma(x) - \gamma_\sigma i \alpha_R \frac{d}{dx} \psi^\sigma(x) + \sum_{j=1}^n \lambda \delta(x - jL) \psi^\sigma(x) = E \psi^\sigma(x) \quad (45)$$

La solución general de esta ecuación en las regiones donde el potencial es cero ($V(x) = 0$) esta dada explícitamente (ver capítulo III) por:

$$\psi_j^\sigma(x) = C_j^\sigma \exp(i\mu_\sigma x) + D_j^\sigma \exp(-i\tau_\sigma x) \quad (46)$$

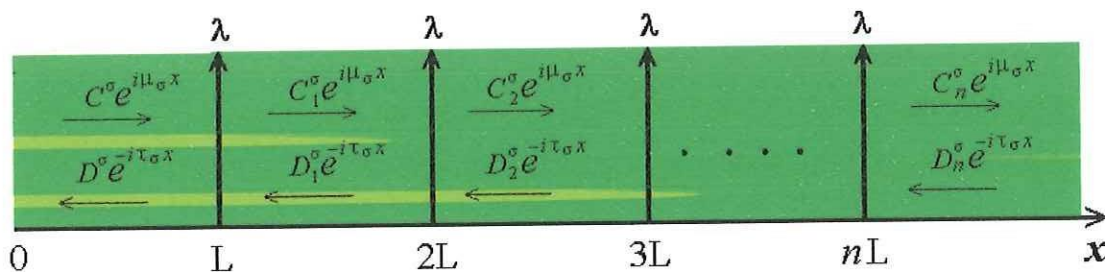


Figura 26. Esquema del sistema periódico finito de n -barreras de potencial tipo delta de *Dirac*, en presencia de la *interacción espín-órbita de Rashba* (en verde).

Los términos de la forma $e^{i\mu_\sigma x}$ (cuando es combinada con el factor estándar dependiente de tiempo $e^{-iEt/\hbar}$) representan ondas propagándose a la derecha, mientras que los términos de la forma $e^{-i\tau_\sigma x}$ representan ondas que viajan a la izquierda. Así C^σ y D_j^σ son las amplitudes de las ondas incidentes por la izquierda y por la derecha; D^σ y C_j^σ con las amplitudes de las ondas reflejadas y transmitidas respectivamente. Note que hemos usado explícitamente $\mu_\sigma \neq \tau_\sigma$ para tomar en cuenta el cambio de número de onda para ondas viajeras hacia la derecha/izquierda cuando $\alpha_R \neq 0$.

Comúnmente, para el estudio de la dispersión, solo se consideran partículas que inciden de la izquierda, así $D_j^\sigma = 0$; en este caso, la probabilidad de que una partícula se transmita y se refleje a través del sistema son, respectivamente:

$$|t_j^\sigma|^2 = \left| \frac{C_j^\sigma}{C^\sigma} \right|^2 \qquad |r_j^\sigma|^2 = \left| \frac{D^\sigma}{C^\sigma} \right|^2 \qquad (47)$$

Para determinar estas cantidades, se resuelva la ecuación de *Schrödinger* y se imponen las soluciones de frontera apropiadas del sistema (estas condiciones de frontera son dadas por las propiedades de continuidad / discontinuidad de $\psi^\sigma(x)$ y $\frac{d\psi^\sigma(x)}{dx}$ en las interfases), resultando un par de ecuaciones que relacionan las amplitudes de una región con otra, las cuales son dadas explícitamente como:

$$C_1^\sigma = M_{11}^\sigma C^\sigma + M_{12}^\sigma D^\sigma$$

$$D_1^\sigma = M_{21}^\sigma C^\sigma + M_{22}^\sigma D^\sigma$$

donde M_{11}^σ , M_{12}^σ , M_{21}^σ y M_{22}^σ son las componentes de la *matriz de transferencia*. El sistema de ecuaciones a su vez puede expresarse como:

$$\begin{pmatrix} C_1^\sigma \\ D_1^\sigma \end{pmatrix} = [M_1^\sigma] \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix}, \quad \text{con} \quad [M_1^\sigma] = \begin{pmatrix} M_{11}^\sigma & M_{12}^\sigma \\ M_{21}^\sigma & M_{22}^\sigma \end{pmatrix}$$

Repitiendo este procedimiento sucesivamente con las demás regiones, se obtiene:

$$\begin{pmatrix} C_2^\sigma \\ D_2^\sigma \end{pmatrix} = [M_2^\sigma] \begin{pmatrix} C_1^\sigma \\ D_1^\sigma \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} C_3^\sigma \\ D_3^\sigma \end{pmatrix} = [M_3^\sigma] \begin{pmatrix} C_2^\sigma \\ D_2^\sigma \end{pmatrix}; \quad \dots \quad \begin{pmatrix} C_n^\sigma \\ D_n^\sigma \end{pmatrix} = [M_n^\sigma] \begin{pmatrix} C_{n-1}^\sigma \\ D_{n-1}^\sigma \end{pmatrix}$$

Por lo tanto, los coeficientes A_n^σ y B_n^σ están relacionados con A^σ y A^σ mediante:

$$\begin{pmatrix} C_n^\sigma \\ D_n^\sigma \end{pmatrix} = [M^\sigma(n)] \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix}, \quad \text{donde} \quad [M^\sigma(n)] = [M_n^\sigma][M_{n-1}^\sigma] \dots [M_1^\sigma] = \prod_{\nu=1}^n [M_\nu^\sigma] \quad (48)$$

Como se mencionó anteriormente, solo se consideraran ondas incidentes de la izquierda ($D_n^\sigma = 0$), entonces no es difícil ver que la probabilidad de transmisión y reflexión estarán dadas por:

$$|t_n^\sigma|^2 = \left| \frac{\det M^\sigma(n)}{M_{22}^\sigma(n)} \right|^2 \quad |r_n^\sigma|^2 = \left| -\frac{M_{21}^\sigma(n)}{M_{22}^\sigma(n)} \right|^2 \quad (49)$$

A continuación se calculará la $[M_1^\sigma]$ para obtener la transmisión a través de una barrera de potencial. Para esto utilizaremos las condiciones de frontera (Apéndice C) que debe satisfacer la función de onda en este sistema:

$$\psi^\sigma(x_n^+) = \psi^\sigma(x_n^-) \quad \text{y} \quad \left. \frac{d\psi^\sigma(x)}{dx} \right|_{x=x_n^+} = \left. \frac{d\psi^\sigma(x)}{dx} \right|_{x=x_n^-} + \frac{2P}{L} \psi^\sigma(x_n) \quad (50)$$

Dado que el sistema es periódico $x_n = nL$. Utilizando las ecuaciones (46) y (50) con $n=1$ (una barrera de potencial) se obtienen el siguiente par de ecuaciones:

$$\begin{aligned} C_1^\sigma e^{i\mu_\sigma L} + D_1^\sigma e^{-i\tau_\sigma L} &= C^\sigma e^{i\mu_\sigma L} + D^\sigma e^{-i\tau_\sigma L} \\ i\mu_\sigma C_1^\sigma e^{i\mu_\sigma L} - i\tau_\sigma D_1^\sigma e^{-i\tau_\sigma L} &= i\mu_\sigma C^\sigma e^{i\mu_\sigma L} - i\tau_\sigma D^\sigma e^{-i\tau_\sigma L} + \frac{2P}{iL} (C^\sigma e^{i\mu_\sigma L} + D^\sigma e^{-i\tau_\sigma L}) \end{aligned}$$

Las cuales al realizar un poco de álgebra se pueden escribir como:

$$\begin{pmatrix} C_1^\sigma \\ D_1^\sigma \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1+i\beta_\sigma & -i\beta_\sigma e^{-2i\phi_\sigma} \\ i\beta_\sigma e^{2i\phi_\sigma} & 1-i\beta_\sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix}, \quad (51)$$

donde se definen las constantes: $\beta_\sigma = \frac{2P}{(\mu_\sigma + \tau_\sigma)L}$ y $\phi_\sigma = \frac{1}{2}(\mu_\sigma + \tau_\sigma)L$.

De aquí que la probabilidad de transmisión y reflexión para el caso de solo una barrera de potencial es:

$$|t_1^\sigma|^2 = \frac{1}{1+\beta_\sigma^2} \quad |r_1^\sigma|^2 = \frac{\beta_\sigma^2}{1+\beta_\sigma^2} \quad (52)$$

Ahora para encontrar la transmisión y reflexión de los electrones a través de las n -barreras de potencial es necesario conocer la expresión de $[M^\sigma(n)]$, la cual está definida por la ecuación (48). En general, las $[M_\nu^\sigma]$ tienen la forma:

$$[M_\nu^\sigma] = \begin{pmatrix} 1 - i\beta_\sigma & -i\beta_\sigma e^{-2i\nu\phi_\sigma} \\ i\beta_\sigma e^{2i\nu\phi_\sigma} & 1 + i\beta_\sigma \end{pmatrix}, \quad (53)$$

la cual se utilizara para evaluar explícitamente $[M^\sigma(n)]$.

Para esto, primero veamos el caso de la matriz de transferencia para una barrera de potencial, la cual se encontró anteriormente (ecuación (51)) y hagamos una transformación de coordenadas de las componentes de esta matriz, obteniendo:

$$[M^\sigma(1)] = [M_1^\sigma] = \begin{pmatrix} 1 - i\beta_\sigma & -i\beta_\sigma e^{-2i\phi_\sigma} \\ i\beta_\sigma e^{2i\phi_\sigma} & 1 + i\beta_\sigma \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \sqrt{1 + \beta_\sigma^2} e^{i\theta_1^\sigma} & -i\beta_\sigma e^{-2i\phi_\sigma} \\ i\beta_\sigma e^{2i\phi_\sigma} & \sqrt{1 + \beta_\sigma^2} e^{-i\theta_1^\sigma} \end{pmatrix}$$

donde $\theta_1^\sigma = -\tan^{-1}(\beta_\sigma)$.

Veamos ahora la matriz de transferencia para el caso de dos barreras de potencial, la cual al realizar el álgebra correspondiente se obtiene:

$$[M^\sigma(2)] = [M_2^\sigma][M_1^\sigma] = \begin{pmatrix} \sqrt{1 + (2z_\sigma\beta_\sigma)^2} e^{i\theta_2^\sigma} & -ie^{-3i\phi_\sigma} (2z_\sigma\beta_\sigma) \\ ie^{3i\phi_\sigma} (2z_\sigma\beta_\sigma) & \sqrt{1 + (2z_\sigma\beta_\sigma)^2} e^{-i\theta_2^\sigma} \end{pmatrix}$$

$$\text{donde } \theta_2^\sigma = -\tan^{-1} \left[\frac{2\beta_\sigma (1 + \beta_\sigma \sin \phi_\sigma \cos \phi_\sigma)}{1 - 2\beta_\sigma^2 \sin^2 \phi_\sigma} \right] \quad \text{y} \quad z_\sigma = \cos \phi_\sigma + \beta_\sigma \sin \phi_\sigma.$$

La matriz de transferencia para el caso de tres barreras de potencial esta dada por:

$$[M^\sigma(3)] = [M_3^\sigma][M_2^\sigma][M_1^\sigma] = \begin{pmatrix} \sqrt{1 + [(4z_\sigma^2 - 1)\beta_\sigma]^2} e^{i\theta_3^\sigma} & -ie^{-4i\phi_\sigma} [(4z_\sigma^2 - 1)\beta_\sigma] \\ ie^{4i\phi_\sigma} [(4z_\sigma^2 - 1)\beta_\sigma] & \sqrt{1 + [(4z_\sigma^2 - 1)\beta_\sigma]^2} e^{-i\theta_3^\sigma} \end{pmatrix}$$

Y así sucesivamente. Por inspección de estos ejemplos, sugerimos que la forma general de $[M^\sigma(n)]$ es:

$$[M^\sigma(n)] = \prod_{v=1}^n [M_v^\sigma] = \begin{pmatrix} \sqrt{1 + [\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)]^2} e^{i\theta_n^\sigma} & -ie^{-i(n+1)\phi_\sigma} [\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)] \\ ie^{i(n+1)\phi_\sigma} [\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)] & \sqrt{1 + [\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)]^2} e^{-i\theta_n^\sigma} \end{pmatrix} \quad (54)$$

Donde de $Q_n(z_\sigma)$ es un polinomio de orden n en z ($Q_1 = 1, Q_2 = 2z_\sigma, Q_3 = 4z_\sigma^2 - 1, \dots$).

Se confirmara esta conjetura (y se obtendrá una relación recursiva para este polinomio) por inducción. Usando la ecuación (48) en la forma:

$$[M^\sigma(n+1)] = [M_{n+1}^\sigma][M^\sigma(n)] \quad (55)$$

Al hacer el producto se obtienen las siguientes dos ecuaciones de recurrencia para las Q 's:

$$\sqrt{1 + [\beta_\sigma Q_{n+1}(z_\sigma)]^2} e^{i\theta_{n+1}^\sigma} = (1 - i\beta_\sigma) \sqrt{1 + [\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)]^2} e^{i\theta_n^\sigma} + \beta_\sigma^2 Q_n(z_\sigma) e^{-i(n+2)\phi_\sigma} \quad (56)$$

$$e^{i(n+2)\phi_\sigma} Q_{n+1}(z_\sigma) = (1+i\beta_\sigma) e^{i(n+1)\phi_\sigma} Q_n(z_\sigma) + \sqrt{1+[\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)]^2} e^{2i(n+1)\phi_\sigma} e^{i\theta_n^\sigma} \quad (57)$$

Reescribiendo (57) se tiene

$$\sqrt{1+[\beta_\sigma Q_n(z_\sigma)]^2} e^{i\theta_n^\sigma} = e^{-2i(n+1)\phi_\sigma} \left[e^{i(n+2)\phi_\sigma} Q_{n+1}(z_\sigma) - (1+i\beta_\sigma) e^{i(n+1)\phi_\sigma} Q_n(z_\sigma) \right] \quad (58)$$

Si en (58) se hace $n \rightarrow n+1$ encontramos:

$$\sqrt{1+[\beta_\sigma Q_{n+1}(z_\sigma)]^2} e^{i\theta_{n+1}^\sigma} = e^{-2i(n+2)\phi_\sigma} \left[e^{i(n+3)\phi_\sigma} Q_{n+2}(z_\sigma) - (1+i\beta_\sigma) e^{i(n+2)\phi_\sigma} Q_{n+1}(z_\sigma) \right] \quad (59)$$

Sustituyendo (58) en (56) e igualando (59) y (56) se obtiene la formula de recurrencia para el polinomio propuesto para la matriz de transferencia:

$$Q_{n+2}(z_\sigma) - 2z_\sigma Q_{n+1}(z_\sigma) + Q_n(z_\sigma) = 0 \quad (60)$$

Ahora si se hace $U_0 \equiv Q_1 = 1$, $U_1 \equiv Q_2 = 2z_\sigma$, y así sucesivamente, la formula de recursión de los polinomios (ecuación (60)) es la de los polinomios de *Chebyshev* de segundo orden, y se concluye que la probabilidad de transmisión y reflexión a través de n -barreras de potencial, deben ser entonces, respectivamente:

$$\left| t_n^\sigma \right|^2 = \frac{1}{1+[\beta_\sigma U_{n-1}(z_\sigma)]^2} \quad \left| r_n^\sigma \right|^2 = \frac{[\beta_\sigma U_{n-1}(z_\sigma)]^2}{1+[\beta_\sigma U_{n-1}(z_\sigma)]^2} \quad (61)$$

Donde se observa claramente que se satisface la condición de conservación de partículas:

$$|t_n^\sigma|^2 + |r_n^\sigma|^2 = 1.$$

Sustituyendo la ecuación (52) en (61) se obtienen:

$$\boxed{|t_n^\sigma|^2 = \frac{|t_1^\sigma|^2}{|t_1^\sigma|^2 + U_{n-1}^2(z_\sigma) [1 - |t_1^\sigma|^2]}} \quad \boxed{|r_n^\sigma|^2 = \frac{|r_1^\sigma|^2 U_{n-1}^2(z_\sigma)}{1 + |r_1^\sigma|^2 [U_{n-1}^2(z_\sigma) - 1]}} \quad (62)$$

Que son las ecuaciones que nos permite evaluar de una forma explicita la probabilidad de transmisión y reflexión de los electrones en una red periódica finita de barreras de potencial tipo delta de *Dirac*. Note de la ecuación (62) que la probabilidad de transmisión y reflexión de los electrones a través de n -barreras de potencial depende únicamente de la probabilidad de transmisión y reflexión de una sola barrera y del polinomio correspondiente.

Por otro lado, de la definición de los polinomios de *Chebyshev* de segundo orden, se tiene que estos polinomios tienen la siguiente forma¹⁵:

$$\boxed{U_n(z_\sigma) = \frac{\sin[(n+1)\cos^{-1}(z_\sigma)]}{\sin(\cos^{-1}(z_\sigma))}}$$

Por lo que no es difícil concluir que las ecuaciones (62) las podemos reescribir como:

¹⁵ Ver libro *Mathematical Handbook*, de *M. Spiegel*, página 157 [42].

$$\boxed{|t_n^\sigma|^2 = \frac{\sin^2(\kappa_\sigma)}{\sin^2(\kappa_\sigma) + \beta_\sigma^2 \sin^2(n\kappa_\sigma)}} \quad \boxed{|r_n^\sigma|^2 = \frac{\beta_\sigma^2 \sin^2(n\kappa_\sigma)}{\sin^2(\kappa_\sigma) + \beta_\sigma^2 \sin^2(n\kappa_\sigma)}} \quad (63)$$

donde $\kappa_\sigma = \cos^{-1}(z_\sigma)$.

Note que el enfoque nos permitió encontrar de forma explícita y exacta las probabilidades de transmisión y reflexión para el sistema periódico de n -deltas incluyendo el *acoplamiento espín-órbita*. Además se satisface que si $k_R = 0$, las ecuaciones (61) y (62) se reducen a las ecuaciones encontradas con el formalismo de la *matriz de transferencia* por *D. Griffiths* y *N. Taussing* (D. J. Griffiths y N. F. Taussing [41]) y por *P. Pereyra* y *E. Castillo* (P. Pereyra y E. Castillo [43]) a través de un formalismo basado en los *polinomios no-conmutativos* respectivamente.

VI.2 Conductancia de espín a través de heteroestructuras

F/S/F

La inyección eléctrica de corrientes polarizadas de espín provenientes de materiales ferromagnéticos a semiconductores es de fundamental importancia en *espintrónica*. Esto fue sugerido en el trabajo pionero de *Datta-Das* (S. Datta y B. Das [9]) que ya hemos mencionado y en el cual proponen que si se utilizan materiales ferromagnéticos como contactos fuente y colector (inyección y detector de espines) conectados a un

semiconductor, y usando el efecto de presión del espín del electrón en gases bidimensionales mediante el *acoplamiento espín-órbita*, se podría implementar un novedoso dispositivo, el transistor de espines (figura 27). La idea principal de este dispositivo es realizar la manipulación eléctrica del espín de los electrones (mediante el *efecto Rashba*) en vez de su carga eléctrica.

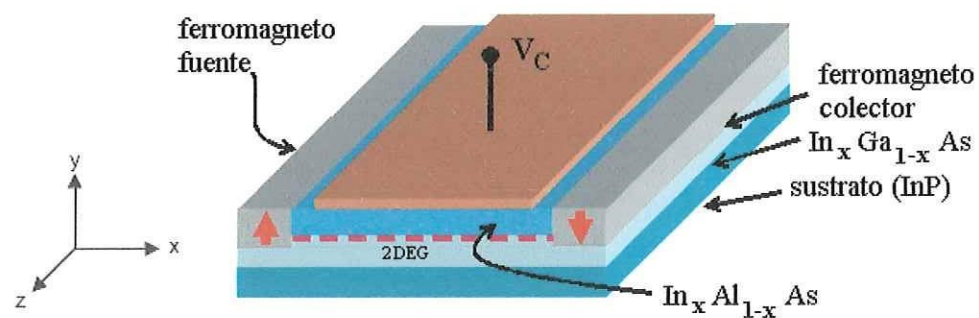


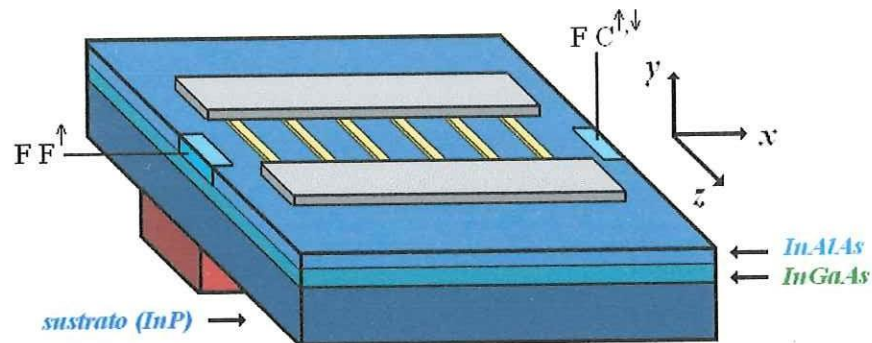
Figura 27. Vista esquemática del transistor de espines propuesto por *Datta-Das*. (Cortesía: *F. Mireles*).

En esta sección se estudiara el transporte dependiente del espín en un sistema Q1DEG a través de una heteroestructura ferromagneto/semiconductor/ferromagneto (F/S/F).

Para esto el modelo experimental que se tiene en mente es el siguiente: Considere un dispositivo modulador de espín Q1DEG, en el cual se tienen placas localizadas periódicamente como se muestra en la figura 28(a) y 28(b). Este dispositivo cuenta además con dos contactos ferromagnéticos, el primero contacto (ferromagneto fuente) tiene una magnetización orientada (dirección y) de tal manera que solo puede emitir electrones polarizados espín-arriba (contacto FF^\uparrow). El segundo contacto ferromagnético

localizado en el extremo opuesto del dispositivo (ferromagneto colector) se puede elegir que tenga magnetización ya sea paralela (FC^\uparrow) o antiparalela (FC^\downarrow) a la del ferromagneto fuente, funcionando como detector de espines en cierta dirección.

(a)



(b)

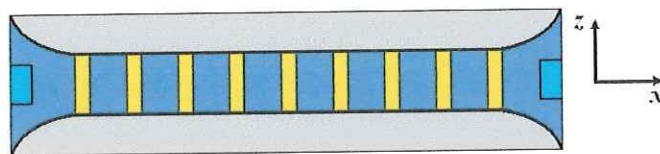


Figura 28. (a) Vista esquemática del dispositivo utilizado para confinar un Q1DEG, en el cual se tienen placas metálicas localizadas periódicamente y dos contactos ferromagnéticos: ferromagneto fuente (a la izquierda del dispositivo) y ferromagneto colector (en el extremo opuesto del dispositivo). (b) Vista del Q1D alambre cuántico con placas metálicas localizadas periódicamente con dos contactos ferromagnéticos (emisor y colector).

El modelo que se utilizara para calcular el transporte dependiente del espín a través de la unión híbrida F/S/F consistirá de dos electrodos ferromagnéticos con magnetización a lo largo de la dirección y , y se asumirá que las bandas de energía espín arriba y espín abajo tienen una separación Δ en energía de acuerdo con el modelo de *Stoner-Wohlfarth*

(F. Mireles y G. Kirczenow [38]). A su vez, los electrodos ferromagnéticos estarán conectados a un alambre cuántico cuasi-unidimensional que confina lateralmente a los electrones en la dirección transversal al transporte, que es asumido normal a la interfase y a lo largo del eje x .

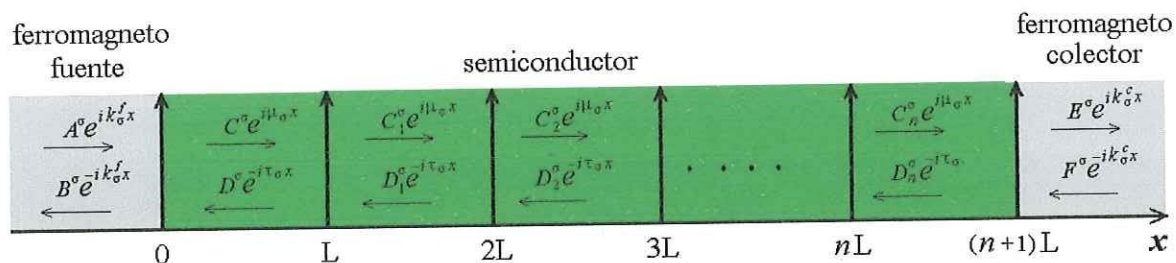
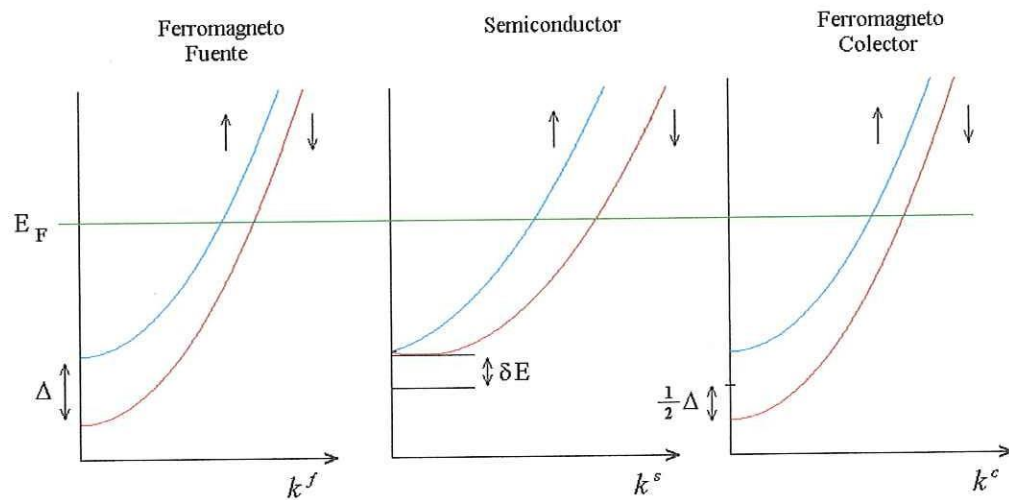


Figura 29. Esquema del Q1D alambre cuántico con contacto ferromagnéticos. En los ferromagnetos $\alpha_R = 0$ y en el semiconductor se tiene un *acoplamiento espín-órbita* uniforme ($\alpha_R \neq 0$).

Se considerara además que en el canal semiconductor se tendrá una red periódica de barreras de potencial tipo delta de *Dirac* y un *acoplamiento espín-órbita* uniforme, como se muestra en la figura 29. En la figura 30(a) y 30(b) se muestran la estructura de las bandas de energía de la unión entre los ferromagnetos y el semiconductor para las configuraciones de orientación de magnetización de los ferromagnetos paralela y antiparalela, respectivamente.

(a)



(b)

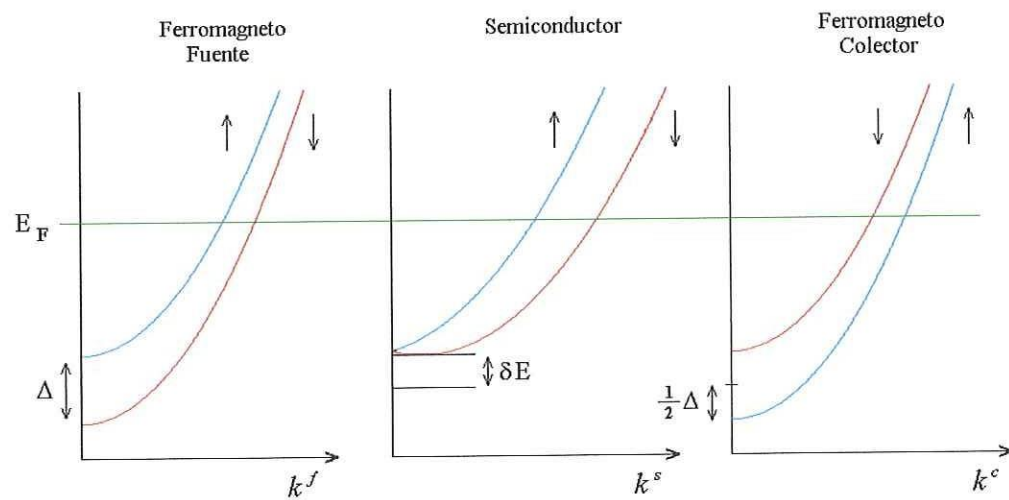


Figura 30. Diagrama esquemático de las bandas de energía para la unión F/S/F. (a) Caso con orientación de magnetización de los ferromagnetos paralela (P). (b) Caso con orientación de magnetización de los ferromagnetos antiparalela (AP).

El Hamiltoniano para este sistema esta dado por: $H = H_0 + H_{SO} + V(x)$, (64)

donde,

$$H_0 = I \frac{p_x^2}{2m^*}, \quad H_{SO} = \frac{1}{2\hbar} \sigma_z [p_x \alpha_R(x) + \alpha_R(x) p_x], \quad \text{y} \quad V(x) = \begin{pmatrix} V^\uparrow(x) & 0 \\ 0 & V^\downarrow(x) \end{pmatrix}.$$

Claramente, H_0 es la parte de la energía cinética de electrón, H_{SO} es la versión simetrizada unidimensional del Hamiltoniano *Rashba*, debido a que el parámetro de la intensidad del acoplamiento es dependiente de la posición. En nuestro caso $\alpha_R(x) = \alpha_R \theta(x) \theta([n+1]L - x)$, donde $\theta(x)$ define la función escalón de *Heaviside*. El último término $V(x)$ define las barreras de potencial en el semiconductor, que son modeladas por $V^\sigma(x) = \sum_{j=0}^{n+1} \lambda^\sigma \delta(x - jL)$, donde se escribe que el potencial es dependiente del espín por completés, sin embargo en los cálculos que se realizaran se asume que el potencial es independiente del espín.

En los contactos ferromagnéticos el espectro de energía esta dado por:

$$E_\sigma^\nu(k_\sigma^\nu) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_\sigma^\nu)^2 + \frac{1}{2} \gamma_\sigma \Delta \quad (65)$$

Donde $\nu = f, c$ denota los ferromagnetos fuente y colector respectivamente, k_σ^ν es el vector de onda para la banda con estado de espín σ en el ferromagneto ν , y Δ es la separación en energía de las bandas de espín. En la región de los ferromagnetos fuente y

colector, las soluciones de la ecuación de *Schrödinger* tienen la forma de ondas planas dadas respectivamente por:

$$\psi_f^\sigma(x) = A^\sigma \exp(ik_\sigma^f x) + B^\sigma \exp(-ik_\sigma^f x) \quad (66)$$

$$\psi_c^\sigma(x) = E^\sigma \exp(ik_\sigma^c x) + F^\sigma \exp(-ik_\sigma^c x) \quad (67)$$

En el semiconductor existe un desdoblamiento en la estructura de las bandas de energía provocada por el *acoplamiento espín-órbita*, por lo que la dispersión de los electrones esta dada por:

$$E_\sigma^S(k_\sigma^v) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_\sigma^S)^2 + \gamma_\sigma \alpha_R k_\sigma^S + \delta E \quad (68)$$

donde δE es la diferencia en energía de las bandas de conducción del ferromagneto y el semiconductor. En la región del semiconductor donde el potencial es cero ($V(x) = 0$), la solución general de la ecuación de *Schrödinger* tiene la forma:

$$\psi_{S,j}^\sigma(x) = C_j^\sigma \exp(i\mu_\sigma x) + D_j^\sigma \exp(-i\tau_\sigma x) \quad (69)$$

Para calcular la amplitud del coeficiente de transmisión de espín se utilizará de nuevo el formalismo de la *matriz de transferencia*. Tal como se describió en la sección anterior, este formalismo nos permitirá relacionar los coeficientes de las amplitudes reflejadas y transmitidas del ferromagneto colector con los del ferromagneto fuente mediante una matriz de la siguiente forma:

$$\begin{pmatrix} E^\sigma \\ F^\sigma \end{pmatrix} = [M_C^\sigma] \begin{pmatrix} C_n^\sigma \\ D_n^\sigma \end{pmatrix}, \text{ a su vez } \begin{pmatrix} C_n^\sigma \\ D_n^\sigma \end{pmatrix} = [M_S^\sigma] \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix} \text{ y } \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix} = [M_F^\sigma] \begin{pmatrix} A^\sigma \\ B^\sigma \end{pmatrix}$$

Entonces se puede ver que:

$$\begin{pmatrix} E^\sigma \\ F^\sigma \end{pmatrix} = [M_T^\sigma] \begin{pmatrix} A^\sigma \\ B^\sigma \end{pmatrix}, \quad (70)$$

donde $[M_C^\sigma][M_S^\sigma][M_F^\sigma] = [M_T^\sigma]$.

Note que $[M_S^\sigma] = [M^\sigma(n)]$, la cual se encontró en la sección anterior, por lo tanto para la calcular la transmisión solo se necesita encontrar las matrices $[M_C^\sigma]$ y $[M_F^\sigma]$.

Para encontrar estas matrices se resuelve la ecuación de *Schrödinger* (ecuación (14)) y se utilizan las condiciones de frontera para la unión de las regiones F/S y S/F. Hay que mencionar que debido a que el acoplamiento espín-órbita es dependiente de la posición, habrá una modificación en la condición de frontera de la derivada de la función de onda (Apéndice E).

Las condiciones de frontera para la derivada de la función de onda en la interfase F/S y S/F están dadas por las siguientes ecuaciones, respectivamente:

$$\left[\frac{d}{dx} + i\gamma_\sigma k_R \right] \psi_S^\sigma(x) \Big|_{x=0} = \left[\frac{d}{dx} + \frac{2m^* \lambda}{\hbar^2} \right] \psi_f^\sigma(x) \Big|_{x=0} \quad (71)$$

$$\left[\frac{d}{dx} - \frac{2m^* \lambda}{\hbar^2} \right] \psi_C^\sigma(x) \Big|_{x=n+1} = \left[\frac{d}{dx} + i\gamma_\sigma k_R \right] \psi_S^\sigma(x) \Big|_{x=n+1} \quad (72)$$

Ahora utilizando las ecuaciones (71), (72), y la condición de frontera de la continuidad de la función de onda en cada región, se encuentran las matrices que relacionan los coeficientes de las regiones F/S y S/F, las cuales están dadas explícitamente por:

$$\begin{pmatrix} E^\sigma \\ F^\sigma \end{pmatrix} = [M_C^\sigma] \begin{pmatrix} C_n^\sigma \\ D_n^\sigma \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad \begin{pmatrix} C^\sigma \\ D^\sigma \end{pmatrix} = [M_F^\sigma] \begin{pmatrix} A^\sigma \\ B^\sigma \end{pmatrix},$$

donde

$$[M_F^\sigma] = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} + \frac{k_\sigma^f}{2k_0} - i\beta_\sigma & \frac{1}{2} - \frac{k_\sigma^f}{2k_0} - i\beta_\sigma \\ \frac{1}{2} - \frac{k_\sigma^f}{2k_0} + i\beta_\sigma & \frac{1}{2} + \frac{k_\sigma^f}{2k_0} + i\beta_\sigma \end{pmatrix}, \quad \text{y}$$

$$[M_C^\sigma] = \begin{pmatrix} \left[\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2k_\sigma^c} - \frac{k_0}{k_\sigma^c} i\beta_\sigma \right] e^{i(\mu_\sigma - k_\sigma^c)(n+1)L} & \left[\frac{1}{2} - \frac{k_0}{2k_\sigma^c} - \frac{k_0}{k_\sigma^c} i\beta_\sigma \right] e^{-i(\tau_\sigma + k_\sigma^c)(n+1)L} \\ \left[\frac{1}{2} - \frac{k_0}{2k_\sigma^c} + \frac{k_0}{k_\sigma^c} i\beta_\sigma \right] e^{i(\mu_\sigma + k_\sigma^c)(n+1)L} & \left[\frac{1}{2} + \frac{k_0}{2k_\sigma^c} + \frac{k_0}{k_\sigma^c} i\beta_\sigma \right] e^{-i(\tau_\sigma - k_\sigma^c)(n+1)L} \end{pmatrix}$$

Cuyos determinantes están dados explícitamente por:

$$\det M_F^\sigma = \frac{k_\sigma^f}{k_0} \qquad \det M_C^\sigma = \frac{k_0}{k_\sigma^c} e^{-i\gamma_\sigma k_R (n+1)L}$$

Note que si $k_\sigma^f = k_\sigma^c = k_0$ se tendría la forma general de las matrices que conectan cada zona. Por otro lado, como se sabe que: $\det M_T^\sigma = (\det M_C^\sigma)(\det M_S^\sigma)(\det M_F^\sigma)$, entonces se encuentra que:

$$\det M_T^\sigma = \frac{k_\sigma^f}{k_\sigma^c} e^{-i\gamma_\sigma k_R (n+1)L} \qquad (73)$$

La probabilidad de que un electrón proveniente del ferromagneto fuente con un estado de espín σ , entre al semiconductor y sea transmitido a través del ferromagneto colector con magnetización paralela (P) a antiparalela (AP) es determinada explícitamente por:

$$T_{P,AP}^\sigma = \frac{v_\sigma^c}{v_\sigma^f} \left| \frac{\det(M_T^\sigma)}{(M_T^\sigma)_{22}} \right|^2, \qquad (74)$$

donde $v_\sigma^f = \hbar k_\sigma^f$ y $v_\sigma^c = \hbar k_\sigma^c$, son las velocidades de los electrones que entran y salen con espín σ , respectivamente.

Por otro lado, la conductancia de espín a temperatura cero se calcula con el formalismo de transporte balístico desarrollado por *Landauer*, en el cual:

$$G_{P,AP}^{\sigma} = \frac{e^2}{\hbar} T_{P,AP}^{\sigma} , \quad (75)$$

donde $G_{P,AP}^{\sigma}$ es la conductancia y $T_{P,AP}^{\sigma}$ es la probabilidad de transmisión de los electrones con estado de espín σ en la configuración paralela (P) o antiparalela (AP) de los ferromagnetos .

VII. ANÁLISIS Y DISCUSIÓN DE RESULTADOS PARA EL SISTEMA FINITO

A continuación en este capítulo se analizarán y discutirán los resultados obtenidos en el capítulo VI de este trabajo. Primero analizaremos la transmisión dependiente del espín de los electrones a través de n -barreras de potencial. Después analizaremos la conductancia dependiente del espín de los electrones a través de una heteroestructura F/S/F con diferentes configuraciones de orientación de la magnetización de los ferromagnetos.

En las figuras 31 y 32 se muestran la transmisión dependiente del espín y el logaritmo natural de la transmisión como función de la energía de los electrones a través de una red periódica de n -barreras de potencial tipo delta de *Dirac* en presencia de un *acoplamiento espín-órbita* uniforme, respectivamente.

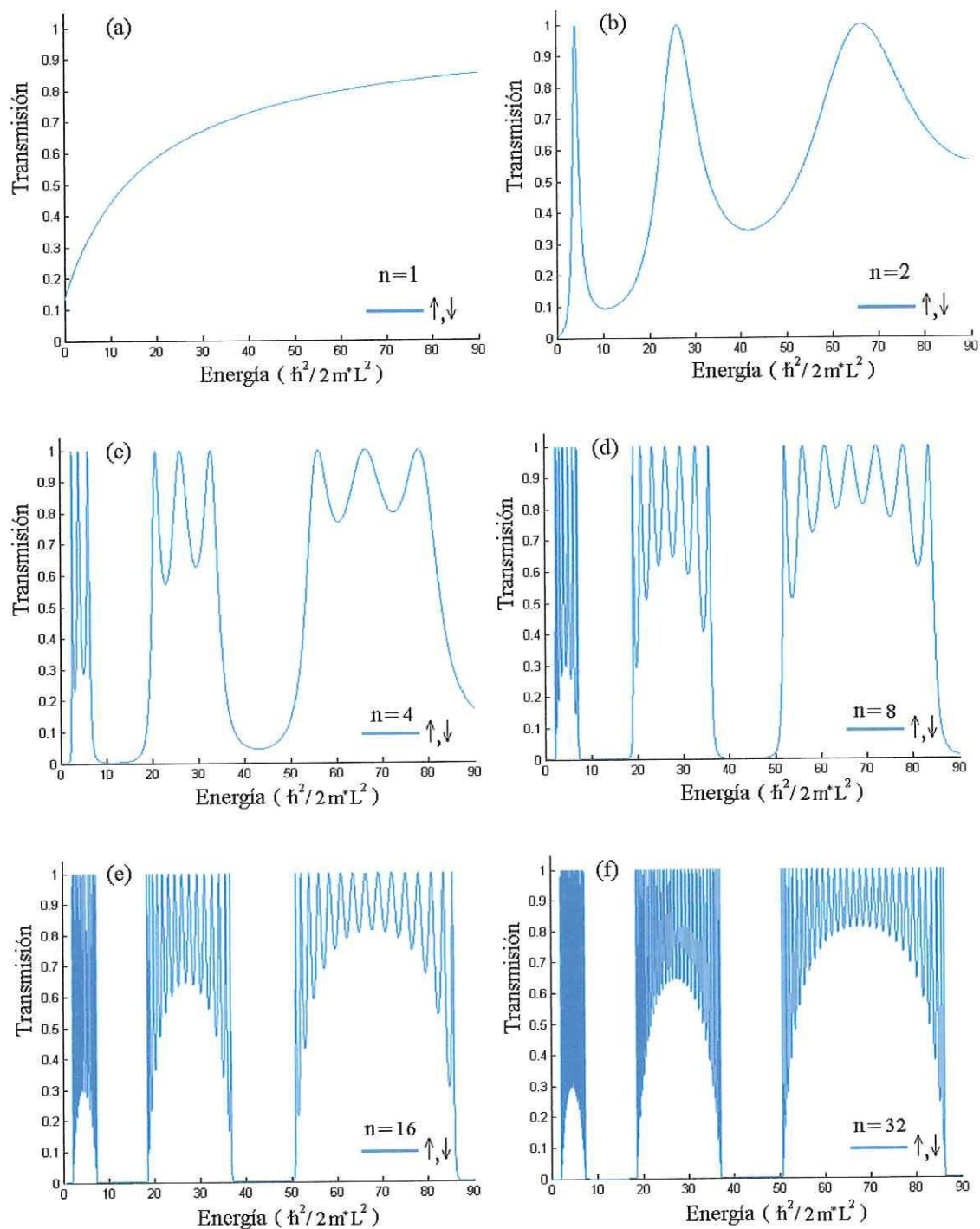


Figura 31. Transmisión de los electrones a través de n -barreras de potencial tipo delta de Dirac. (a) caso para $n=1$ (b) caso para $n=2$ (c) caso para $n=4$ (d) caso para $n=8$ (e) caso para $n=16$ (f) caso para $n=32$. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$.

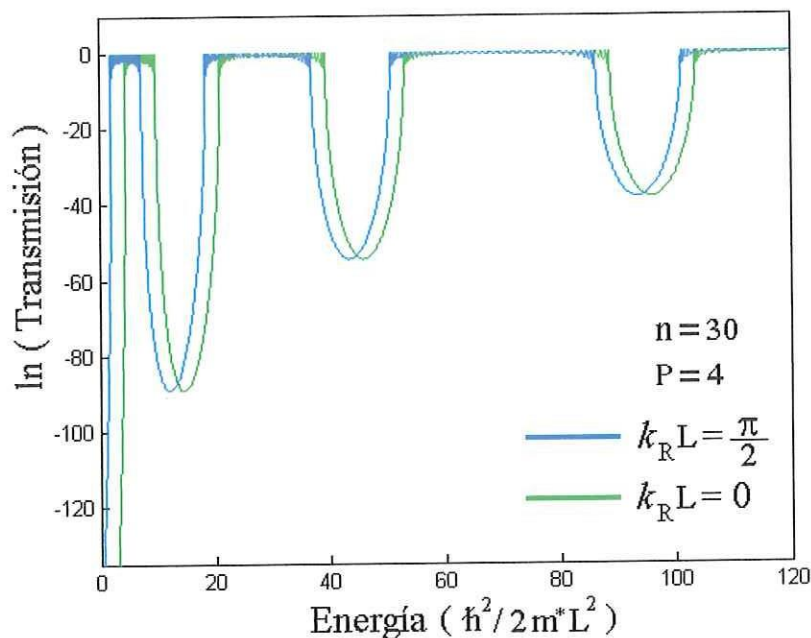


Figura 32. Logaritmo de la transmisión como función de la energía. Parámetros: $P=4$, $k_R L = \frac{1}{2} \pi$, y $n=30$.

En las figuras 31 y 32 se muestra que la transmisión dependiente del espín es la misma para las dos orientaciones de espín, esto se debe a que están incidiendo electrones no polarizados. En la figura 31 se observa que al aumentar el número de barreras de potencial se forma un perfil de brechas en las cuales no existe transmisión de electrones, y estas brechas corresponden en energía para n grandes a las regiones de energías prohibidas de los electrones para el sistema de infinitas barreras de potencial. Además en la figura 32 se observa que el *acoplamiento espín-órbita* produce un corrimiento en energía de los mínimos de la transmisión dependiente del espín, los cuales corresponden en energía a las regiones de energías prohibidas. Este corrimiento en energía pasa también en las bandas de energía de la dispersión de los electrones para el caso de infinitas barreras de potencial. Note que $T^\uparrow = T^\downarrow$ en todos los casos.

Ahora analizaremos el caso de la conductancia dependiente del espín a través de una heteroestructura F/S/F, la cual nos permitirá analizar el transporte de espín polarizado. En nuestro estudio consideraremos que se cambiara la polarización del ferromagneto de la derecha, teniendo configuraciones de ferromagnetos paralelas y antiparalelas.

En la figura 33 mostraremos la conductancia dependiente del espín de los electrones a través de una heteroestructura F/S/F como función de la intensidad del *acoplamiento espín-órbita*.

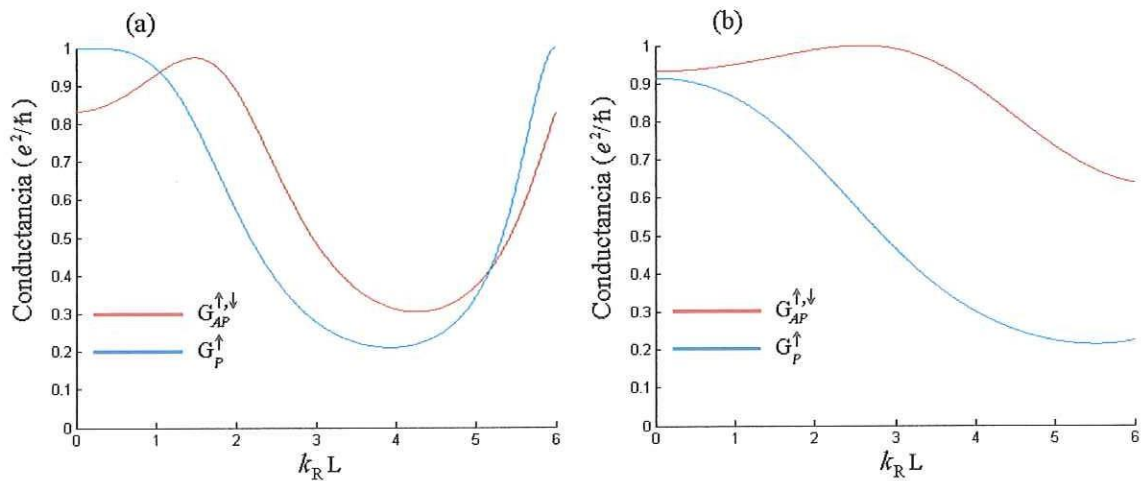


Figura 33. Conductancia dependiente del espín de los electrones a través de una heteroestructura F/S/F como función de la intensidad del acoplamiento espín-órbita. (a) Energía incidente de $E = 28 E_0$ ¹⁶ (b) Energía incidente de $E = 120 E_0$, Parámetros: $P = 4$, $k_v^\uparrow L = 4.4$, $k_v^\downarrow L = 10.5$.

¹⁶ Con $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^* L^2}$.

De la figura 33 se puede ver los cambios que ocurren en la conductancia al modular la intensidad del *acoplamiento espín-órbita*. En las figuras 33(a) y 33(b) se observa que la conductancia en ausencia del *acoplamiento espín-órbita* es máxima cuando se tiene la configuración paralela (esto es, los ferromagnetos fuente y colector tienen la misma orientación de magnetización), lo cual es físicamente consistente ya que los ferromagnetos tienden a dejar pasar los electrones que tengan espín con la misma orientación que estos, y como en ausencia del *acoplamiento espín-órbita* los espines de los electrones no cambian, entonces la conductancia es máxima en esta configuración. Se observa también que conforme aumenta el *acoplamiento espín-órbita* la conductancia disminuye, ya que el espín de los electrones tiende a precesar y los electrones que no tengan una orientación de espín alineada con la del ferromagneto son rechazados. Por otro lado, el máximo de la conductancia en la configuración antiparalela está localizado en la región donde se tiene interacción *espín-órbita* para valores de $k_R L$ alrededor de 1.5 y 2.7, lo anterior para energías de incidencia de $28 E_0$ y $120 E_0$, respectivamente.

Además las figuras 33(a) y 33(b) muestran que si se tiene un *acoplamiento espín-órbita* grande la conductancia en configuración paralela aumenta, lo cual nos dice que el espín de los electrones tiende a precesar de tal manera que cuando los electrones llegan al ferromagneto colector la orientación de sus espines se encuentran alineado con este. En la figura 33(b) se observa que la conductancia en configuración antiparalela es mayor que cuando se tienen configuración paralela en ausencia del *acoplamiento espín-órbita*. Lo anterior se debe a que los electrones con energía de incidencia de $120 E_0$, están en el

rango en el que se tienen las dos bandas de espín del ferromagneto fuente, por lo que los electrones que son inyectados al alambre cuántico podrán tener espín contrario al de la orientación del ferromagneto, haciendo entonces que en la configuración antiparalela se tenga una contribución mayor que en la configuración de ferromagnetos paralela.

En las figuras 34 y 35 se muestra el logaritmo de la conductancia dependiente del espín de los electrones como función de la energía, para sistemas de $n=2$ y de $n=10$ barreras de potencial, respectivamente.

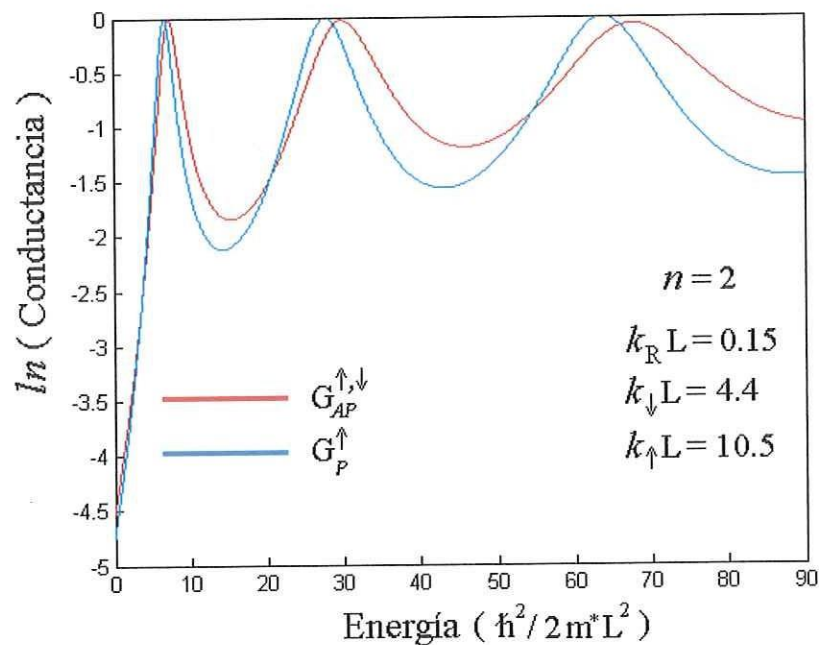


Figura 34. Logaritmo natural de la conductancia dependiente del espín a través de una heteroestructura F/S/F como función de la energía. Parámetros: $P=4$, $k_{\nu}^{\uparrow} L = 4.4$, $k_{\nu}^{\downarrow} L = 10.5$, $k_R L = 0.15$, $n=2$.

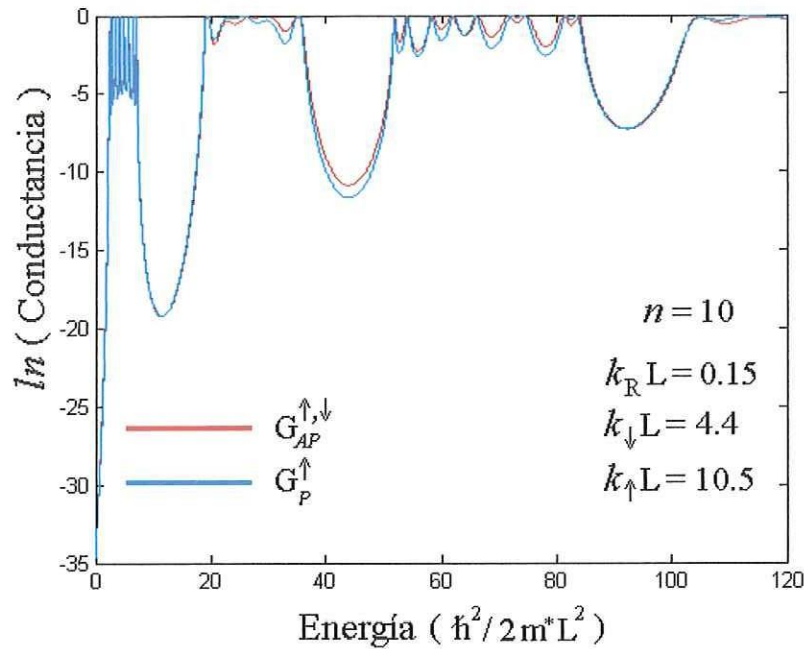


Figura 35. Logaritmo natural de la conductancia dependiente del espín a través de una heteroestructura F/S/F como función de la energía. Parámetros: $P=4$, $k_{\downarrow}^{\uparrow}L=4.4$, $k_{\downarrow}^{\downarrow}L=10.5$, $k_R L=0.15$, $n=10$.

Se observa de las figuras 34 y 35 que siguen existiendo regiones en las cuales la conductancia de los electrones es prácticamente nula sin importar la configuración de los ferromagnetos, y estas regiones corresponden a las mismas que se habían encontrado anteriormente cuando se consideraba la transmisión sin ferromagnetos. Se encuentra también que aunque los mínimos de la conductancia para cualquier configuración están igualmente localizados, estos tienen magnitudes distintas. Se observa además que entre estas regiones de conductancia prácticamente nula existe también cierta estructura de máximos y mínimos de conductancia que no se tenía en ausencia de ferromagnetos, ya que en ese caso las regiones localizadas entre los mínimos de transmisión eran prácticamente de transmisión uniforme.

VIII. CONCLUSIONES

Realizamos un estudio teórico del acoplamiento espín-órbita en un sistema periódico de potenciales tipo delta de *Dirac*. Utilizando el teorema de *Bloch* y haciendo una expansión en ondas planas de la parte periódica de la función de onda, se encuentra (sin utilizar condiciones de frontera), una ecuación explícita para la función de onda del sistema, así como también una ecuación para la dispersión de los electrones en la red periódica. La ecuación de dispersión y la función de onda fueron obtenidas también por otro método independiente, en el cual se utilizaban las condiciones de frontera de *Born – Von Karman*.

Mostramos que el acoplamiento espín-órbita produce un desdoblamiento en la estructura de las bandas de energía (esto es, rompe la degeneración de espín) semejante al que se tiene en ausencia de potenciales periódicos. Este desdoblamiento de las bandas de energía es en K asociada al *momento cristalino* de los electrones, a diferencia del caso en ausencia de potenciales periódicos, en cual el desdoblamiento es en k asociada al *momento del electrón*. El desdoblamiento que ocurre en las bandas de energía es proporcional en ambos casos (ausencia y presencia del potenciales) a la intensidad del acoplamiento espín órbita α_R . Además el acoplamiento espín órbita produce también en ambos casos un corrimiento de las bandas en energía, el cual es proporcional a α_R^2 .

Encontramos también una expresión analítica simple para la densidad de estados de espín del sistema, en la cual se muestra que existe un corrimiento en energía ocasionado por el acoplamiento espín órbita.

Asimismo estudiamos densidad de corriente por espín, obteniéndose una expresión para la corriente de probabilidad por espín. Y mostramos que la corriente electrónica total del sistema es cero. Resultado físicamente consistente ya que en el sistema no hay una inyección neta de electrones, pero existiendo sin embargo, una acumulación de espín finita, originada por el acoplamiento espín-órbita. Esta acumulación de espín se anula en ausencia del acoplamiento espín-órbita y en las regiones en donde se encuentran las energías prohibidas del sistema.

Se calculó además la probabilidad de transmisión dependiente del espín de los electrones para el caso de una red periódica finita de n -barreras de potencial tipo delta de *Dirac* en presencia de acoplamiento espín-órbita con el formalismo de la matriz de transferencia. Se encuentra que al hacer una transformación de la matriz de transferencia, la transmisión y reflexión dependientes del espín a través de n -barreras de potencial puede ser expresada en términos del n -ésimo polinomio de Chebyshev de segundo orden. Se mostró además que haciendo uso de la expresión general que tienen estos polinomios, la transmisión y reflexión dependientes del espín pueden expresarse en términos de funciones sinusoidales. Mostramos que la transmisión de los electrones en el sistema finito es la misma para los electrones con diferente orientación de espín, y que al tener

un numero grande de barreras de potencial se forman regiones en las cuales no existe transmisión de electrones, las cuales corresponden en energía a las regiones de energías prohibidas del sistema de infinitas barreras de potencial.

Por ultimo, calculamos la conductancia de electrones espín polarizados a través de una heteroestructura F/S/F con dos diferentes configuraciones de ferromagnetos. Encontramos que en la configuración paralela la conductancia tiene su máximo en ausencia del acoplamiento espín-órbita y que esta disminuye cuando se tiene acoplamiento espín-órbita en el alambre cuántico, en contraste con la configuración antiparalela en la cual la conductancia tiene su máximo cuando se tiene un acoplamiento espín-órbita finito, ya que el espín de los electrones presesa al transportarse por el alambre cuántico, haciendo que la orientación del espín coincida con la orientación del ferromagneto colector.

IX. BIBLIOGRAFÍA

- [1] *International Technology Roadmap for Semiconductors* by Semiconductor Industry Association, 2005.
- [2] S. A. Wolf, D.D. Awschalom, R.A. Buhrman, J.M. Daughton, S. Von Molnár, M. L. Roukes, A.Y. Chtchelkanova, y D. M. Treger, *Spintronics: A Spin – Based Electronics Vision for the Future*, Science **294**, 1448 (2001).
- [3] Gary A. Prinz, *Magnetoelectronics*, Science **282** 1660 (1998).
- [4] D.D. Awchalom, M. E. Flatté y N. Smarth, *Espintrónica*, Scientific American Latinoamérica, Agosto (2002).
- [5] Y. A. Bychkov y É. I. Rashba, *Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy*, J. Phys. C **17** 6039 (1984).
- [6] G. Engels, J. Lange y H. Luth, *Experimental and theoretical approach to spin splitting in modulation-doped $In_xGa_{1-x}As/InP$ quantum wells*, Phys. Rev. B **55**, R1958 (1997).

- [7] J. Nitta, T. Akazaki, H. takayanagi y T. Enoki, *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 (1997).
- [8] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Sixth Edition, John Wiley and Sons.
- [9] S. Datta y B. Das, *Electronic analog of the electro – optic modulator*, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [10] G. Schmidt, L. W. Molenkamp, A. T. Filip, and B. J. van Wess, *Fundamental obstacle for electrical spin injection from a ferromagnetic metal into a diffusive semiconductor*, Phys. Rev. B **62**, R4790 (2000).
- [11] H. Ohno, D. Chiba, F. Matsukura, T. Omiyao, E. Abe, T. Dietl, Y. Ohno y K. Ohtani, *Electric-field control of ferromagnetism*, Nature **408**, 944 (2000).
- [12] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, y S. Das Sarma, *Spintronics: Fundamentals and Applications*, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [13] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth y D. D. Awschalom, *Room Temperature Spin Memory in Two-Dimensional Electron Gases* , Science **277**, 1284 (1997).

- [14] R. Fiederling, M. Keim, G. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag y L. W. Molenkamp, *Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode*, Nature **402**, 787 (1999).
- [15] Y. Ohno, D. K. Young, B. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno and D. D. Awschalom, *Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure*, Nature **402**, 790 (1999).
- [16] A. V. Moroz y C. H. Barnes, *Effect of the spin – orbit interaction on the band structure and conductance of quasi – one – dimensional systems*, Phys. Rev. B **60**, 14272 (1999).
- [17] F. Mireles y G. Kirczenow, *Ballistic spin – polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires*, Phys. Rev. B **64**, 24426 (2001).
- [18] J. Schliemann, J. C. Egues y D. Loss, *Nonballistics Spin – Field – Effect Transistor*, Phys. Rev. Lett. **90**, 146801 (2003).
- [19] V. I. Perel', S. A. Tarasenko, I. N. Yassievich, S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov y W. Prettl, *Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier*, Phys. Rev. B **67**, 201304(R) (2003).

- [20] M. M. Glazov, P. S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov, V. M. Chistyakov, S. A. Tarasenko, y I. N. Yassievich, *Spin-dependent tunneling in symmetric double-barrier structures*, Phys. Rev. B **71**, 155313 (2005).
- [21] R. Romo y S. Ulloa, *Dynamic polarization tunneling: A spin filtering mechanism*, Phys. Rev. B **72**, 121305(R).
- [22] J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, T. Jungwirth, *Experimental Observation of the Spin-Hall Effect in a Two-Dimensional Spin-Orbit Coupled Semiconductor System*, Phys. Rev. Lett. **94**, 047204 (2005).
- [23] Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, D.D. Awschalom, *Observation of the Spin-Hall Effect in Semiconductors*, Science **306**, 1910 (2004).
- [24] M. I. Dyakanov y V.I. Perel, *Intrinsic Spin Hall Edges*, Sov. Phys. JETP **33**, 467 (1971).
- [25] J. E. Hirsch, *Spin Hall Effect*, Phys. Rev. Lett. **83**, 1834 (1999).
- [26] D. Bercioux, M. Governale, V. Cataudella, and V. Marigliano, *Rashba-Effect-Induced Localization in Quantum Networks*, Phys. Rev. Lett. **93**, 6802 (2004).

- [27] X. F. Wang y P. Vasilopoulos, *Spin – dependent transmission in waveguides with periodically modulated strength of the spin – orbit interaction*, Appl. Phys. Lett. **83**, 5 (2003).
- [28] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca y F. Basan, *Spin – split subbands and magneto – oscillations in III – V asymmetric heterostructures*, Phys. Rev. B **50**, 8523 (1994).
- [29] T. Matsuyama, R. Kürsten, C. Messner, and Merkt, *Rashba spin splitting in inversion layers on p-type bulk InAs*, Phys. Rev. B **61**, 15588 (2000).
- [30] Y. Sato, T. Kita, S. Gozu, S. Yamada, *Large spontaneous spin splitting in gate-controlled two-dimensional electron gases at normal $In_{0.75}Ga_{0.25}As/In_{0.75}Al_{0.25}As$ heterojunctions*, J. Appl. Phys. **89**, 8017 (2001).
- [31] G. Dresselhaus, *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [32] S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, Petra Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, *Experimental Separation of Rashba and Dresselhaus Spin Splittings in Semiconductor Quantum Wells*, Phys. Rev. Lett. **92**, 256601 (2004).

- [33] T. J. Thornton, M. Pepper, H. Ahmed, D. Andrews, y G. Davies, *One-Dimensional Conduction in the 2D Electron Gas of a GaAs-AlGaAs Heterojunction*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1198 (1986).
- [34] F. Domínguez – Adame, *Relativistic and nonrelativistic Kronig – Penney models*, Am. J. Phys. **55**, 11 (1987).
- [35] N. Ashcroft y N. Mermin, *Solid State Physics*, Thomson Learning.
- [36] J. H. Davies, *The physics of low - dimensional semiconductor: an introduction*, Cambridge University Press.
- [37] J. C. Wolfe, *Summary of the Kronig – Penney electron*, Am. J. Phys. **46**, 10 (1978).
- [38] F. Mireles y G. Kirczenow, *Coherent spin – valve phenomena and electrical spin injection in ferromagnetic/semiconductor/ferromagnetic junctions*, Phys. Rev. B **66**, 214415 (2002).
- [39] M. Governale y U. Zuelicke, *Spin accumulation in quantum wires with strong Rashba spin-orbit coupling*, Phys. Rev. B **66**, 073311 (2002).

- [40] Supriyo Datta, *Electronic Transport in Mesoscopic System*, Cambridge.
- [41] D. Griffiths y N. Taussig, *Scattering from a locally periodic potential*, Am. J. Phys. **60**, 10 (1992).
- [42] M. Spiegel, *Mathematical Handbook*, McGraw-Hill.
- [43] P. Pereyra y E. Castillo, *Theory of finite systems: General expressions and various simple and illustrative examples*, Phys. Rev. B **65**, 205120 (2002).
- [44] R. Shankar, *Principes of Quantum Mechanics*, Second Edition, Plenum Press.

Apéndice A:

Hamiltoniano para el acoplamiento espín órbita

En este apéndice deducimos el término genérico del Hamiltoniano *espín-órbita*, el cual se obtiene al describir el movimiento de un electrón en un potencial eléctrico haciendo uso de la *ecuación de Dirac*¹⁷:

$$(c\vec{\alpha}\cdot\vec{P} + mc^2\vec{\beta})|\Psi\rangle = i\hbar\frac{\partial|\Psi\rangle}{\partial t} \quad (\text{A1})$$

Note que la ecuación de *Dirac* es una ecuación diferencial de primer orden en el espacio y en el tiempo. En esta ecuación c es la velocidad de la luz, y $|\Psi\rangle$ es un vector de cuatro componentes llamado *espinor de Lorentz*. Las matrices $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ están definidas como:

$$\vec{\alpha} = \begin{bmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{bmatrix} \quad \text{y} \quad \vec{\beta} = \begin{bmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{bmatrix},$$

donde $\vec{\sigma}$ es el vector de las matrices de 2x2 e I es la matriz identidad de 2x2.

Aplicamos ahora la ecuación de *Dirac* para el caso en el cual un electrón experimenta un potencial de la forma:

$$\Phi(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad (\text{A2})$$

¹⁷ Véase por ejemplo: *Principes of Quantum Mechanics*, de R. Shankar, pág. 563 [44].

tal como sucede en el átomo de Hidrógeno, entonces la ecuación de *Dirac* (A1) será modificada por:

$$\left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{P} + mc^2\vec{\beta} + \Phi \right) |\Psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t}$$

Considerando los eigenestados de energía: $|\Psi(r,t)\rangle = e^{-iEt/\hbar} |\Psi(r)\rangle$,

Entonces tenemos la ecuación de *Dirac* independiente del tiempo:

$$\left(c\vec{\alpha}\cdot\vec{P} + mc^2\vec{\beta} + \Phi \right) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (\text{A3})$$

Escribiendo $|\Psi\rangle$ como: $|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} \chi \\ \varphi \end{pmatrix}$ (A4)

Donde χ y φ son espinores de dos componentes. La ecuación (A3), con $\vec{\alpha}$ y $\vec{\beta}$ explicitas se puede escribir como:

$$\begin{bmatrix} E - \Phi - mc^2 & -c\vec{\sigma}\cdot\vec{P} \\ -c\vec{\sigma}\cdot\vec{P} & E - \Phi + mc^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \chi \\ \varphi \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A5})$$

que conduce a las siguientes dos ecuaciones acopladas:

$$(E - \Phi - mc^2)\chi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{P}\varphi = 0$$

$$(E - \Phi + mc^2)\varphi - c\vec{\sigma}\cdot\vec{P}\chi = 0$$

De la segunda encontramos: $\varphi = (E - \Phi + mc^2)^{-1} c \vec{\sigma} \cdot \vec{P} \chi$, que sustituyendo en la primera se obtiene:

$$(E - \Phi - mc^2) \chi = c \vec{\sigma} \cdot \vec{P} \left(\frac{1}{E - \Phi + mc^2} \right) c \vec{\sigma} \cdot \vec{P} \chi. \quad (\text{A5})$$

Si hacemos $E - \Phi + mc^2 \approx 2mc^2$, y definimos $E_S = E - mc^2$, encontramos:

$$E_S \chi = \left[\frac{(\vec{\sigma} \cdot \vec{P})^2}{2m} + \Phi \right] \chi = \left[\frac{p^2}{2m} + \Phi \right] \chi, \quad (\text{A6})$$

que es justamente la ecuación no relativista de *Schrödinger*. Hay que notar que si el Hamiltoniano es del orden de $(v/c)^2$ es cuadrático en el momento.

Para observar la estructura fina del átomo de Hidrógeno debemos de ir a ordenes de $(v/c)^4$. Para esto expandimos $(E - \Phi + mc^2)^{-1}$ como:

$$\frac{1}{E - \Phi + mc^2} = \frac{1}{E_S - \Phi + 2mc^2} = \frac{1}{2mc^2} \left(1 + \frac{E_S - \Phi}{2mc^2} \right)^{-1}$$

Entonces

$$\frac{1}{E - \Phi + mc^2} \cong \frac{1}{2mc^2} \left(1 - \frac{E_S - \Phi}{2mc^2} \right) = \frac{1}{2mc^2} - \frac{E_S - \Phi}{4m^2 c^4} \quad (\text{A7})$$

Por lo que sustituyendo la ecuación (A7) en la ecuación (A5) se obtiene:

$$E_S \chi = \left[\frac{p^2}{2m} + \Phi - \frac{\vec{\sigma} \cdot \vec{P} (E_S - \Phi) \vec{\sigma} \cdot \vec{P}}{4m^2 c^2} \right] \chi \quad (\text{A8})$$

Por otro lado,

$$(E_s - \Phi) \bar{\sigma} \cdot \bar{P} \chi = \bar{\sigma} \cdot \bar{P} (E_s - \Phi) \chi + \bar{\sigma} \cdot [E_s - \Phi, \bar{P}] \chi \quad (\text{A9})$$

De las ecuaciones (A9) y (A6) tenemos que:

$$(E_s - \Phi) \bar{\sigma} \cdot \bar{P} \chi = (\bar{\sigma} \cdot \bar{P}) \frac{p^2}{2m} \chi + \bar{\sigma} \cdot [\bar{P}, \Phi] \chi \quad (\text{A10})$$

Sustituyendo (A10) en (A6) encontramos:

$$E_s \chi = \left[\frac{p^2}{2m} + \Phi - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - \frac{(\bar{\sigma} \cdot \bar{P})(\bar{\sigma} \cdot [\bar{P}, \Phi])}{4m^2 c^2} \right] \chi$$

Entonces

$$E_s \chi = \left[\frac{p^2}{2m} + \Phi - \frac{p^4}{8m^3 c^2} - \frac{\bar{P} \cdot [\bar{P}, \Phi]}{4m^2 c^2} - \frac{i \bar{\sigma} \cdot \bar{P} \times [\bar{P}, \Phi]}{4m^2 c^2} \right] \chi = H \chi \quad (\text{A11})$$

De la ecuación (A11) se observa que el tercer término:

$$H_T = -\frac{p^4}{8m^3 c^2} \quad (\text{A12})$$

Es la corrección relativista de la energía cinética.

El cuarto término de la ecuación (A11) es conocido como el término de *Darwin*, y puede ser expresado como:

$$H_D = \frac{\bar{P} \cdot [\bar{P}, \Phi]}{4m^2 c^2} = \frac{1}{4m^2 c^2} \left([\bar{P} \cdot \bar{P}, \Phi] - 2\bar{P} \cdot [\bar{P}, \Phi] \right) = -\frac{1}{4m^2 c^2} [\bar{P} \cdot [\bar{P}, \Phi]]$$

Usando $[\bar{P}, f(x)] = -i\hbar \frac{df(x)}{dx}$ dos veces, encontramos:

$$H_D = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} \nabla^2 \Phi = \pi \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 \delta(\vec{r}) \quad (\text{A13})$$

El quinto término de la ecuación (A11) se puede expresar como:

$$\begin{aligned} H_{SO} &= -\frac{i\vec{\sigma} \cdot \vec{P} \times [\bar{P}, \Phi]}{4m^2c^2} = -\frac{i\vec{\sigma} \cdot \vec{P} \times [-i\hbar \nabla \Phi]}{4m^2c^2} \\ &= \frac{\hbar}{4m^2c^2} \nabla \Phi \cdot (\vec{\sigma} \times \vec{P}), \end{aligned} \quad (\text{A14})$$

que usando la expresión (A2) para el potencial encontramos:

$$H_{SO} = -\frac{e^2 \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{P} \times \vec{r}}{4m^2c^2r^3} = \frac{e^2 \hbar \vec{\sigma} \cdot \vec{r} \times \vec{P}}{4m^2c^2r^3},$$

por lo tanto,

$$H_{SO} = \frac{e^2}{2m^2c^2r^3} \vec{S} \cdot \vec{L} \quad (\text{A15})$$

Que es conocido como el Hamiltoniano del acoplamiento *espín - órbita*.

Apéndice B:

Cálculo de la función periódica $U^\sigma(x)$

En este apéndice calcularemos explícitamente la parte periódica de la función de onda $U^\sigma(x)$, la cual está expresada por la ecuación (21):

$$U^\sigma(x) = \left(\frac{P}{\pi L} \right) \sum_{n=-\infty}^{\infty} U^\sigma(nL) \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp[ik(x-nL)]}{k_0^2 - (k + K_\sigma)^2} dk \quad (\text{B1})$$

La integral en la ecuación (B1) se resuelve utilizando el teorema del residuo, el cual dicta que:

$$\oint_{\Gamma} f(z) dz = 2\pi i \sum_j \text{Res}_j f(z) \quad (\text{B2})$$

donde $\text{Res}_j f(z) = \lim_{z \rightarrow a_j} (z - a_j) f(z)$, a_j es el j -ésimo polo de $f(z)$ encerrado en la curva Γ . Suponemos que k_0 tiene una pequeña parte imaginaria positiva $i\varepsilon$, y elegimos el contorno mostrado en la figura b1.

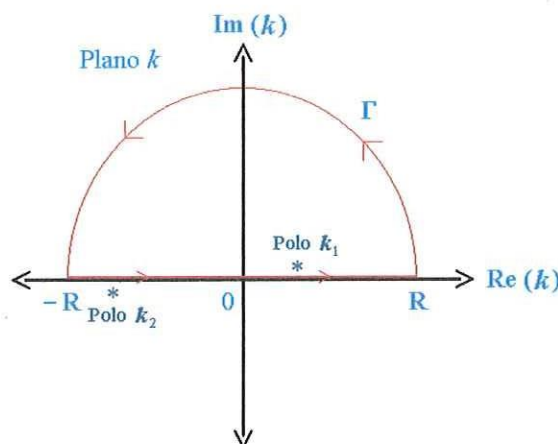


Figura b1. Contorno elegido para resolver la integral de la ecuación (B1).

La integral (B2) la podemos separar en las trayectorias:

$$\oint_{\gamma} f(z) dz = \int_{-R}^R f(z) dz + \int_{\Gamma} f(z) dz = 2\pi i \sum_j \text{Res}_j f(z) \quad (\text{B3})$$

Por lo cual la integral de la ecuación (B1) se puede expresar como:

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{-R}^R e^{imk} H(k) dk = 2\pi i \sum_j \text{Res}_j [e^{imk} H(k)] - \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma} e^{imk} H(k) dk \quad (\text{B4})$$

Donde $m = x - nL$, $H(k) = \frac{1}{(k - k_1)(k - k_2)}$, $k_{1,2} = \pm k_0 - \kappa_{\sigma} \pm i\varepsilon$, con $k \in \mathbb{C}$.

Encontraremos ahora el valor de la integral sobre la trayectoria Γ en la ecuación (B4).

Sea $k = Re^{i\theta}$, entonces $\int_{\Gamma} e^{imk} H(k) dk = \int_0^{\pi} e^{imRe^{i\theta}} H(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} d\theta$,

Dado que, en general: $\left| \int f(z) dz \right| \leq \int |f(z)| dz$, entonces

$$\left| \int_0^{\pi} e^{imRe^{i\theta}} H(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} d\theta \right| \leq \int_0^{\pi} \left| e^{imRe^{i\theta}} H(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} \right| d\theta$$

Por otro lado,

$$\int_0^{\pi} \left| e^{imRe^{i\theta}} H(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} \right| d\theta = \int_0^{\pi} \left| e^{imR\cos\theta - mR\sin\theta} H(Re^{i\theta}) iRe^{i\theta} \right| d\theta = \int_0^{\pi} e^{-mR\sin\theta} |H(Re^{i\theta})| R d\theta$$

Como $H(k) = \frac{P(k)}{Q(k)}$ y el grado del polinomio $Q(k)$ es mayor que el de $P(k)$ en una

unidad o más, entonces $|H(k)| \leq \frac{M}{R^l}$, donde $l > 0$ y M constantes.

Entonces se debe satisfacer que:

$$\int_0^{\pi} e^{-mR \sin \theta} |H(Re^{i\theta})| R d\theta \leq \frac{M}{R^{l-1}} \int_0^{\pi} e^{-mR \sin \theta} d\theta = \frac{2M}{R^{l-1}} \int_0^{\pi/2} e^{-mR \sin \theta} d\theta .$$

Ahora como $\sin \theta \geq \frac{2\theta}{\pi}$ para $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{2}$, como se muestra en la figura b2.

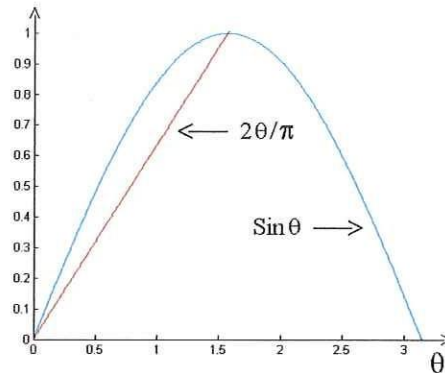


Figura b2.

Esto implica que

$$\frac{2M}{R^{l-1}} \int_0^{\pi/2} e^{-mR \sin \theta} d\theta \leq \frac{2M}{R^{l-1}} \int_0^{\pi/2} e^{-2mR\theta/\pi} d\theta = \frac{\pi M}{mR^l} (1 - e^{-mR}) ,$$

tomando el limite cuando $R \rightarrow \infty$,

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{\Gamma} e^{imk} H(k) dk \leq \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\pi M}{mR^l} (1 - e^{-mR}), \quad (\text{B5})$$

Con la condición de que: $\int_{\Gamma} e^{imk} H(k) dk = 0$, se debe de cumplir que $m \geq 0$.

Entonces de (4) encontramos que:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{i(x-nL)k}}{(k-k_0+K_{\sigma}+i\varepsilon)(k+k_0+K_{\sigma}-i\varepsilon)} dk = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} 2\pi i \left[\frac{e^{i(x-nL)(k_0-K_{\sigma})}}{2k_0+2i\varepsilon} \right] \quad (\text{B6})$$

Como $U^{\sigma}(x)$ es periódica, entonces es suficiente encontrar $U^{\sigma}(x)$ dentro de la celda unitaria $[0, L]$, para $0 < x < L$, y también como $U^{\sigma}(nL) = U^{\sigma}(0)$, de (B1) y (B6) se obtiene:

$$U^{\sigma}(x) = i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^{\sigma}(0) \exp(-iK_{\sigma}x) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp(iK_{\sigma}nL) \exp(ik_0|x-nL|), \quad (\text{B7})$$

que se puede escribir como,

$$U^{\sigma}(x) = i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^{\sigma}(0) \exp(-iK_{\sigma}x) \left[\sum_{n=-\infty}^0 \exp(iK_{\sigma}nL) \exp(ik_0(x-nL)) \right] \\ + i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^{\sigma}(0) \exp(-iK_{\sigma}x) \left[\sum_{n=1}^{\infty} \exp(iK_{\sigma}nL) \exp(-ik_0(x-nL)) \right]$$

Si en la primera sumatoria hacemos el cambio de variable; $\tilde{n} = -n$ se obtiene,

$$U^\sigma(x) = i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^\sigma(0) \exp(-iK_\sigma x) \left[\exp(ik_0 x) \sum_{\tilde{n}=0}^{\infty} \exp(-i\tilde{n}L(k_0 - K_\sigma)) \right] \\ + i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^\sigma(0) \exp(-iK_\sigma x) \left[\exp(-ik_0 x) \sum_{n=1}^{\infty} \exp(inL(k_0 + K_\sigma)) \right]$$

Usando la identidad de la serie geométrica: $\sum_{n=1}^{\infty} r^n = \frac{r}{1-r}$, para $0 < r < 1$, con

$r = e^{ix}$ $\left(\sum_{n=1}^{\infty} e^{inx} = \frac{1}{e^{-ix} - 1} \right)$, encontramos que:

$$U^\sigma(x) = i \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^\sigma(0) \exp(-iK_\sigma x) \left[\frac{\exp(ik_0 x)}{1 - \exp(i(k_0 - K_\sigma)L)} + \frac{\exp(-ik_0 x)}{\exp(-i(k_0 + K_\sigma)L) - 1} \right]$$

Simplificando, obtenemos finalmente,

$$\boxed{U^\sigma(x) = \left(\frac{P}{k_0 L} \right) U^\sigma(0) \exp(-iK_\sigma x) \left[\frac{\exp(iK_\sigma L) \sin(k_0 x) + \sin(k_0(L-x))}{\cos(K_\sigma L) - \cos(k_0 L)} \right]} \quad (\text{B8})$$

Que es la ecuación (22) del capítulo III.

Apéndice C:

Cálculo del espectro de energía: Método con condiciones de frontera periódicas

En el capítulo III se obtuvo de forma explícita la ecuación de dispersión y función de onda del sistema por un método basado en la transformada de *Fourier* y el teorema de *Bloch*, para lo cual no es necesario utilizar las condiciones de frontera (F. Domínguez-Adame [34]). En este apéndice encontraremos la ecuación de dispersión del sistema por un método distinto el cual utiliza las condiciones de frontera de periodicidad del sistema, conocidas como las condiciones de *Born-Von Karman* (J. C. Wolfe [37]).

Por el teorema de *Bloch* se sabe que la función de onda para un sistema periódico tiene la forma:

$$\psi_+^\sigma(x) = e^{+iKx}U^\sigma(x), \quad (C1)$$

donde $U^\sigma(x)$ satisface $U^\sigma(x) = U^\sigma(x+nL)$, y K es el número de onda correspondiente al "momento cristalino" $\hbar K$.

Debido a que $\psi_+^\sigma(x)$ es una función de *Bloch*, satisface las condiciones de frontera de *Born-Von Karman*:

$$\psi_+^\sigma(x \pm L) = \exp(\pm iKL)\psi_+^\sigma(x) \quad (C2)$$

$$\frac{d\psi_+^\sigma}{dx}(x \pm L) = \exp(\pm iKL) \frac{d\psi_+^\sigma}{dx}(x) \quad (C3)$$

Por lo tanto es suficiente encontrar $\psi_+^\sigma(x)$ dentro de la celda unitaria $[0, L]$ y extenderla para todos los valores de x por medio de la ecuación (C1).

Una condición requerida es que la función de onda debe de ser continua en todos los puntos del espacio. Por lo que de la ecuación (C2) tenemos:

$$\psi_+^\sigma(0^+) = \exp(-iKL)\psi_+^\sigma(L^-), \quad (C4)$$

donde $\psi_+^\sigma(0^+)$ denota el límite derecho en 0 y $\psi_+^\sigma(L^-)$ denota el límite izquierdo en L.

Ahora se deben de encontrar las condiciones de frontera en la derivada de la función de onda de este sistema periódico de potenciales delta de *Dirac* incluyendo la interacción *espín-órbita*. Para lo cual es necesario integrar la ecuación de *Schrödinger* (ecuación (14)) en un intervalo de $[-\varepsilon, \varepsilon]$ con una barrera de potencial entre este intervalo, como se muestra en la figura c1,

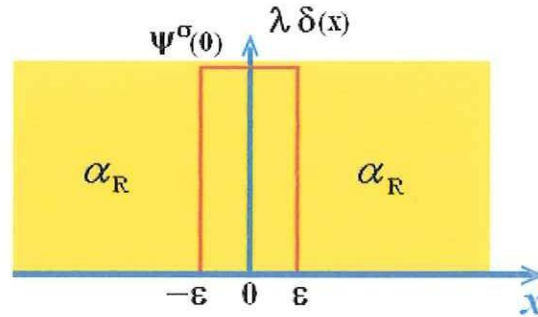


Figura c1. Esquema para la condición de discontinuidad en la derivada en $x=0$.

que conduce a:

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2 \psi_+^{\sigma}(x)}{dx^2} dx = \frac{-2m^* E}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi_+^{\sigma}(x) dx + \frac{2m^*}{\hbar^2} \lambda \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \psi_+^{\sigma}(x) dx - \frac{2m^* i \alpha_R}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d\psi_+^{\sigma}}{dx} dx .$$

Integrando las ecuaciones anteriores, y usando la aproximación $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi_+^{\sigma}(x) dx \approx 2\varepsilon \psi_+^{\sigma}(0)$

se obtiene

$$\frac{d\psi_+^{\sigma}(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi_+^{\sigma}(-\varepsilon)}{dx} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \lambda \psi_+^{\sigma}(0) - \frac{4m^* \varepsilon}{\hbar^2} E \psi_+^{\sigma}(0) - \frac{2m^* i \alpha_R}{\hbar^2} [\psi_+^{\sigma}(\varepsilon) - \psi_+^{\sigma}(-\varepsilon)] ,$$

que al tomar el límite $\varepsilon \rightarrow 0$, conduce a:

$$\frac{d\psi_+^{\sigma}(0^+)}{dx} - \frac{d\psi_+^{\sigma}(0^-)}{dx} = \frac{2m^* \lambda}{\hbar^2} \psi_+^{\sigma}(0) . \quad (C5)$$

Se puede observar que esta condición de frontera es la misma que para el caso en el que no se tiene un acoplamiento espín-órbita ($\alpha_R = 0$). De la ecuación (C3) y (C5) tenemos:

$$\frac{d\psi_+^\sigma(0^+)}{dx} = \exp(-iKL) \frac{d\psi_+^\sigma(L^-)}{dx} + \frac{2P}{L} \psi_+^\sigma(0^+), \quad (C6)$$

$$\text{con } P = \frac{m^* \lambda L}{\hbar^2}.$$

Analizaremos ahora la solución para la ecuación de *Schrödinger* dentro de la celda unitaria $[0, L]$ es:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_+^\sigma(x) + 2i\gamma_\sigma k_R \frac{d}{dx} \psi_+^\sigma(x) + k_E^2 \psi_+^\sigma(x) = 0, \quad (C7)$$

esto es, entendiéndose que $\psi_+^\sigma(x)$ esta restringida al intervalo $(0, L)$.

La solución de la ecuación (C7) para $\psi_+^\sigma(x)$ dentro de la celda unitaria tiene la forma general:

$$\psi_+^\sigma(x) = A^\sigma \exp(i\mu_\sigma x) + B^\sigma \exp(-i\tau_\sigma x), \quad (C8)$$

donde

$$\mu_\sigma = \begin{cases} k_-, & \sigma = \uparrow \\ k_+, & \sigma = \downarrow \end{cases} \quad \text{y} \quad \tau_\sigma = \begin{cases} k_+, & \sigma = \uparrow \\ k_-, & \sigma = \downarrow \end{cases},$$

$$\text{con } k_{\pm} = k_0 \pm k_R, \quad k_0 = \sqrt{k_E^2 + k_R^2}, \quad k_R = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2}, \quad \text{y } k_E^2 = \frac{2m^* E}{\hbar^2}.$$

Utilizando el teorema de *Bloch* y las condiciones de frontera de *Born-Von Karman* se obtiene el siguiente sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} 1 - \exp(i[\mu_{\sigma} - K]L) & 1 - \exp(-i[\tau_{\sigma} + K]L) \\ i\mu_{\sigma} \left\{ 1 - \exp(i[\mu_{\sigma} - K]L) - \frac{2P}{L} \right\} & i\tau_{\sigma} \left\{ 1 - \exp(-i[\tau_{\sigma} + K]L) + \frac{2P}{L} \right\} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^{\sigma} \\ B^{\sigma} \end{bmatrix} = 0 \quad (\text{C9})$$

Como se quiere encontrar la solución no trivial del sistema, entonces el determinante de la matriz de coeficientes A^{σ} y B^{σ} debe de ser igual a cero.

Con la condición anterior y realizando manipulaciones algebraicas, se obtiene la ecuación de dispersión de tipo “*Kronig-Penney*” con *acoplamiento espín-órbita*:

$$\boxed{\cos[(K + \gamma_{\sigma} k_R)L] = \cos(k_0 L) + \left(\frac{P}{k_0 L}\right) \sin(k_0 L)} \quad (\text{C10})$$

Encontrando los valores de A^{σ} y B^{σ} de la ecuación (C9) y sustituyéndolos en la ecuación (C8) encontramos que la función de onda del sistema esta dada explícitamente por:

$$\boxed{\psi_{+}^{\sigma}(x) = \chi_0 \left[e^{i(K + \gamma_{\sigma} k_R)L} \sin(k_0 L) + \sin(k_0 [L - x]) \right] e^{-i\gamma_{\sigma} k_R x}} \quad (\text{C11})$$

donde χ_0 es la constante de normalización. Las ecuaciones (C10) y (C11) resultan ser idénticas las que se encontraron en el capítulo III (ecuación (23) y (24)) por un método distinto en el cual no fue necesario utilizar las condiciones de frontera periódicas de *Born-Von Karman*, pero es basado en el uso de la transformada de *Fourier* y el teorema de *Bloch*.

Apéndice D:

Densidad de corriente por espín

En este apéndice se encontrara la expresión que nos permite calcular la densidad de corriente por espín (F. Mireles y G. Kirczenow [28]).

La ecuación de continuidad unidimensional es:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{dJ}{dx} = 0 \quad (\text{D1})$$

Donde $\rho = e|\Psi|^2$ es la densidad de electrones, J es la densidad de corriente de probabilidad.

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo es: $H\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$

Y su ecuación adjunta es: $H^\dagger \Psi^\dagger(x,t) = -i\hbar \frac{\partial \Psi^\dagger(x,t)}{\partial t}$ (D2)

Como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = e \frac{\partial |\Psi(x,t)|^2}{\partial t} = e \frac{\partial}{\partial t} [\Psi(x,t)\Psi^\dagger(x,t)] = e \left(\Psi(x,t) \frac{\partial \Psi^\dagger(x,t)}{\partial t} + \Psi^\dagger(x,t) \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \right) \quad (\text{D3})$$

Entonces sustituyendo (D2) en (D3) se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \frac{e}{i\hbar} [\Psi^\dagger(x,t)H\Psi(x,t) - \Psi(x,t)H^\dagger\Psi^\dagger(x,t)] \quad (\text{D4})$$

El Hamiltoniano para el sistema que estamos analizando es de la forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} I + V(x)I - i\alpha_R \sigma_z \frac{d}{dx} \quad (\text{D5})$$

Por lo que al sustituirlo en la ecuación (D4) y al realizar los cálculos correspondientes se obtiene:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{d}{dx} \left[\frac{e\hbar}{2mi} \left(\Psi^\dagger(x,t) \frac{d\Psi(x,t)}{dx} - \frac{d\Psi^\dagger(x,t)}{dx} \Psi(x,t) \right) + \frac{e\alpha_R}{\hbar} \left(\Psi^\dagger(x,t) \sigma_z \Psi(x,t) \right) \right] = 0$$

Al comparar la ecuación anterior con la ecuación (D1), se obtiene finalmente la expresión para la densidad de corriente por espín del sistema:

$$\boxed{J(x) = \frac{e\hbar}{2mi} \left(\Psi^\dagger(x,t) \frac{d\Psi(x,t)}{dx} - \frac{d\Psi^\dagger(x,t)}{dx} \Psi(x,t) \right) + \frac{e\alpha_R}{\hbar} \left(\Psi^\dagger(x,t) \sigma_z \Psi(x,t) \right)} \quad (\text{D6})$$

Que corresponde a la ecuación (29) (capítulo IV).

Apéndice E:

Condición de frontera para las interfases F/S y S/F

En este apéndice se encontrarán las condiciones de frontera de la derivada de la función de onda para la unión de las regiones F/S y S/F.

Debido a que las barreras de potenciales tipo delta de *Dirac* presentan una discontinuidad en la derivada, es necesario integrar la ecuación de *Schrödinger* (ecuación (14)) en un intervalo de $[-\varepsilon, \varepsilon]$ con una barrera de potencial en este intervalo entre las regiones del ferromagneto y semiconductor, ya que el *acoplamiento espín-órbita* dependiente de la posición inicia en esa interfase, como se muestra en la figura e1.

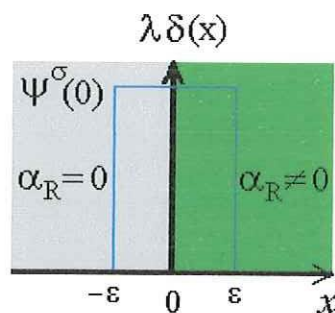


Figura e1. Esquema de la condición de frontera en la derivada en la interfase F/S con $\alpha_R \neq 0$.

Entonces se tiene,

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2 \psi^\sigma(x)}{dx^2} dx = \frac{-2m^* E}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi^\sigma(x) dx + \frac{2m^*}{\hbar^2} \lambda \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \delta(x) \psi^\sigma(x) dx$$

$$- \frac{i\gamma_\sigma m^*}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \alpha(x) \frac{d\psi^\sigma(x)}{dx} dx - \frac{i\gamma_\sigma m^*}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi^\sigma(x) \frac{d\alpha(x)}{dx} dx$$

Integrando las ecuaciones anteriores, y usando la aproximación $\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \psi^\sigma(x) dx \approx 2\varepsilon \psi^\sigma(0)$

se obtiene:

$$\frac{d\psi^\sigma(\varepsilon)}{dx} - \frac{d\psi^\sigma(-\varepsilon)}{dx} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \lambda \psi^\sigma(0) - \frac{4m^* \varepsilon}{\hbar^2} E \psi^\sigma(0) - \frac{i\gamma_\sigma m^* \alpha_R}{\hbar^2} \psi^\sigma(\varepsilon)$$

Si tomamos el límite cuando $\varepsilon \rightarrow 0$, encontramos la condición de frontera para la derivada en la interfase F/S, la cual esta dada por:

$$\left[\frac{d}{dx} + i\gamma_\sigma k_R \right] \psi_S^\sigma(x) \Big|_{x=0} = \left[\frac{d}{dx} + \frac{2m^* \lambda}{\hbar^2} \right] \psi_F^\sigma(x) \Big|_{x=0} \quad (\text{E1})$$

Siguiendo este procedimiento, se calcula también la condición de frontera para la derivada de la función de onda en la interfase S/F, encontrando:

$$\left[\frac{d}{dx} - \frac{2m^* \lambda}{\hbar^2} \right] \psi_C^\sigma(x) \Big|_{x=n+1} = \left[\frac{d}{dx} + i\gamma_\sigma k_R \right] \psi_S^\sigma(x) \Big|_{x=n+1} \quad (\text{E2})$$

Las ecuaciones (E1) y (E2) son las ecuaciones correspondientes a las (71) y (72) utilizadas en el capítulo VI.