



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento de Física

Relajación de espín en puntos cuánticos acoplados cuasi-unidimensionales

Trabajo de Tesis para optar por el título de
Doctor de la Universidad de Buenos Aires en el área Ciencias Físicas.

por Lic. Carla L. Romano

Director de Tesis: Dr. Pablo I. Tamborenea

Lugar de Trabajo: Universidad de Buenos Aires-FCEyN,
Departamento de Física.

Buenos Aires, Diciembre 2008

*A mi familia, amigas y amigos quienes
hicieron posible este trabajo, dándome la
posibilidad de crecer como científica y
aportar un granito de arena a la humanidad.*

A todos ustedes simplemente GRACIAS...

Resumen

En esta tesis abordamos temas relacionados con la interacción espín-órbita y la interacción coulombiana en sistemas *nanowhiskers* de semiconductores. Consideramos para nuestro problema sistemas de dos puntos cuánticos acoplados cuasi-unidimensionales compuestos de antimonio de indio (AlInSb/InSb), arseniuro de galio (AlGaAs/GaAs) y arseniuro de indio (AlInAs/InAs). Cada punto cuántico tendrá un ancho de 30 nm separados por una barrera de 3 nm.

Nos propusimos estudiar el caso de un electrón en dicha estructura y compararlo con el caso de dos electrones. Comenzamos obteniendo las expresiones de los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus en la geometría de puntos cuánticos cuasi-unidimensionales. Estudiamos los niveles de energía y los autoestados del Hamiltoniano del sistema en función del campo magnético y la separación entre los puntos cuánticos. Con estos autoestados calculamos el factor- g y el valor medio de la proyección z del espín $\langle S_z \rangle$ en función del parámetro de Rashba para distintos semiconductores y variando el ancho de los puntos cuánticos y la separación de los mismos.

En los cálculos señalados se analizó la influencia de la interacción espín-órbita (SO) de tipo Rashba y de tipo Dresselhaus. Estos efectos de SO pueden resultar favorables para la fabricación de inyectores de espín y detectores basados en barreras de semiconductores no magnéticos. Encontramos que el efecto de Rashba es siempre mayor que el de Dresselhaus para los parámetros utilizados. Para el caso de dos electrones estudiamos la influencia de la interacción coulombiana.

Posteriormente, calculamos los tiempos de relajación de espín debido a la interacción electrón-fonón tanto para un electrón como para dos. Para este cálculo consideramos las distintas clases de fonones debido a los potenciales de deformación, piezoeléctrico acústico longitudinal, piezoeléctrico acústico transverso 1 y transverso 2. Estudiamos las transiciones entre estados en función del campo magnético y de la temperatura.

En todos los casos planteamos el Hamiltoniano correspondiente y lo diagonalizamos para obtener los niveles de energía y los autoestados. Con éstos calculamos las tasas de relajación utilizando la regla de oro de Fermi.

Palabras clave: interacción espín-órbita, puntos cuánticos, relajación de espín, interacción coulombiana.

Abstract

In this thesis we deal with problems related with spin-orbit and coulomb interaction in semiconductor nanowhisker systems. For our problem we consider systems consisting of quasi-undimensional double quantum dots of indium antimonide (AlInSb/InSb), gallium arsenide (AlGaAs/GaAs) and indium arsenide (AlInAs/InAs). Each quantum dot have a width of 30 nm separated by a barrier width of 3 nm.

We propose to study the case of one electron in this structure and compared it with the case of having two electrons. We start obtaining the expressions of the Rashba and the Dresselhaus Hamiltonians in the geometry of quasi-undimensional quantum dots. We study the energy levels and the eigenstates of the Hamiltonian of the system as a function of the magnetic field and the separation between the quantum dots. With these eigenstates we calculate the g -factor and the mean value of the z projection $\langle S_z \rangle$ as a function of the Rashba parameter for different semiconductors and varying the width of the quantum dots and their separation.

In the abovementioned calculations we analyzed the influence of the spin-orbit interaction (SO) of the Rashba and the Dresselhuas types. These effects of SO may turn out to be favorable for the fabrication of spin injectors and detectors based on barriers of non magnetic semiconductors. We found that the Rashba effect is always stronger than the Dresselhaus effect for the parameters we used. For the case of two electrons we study the influence of the coulomb interaction.

Finally, we calculated the spin relaxation times due to the electron-phonon interaction for one and two electrons. For these calculations we considered the different kind of phonons due to the deformation potential, the piezoelectric longitudinal acoustic potential, the piezoelectric transverse 1 and transverse 2 acoustic potentials. We studied the transitions between states as a function of the magnetic field and the temperature.

In all cases, we wrote the corresponding Hamiltonian and we diagonalize it in order

to obtain their energy levels and their eigenstates. With them, we calculate the relaxation rates using the Fermi golden Rule.

Keywords: spin-orbit interaction, quantum dots, spin relaxation time, coulomb interaction.

Índice general

Resumen	I
Abstract	III
1. Introducción	1
1.1. Objetivos y organización de la tesis	1
1.2. Motivación	2
1.2.1. Espintrónica	2
1.2.2. Computación cuántica	4
1.2.3. Avances en nanoestructuras	7
1.3. Heteroestructuras de semiconductores	10
1.3.1. Métodos de fabricación	11
1.3.2. Métodos de caracterización: medición de la relajación de espín	14
1.3.3. Semiconductores	18
2. Interacciones en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales	23
2.1. Interacción SO en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales	23
2.1.1. Interacción Rashba	24
2.1.2. Interacción Dresselhaus	27
2.2. Interacción electrón-fonón en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales	29

ÍNDICE GENERAL

3. Un electrón en dos puntos cuánticos cuasi-unidimensionales	37
3.1. Estructura electrónica	37
3.2. Tasas de relajación de espín	48
3.2.1. Tasas de relajación en función del campo magnético	53
3.2.2. Tasas de relajación en función de la temperatura y $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$	59
4. Dos electrones en dos puntos cuánticos cuasi-unidimensionales	63
4.1. Estructura electrónica	63
4.1.1. Dos electrones sin interacción	63
4.1.2. Dos electrones con interacción espín-órbita	71
4.1.3. Dos electrones con interacción espín-órbita y Coulomb	77
4.2. Tasas de relajación de dos electrones	86
4.2.1. Tasas de relajación en función del campo magnético	86
4.2.2. Tasas de relajación en función de la temperatura	93
5. Discusión y conclusiones	97
Agradecimientos	102
Lista de trabajos publicados	103
Bibliografía	103

Capítulo 1

Introducción

1.1. Objetivos y organización de la tesis

El objetivo de esta tesis se centra en el estudio de sistemas de puntos cuánticos semiconductores cuasi-unidimensionales con uno y dos electrones. Calcularemos sus niveles de energía, factor- g , funciones de onda y tiempos de relajación de espín. Exploraremos el control cuántico del sistema, incluyendo los grados de libertad de espín, con vistas a aplicaciones en espintrónica y computación cuántica. Compararemos los tiempos de relajación hallados en estos sistemas debidos a los distintos mecanismos de relajación para determinar cuál o cuáles son los más importantes. Esto será de utilidad en el posterior diseño de sistemas de *qubits* para aplicaciones en procesamiento cuántico de información y también en la búsqueda de cables cuánticos que transmitan corriente polarizada de espín con mínima pérdida de la magnetización. Primeramente, resolveremos el problema de autovalores del Hamiltoniano del punto cuántico sin incluir la interacción espín-órbita. Posteriormente, incluiremos esta interacción obteniéndose, así, nuevos autoestados, dependientes del espín. Con estos estados calcularemos las tasas de transición de espín debidas a la interacción electrón-fonón en el punto cuántico. Este esquema para una partícula en el punto cuántico se extenderá al estudio de dos electrones por punto cuántico. En este caso es necesario trabajar en un es-

pacio de Hilbert de dos partículas, y estudiar las transiciones de espín para el sistema de dos electrones. Es decir, transiciones entre el estado triplete y el estado singlete del par de electrones.

Esta tesis está organizada de la siguiente forma: el primer capítulo comienza con una breve descripción de las heteroestructuras y las técnicas más importantes para la fabricación de pozos y puntos cuánticos. Se comenta acerca de los semiconductores utilizados en este trabajo como arseniuro de galio, antimoniuro de indio y arseniuro de indio. En el Capítulo 2 se describen los distintos mecanismos de relajación de espín y en que consiste la interacción espín-órbita (Rashba y Dresselhaus) y los distintos fonones que se utilizarán para el cálculo de las tasas de relajación de espín. En el Capítulo 3 se muestra un estudio detallado de un electrón en un doble punto cuántico acoplado cuasi-unidimensional teniendo en cuenta la interacción espín-órbita para el cálculo de las tasas. En el Capítulo 4 se presenta el estudio de dos electrones en la misma estructura combinando la interacción espín-órbita con la interacción Coulombiana. Aquí se estudian nuevamente la estructura electrónica y las tasas de relajación. Las conclusiones y discusiones pueden verse en el último capítulo.

1.2. Motivación

1.2.1. Espintrónica

Hace veinte años comenzó una búsqueda de nuevas formas de desarrollar dispositivos electrónicos más veloces y con mejores prestaciones. La electrónica tradicional está basada en el control de la carga de los portadores, pero la aparición del espín como una nueva propiedad de los electrones dio lugar a lo que hoy se conoce como la “espintrónica” [1]. Ésta explota tanto la carga del electrón como su espín, el cual puede tomar dos valores, $+1/2$ o $-1/2$, y ser controlado mediante un campo magnético. Para construir un dispositivo espintrónico debe disponerse de un sistema que pueda generar una corriente de electrones “polarizados

en espín” [2, 3, 4] ¹, y de otro sistema que sea sensible a dicha polarización. Es decir, un sistema que permita la transmisión de un par de señales por un único canal usando electrones “polarizados en espín” [5], produciendo una señal diferente para los dos valores posibles, duplicando así el ancho de banda del cable.

En 1990 Datta y Das propusieron el transistor de espín. Este dispositivo está basado en la manipulación del estado de espín del portador vía el control de la precesión de espín [6]. Presenta “un emisor”, “un colector”, y “una base”, o sea, un canal entre ambos. A diferencia de un transistor convencional, es capaz de inyectar o aceptar un solo componente de espín de la distribución de carga (ver Figura 1.1).

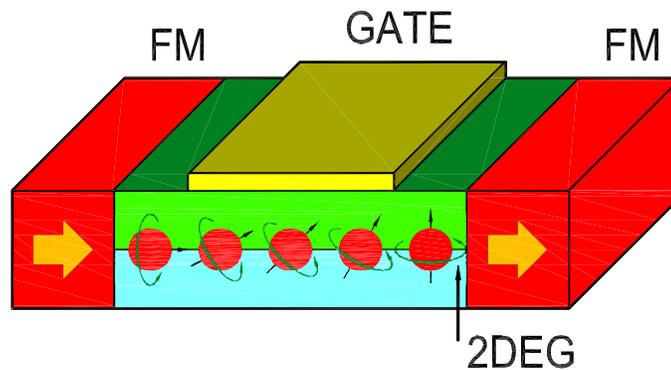


Figura 1.1: Transistor de espín propuesto por Datta y Das. Posee dos microimanes como polarizador y analizador (emisor y colector). El medio de propagación entre ambos (base), capaz de actuar como una compuerta controladora de la rotación del espín, es un gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita.

La espintrónica podrá generar un impacto radical en muchos de los dispositivos tradicionales de procesamiento y almacenamiento masivo de datos. Científicos de IBM anunciaron en 2002 la compresión en un área diminuta de cantidades enormes de datos, alcanzando

¹ Que tengan el mismo valor para su espín.

una densidad de aproximadamente 155.000 millones de *bits* por cm^2 . El uso convencional del estado de un electrón en un semiconductor es la representación binaria, pero los “*bits* cuánticos” [7] de la espintrónica (*qubits*) explotan a los estados del espín como superposiciones de 0 y 1, que pueden representar simultáneamente cada número entre 0 y 255, dando lugar a una nueva generación de computadoras cuánticas.

1.2.2. Computación cuántica

En las décadas de 1970 y 1980, Richard Feynmann [8], Paul Benioff [9], David Deutsch [10] y Charles Bennett [11], propusieron el concepto de las computadoras cuánticas aprovechando las leyes cuánticas, reemplazando los niveles de voltajes eléctricos por niveles de cuantos. En la computación clásica, un *bit* sólo puede tomar dos valores: 0 ó 1. Sin embargo, en la computación cuántica intervienen las leyes de la mecánica cuántica, y la partícula puede estar en superposición coherente: puede ser 0, 1 ó un 0 y un 1 a la vez. Esto permite realizar varias operaciones a la vez [12], según el número de *qubits*.

El número de *qubits* indica la cantidad de *bits* que pueden estar en superposición. Con los *bits* convencionales, si teníamos un registro de tres *bits*, había ocho valores posibles y el registro sólo podía tomar uno de esos valores. En cambio, si tenemos un vector de tres *qubits*, la partícula puede tomar ocho valores distintos a la vez gracias a la superposición cuántica, permitiendo un total de ocho operaciones paralelas. El número de operaciones es exponencial con respecto al número de *qubits*. Una computadora cuántica de 30 *qubits* equivaldría a un procesador convencional de 10 teraflops (billones de operaciones en punto flotante por segundo), cuando actualmente las computadoras trabajan en el orden de gigaflops (miles de millones de operaciones). Uno de los obstáculos principales para la computación cuántica es el problema de la decoherencia cuántica [13], la cual causa la pérdida del carácter unitario de los pasos del algoritmo cuántico [14, 15]. Las tasas de error [16] son proporcionales a la razón entre el tiempo de operación y el tiempo de decoherencia, de forma tal que cualquier operación debe ser completada en un tiempo inferior al tiempo de decohe-

rencia. Otro de los problemas principales es la escalabilidad [17], especialmente teniendo en cuenta el considerable incremento en *qubits* necesarios para cualquier cálculo que implica la corrección de errores. Actualmente, para los sistemas propuestos no es trivial un diseño capaz de manejar un número suficientemente alto de *qubits* como para resolver problemas computacionalmente interesantes. La computación cuántica requiere un nuevo enfoque en el diseño del *hardware*. Aunque aún no se ha resuelto el problema de qué *hardware* sería el ideal para la computación cuántica, se ha definido una serie de condiciones que ésta debe cumplir, conocida como la lista de Di Vincenzo [18]:

1. El sistema debe poder inicializarse, esto es, llevarse a un estado de partida conocido y controlado.
2. Debe ser posible hacer manipulaciones a los *qubits* de forma controlada, con un conjunto de operaciones que forme un conjunto universal de puertas lógicas.
3. El sistema debe mantener su coherencia cuántica a lo largo del experimento. Los tiempos de decoherencia deben ser mayores que el tiempo de operación de las puertas cuánticas.
4. Tras el cálculo, debe poder leerse el estado final del sistema.
5. El sistema debe ser escalable: tiene que haber una forma definida de aumentar el número de *qubits* para tratar con problemas de mayor coste computacional.

Algunos de los posibles candidatos actualmente estudiados son:

1. Espines nucleares de moléculas en disolución en un aparato de Resonancia magnética nuclear.
2. Flujo eléctrico en SQUIDS.
3. Puntos cuánticos.

Un sistema que satisface todos los requerimientos necesarios para una computadora escalable [19] es un electrón confinado en estructuras, tales como en puntos cuánticos, átomos o moléculas. Un espín *qubit* puede ser transportado a lo largo de cables conductores. Los puntos cuánticos presentan grandes ventajas, como la capacidad de almacenar un número pequeño de electrones. En particular, existen puntos cuánticos *autoensamblados* (SAQDs) [20] en los que es posible la inyección controlada y secuencial de espines individuales, utilizando al espín electrónico como *bit cuántico*. Estos *bit* cuánticos nos podrían llevar a crear compuertas cuánticas para las computadoras cuánticas. Loss y DiVicenzo [21] propusieron un conjunto de compuertas cuánticas de uno y dos bit cuánticos utilizando los estados de espín de puntos cuánticos acoplados. Estos puntos cuánticos acoplados simulan moléculas a través de la superposición de las funciones de onda de electrones confinados en puntos diferentes.

En la última década diversos científicos han investigado un electrón en puntos cuánticos con diferentes geometrías [22, 23, 24] y en cables cuánticos [25, 26]. Alcalde et al. [27] se focalizaron en un punto cuántico esférico, mientras que Voskoboyakov et al. [28, 29] estudiaron puntos cuánticos circulares.

En todos los casos se estudiaron sus niveles de energía, funciones de onda, factor- g [30, 31], conductancia [32], y cómo éstos cambiaban con la interacción espín-órbita. Posteriormente, se observó el papel de la interacción coulombiana agregando dos electrones a dichos puntos cuánticos [33, 34, 35].

Nuestro trabajo de tesis se centró en el estudio de las funciones de onda, de los niveles de energía, del factor- g , del valor medio de la proyección z del espín y de las tasas de relajación entre estados de un electrón, y, posteriormente, de dos electrones interactuantes en dos pozos acoplados cuasi-unidimensionales frente a la interacción espín-órbita. Pero para poder comprender los resultados obtenidos es necesario conocer previamente algunos puntos teóricos, los cuales desarrollaremos a continuación.

1.2.3. Avances en nanoestructuras

Puntos cuánticos

Un electrón en un material tridimensional - *bulk* - puede moverse en las tres dimensiones, mientras que en un pozo cuántico está confinado en una dirección, pudiéndose mover en las otras dos dimensiones. Si se toma el electrón de un pozo cuántico y se lo confina en las dimensiones laterales, se tendrá un punto cuántico. Existen diferentes tipos de puntos cuánticos construídos experimentalmente por el hombre: los producidos por confinamiento lateral en un gas de electrones 2D [36], vertical o apilado, *nanowhiskers* y autoensamblados [37]. Todos ellos comparten la característica básica de producir partículas confinadas en todas las direcciones, lo que da lugar a un espectro de energía similar a lo de los átomos [38, 39]. Los puntos cuánticos autoensamblados, los verticales y los *nanowhiskers* son fabricados con materiales semiconductores, y pueden confinar tanto electrones como huecos. Los puntos cuánticos con forma de disco (DSQDs) poseen un fuerte confinamiento a lo largo de un eje, y por lo tanto, la dinámica de electrones y huecos en el interior del punto puede limitarse al movimiento cuantificado en el plano [40].

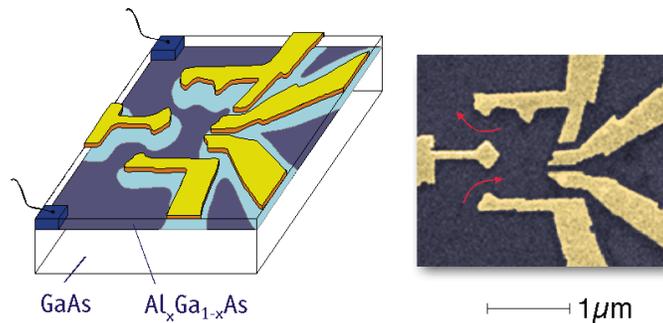


Figura 1.2: Dispositivo de un punto cuántico. Los electrones están confinados verticalmente al estado fundamental del pozo cuántico localizado en la interface GaAs/AlGaAs, y forman un gas de electrones 2D (2DEG). Las compuertas metálicas depositadas por litografía de haz de electrones confinan a los electrones lateralmente.

Una forma de construir puntos cuánticos consiste en confinar un electrón usando electrodos (ver Figura 1.2). A partir de una estructura de capa que posee un pozo cuántico, puede depositarse una cinta metálica fina en las superficies de la estructura para definir un área cuadrada. Si esta cinta metálica está cargada negativamente, los electrones en el pozo cuántico debajo de la superficie serán repelidos. Sin embargo, como están confinados a una capa paralela a la superficie, la única dirección posible de movimiento es por el costado. Como resultado, los electrones están concentrados en una pequeña región definida por los electrodos, obteniéndose un punto cuántico, dentro del cual el número de electrones puede ser controlado variando los voltajes de los electrodos. La forma del punto cuántico puede ser definida por los electrodos externos y las barreras alrededor del mismo, y pueden tener forma de punto cúbico, cilíndrico o triangular usando sólo tres electrodos. Con un único electrón en el punto puede simularse un “átomo de hidrógeno artificial”; colocando dos puede crearse un “átomo de helio artificial” [41] y estudiar cómo interactúan los electrones dentro del mismo. Juntando este tipo de átomos pueden formarse “moléculas artificiales” [42], y con un arreglo de puntos cuánticos, un cristal bidimensional. Los puntos cuánticos dispuestos en arreglos pueden ser de gran utilidad para la microelectrónica. Por ejemplo, si un punto cuántico posee dimensiones de los 10 micrones, en un centímetro cuadrado puede tenerse un arreglo de diez billones de puntos cuánticos en un centímetro cuadrado, y si cada uno funciona como un transistor, dicha estructura tendría la capacidad de ser una supercomputadora en un solo *chip*. Sin embargo, aún existen diversos problemas por resolver antes de llegar a eso, tales como generar un contacto eléctrico entre los transistores.

Nanowhiskers o Nanowires

Los *nanowhiskers* [43] (ver Figura 1.3) o *nanowires* verticales [44] son cables de nanocristales metálicos o no metálicos de varias decenas de nanómetros de diámetro [45]. Estos objetos unidimensionales poseen propiedades estructurales y electrónicas únicas para las aplicaciones de la microelectrónica y de la optoelectrónica [46]. Se han utilizado una gran variedad de técnicas para el crecimiento de los *nanowhiskers*, los que incluyen *stress-induced growth*, evaporación-condensación, reacción vapor-fase, crecimiento electrolítico, crecimiento desde la solución y solidificación direccional. Para el crecimiento de aleaciones de *nanowhiskers*, no se han reportado muchos artículos, puesto que no es tan simple su fabricación. Por ejemplo, a través de la deposición de láser pulsado se creció una aleación de *nanowhisker* de películas delgadas de carbono-niquel-indio. Los *nanowhiskers* fueron sintetizados por el recocido de las películas.

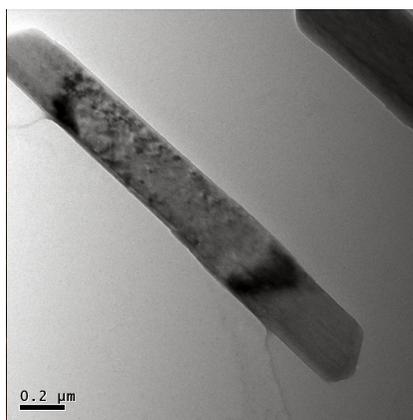


Figura 1.3: Nanowhisker.

1.3. Heteroestructuras de semiconductores

Una heteroestructura es un cristal compuesto por elementos semiconductores heterogéneos de diverso tipo, los cuales se ubican en una estructura concreta dispuestos estratificadamente y aproximadamente alineados en una determinada dirección (dirección de crecimiento). Para formar una heteroestructura uniendo dos materiales, sus constantes de red y estructura cristalina deben ser lo más parecidas posible [47]. La constante de red de la heteroestructura puede obtenerse a partir de la *ley de Vegard*, la cual predice que para $Al_xGa_{1-x}As$ es $a_{AlGaAs} = xa_{AlAs} + (1-x)a_{GaAs}$. De la Figura 1.4, tomando $x = 0.3$, $a_{GaAs} = 5.64 \text{ \AA}$ y $a_{AlAs} = 5.66 \text{ \AA}$ se obtiene que $a_{AlGaAs} = 5.645 \text{ \AA}$ ². En la actualidad, existen dos técnicas muy difundidas para hacer crecer heteroestructuras formadas con diferentes semiconductores: Haz Molecular Epitaxial (MBE) y Metal-Organic Chemical Vapour Deposition (MOCVD).

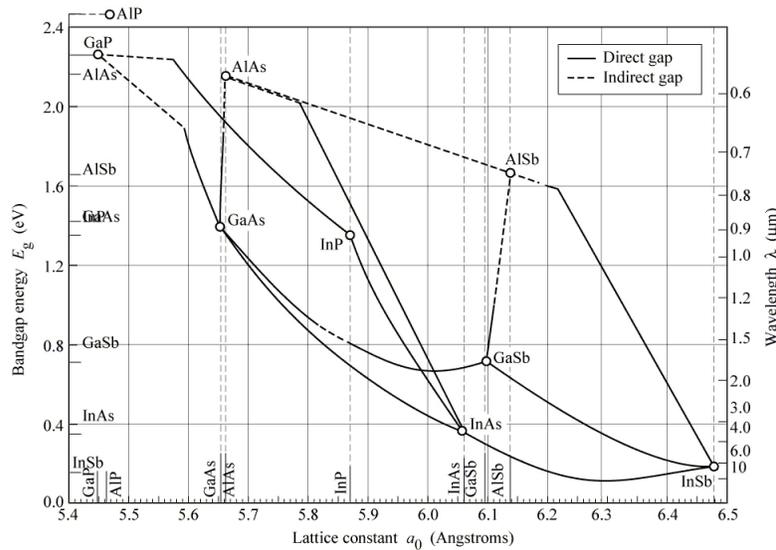


Figura 1.4: Energía de *Band-gap* y constante de red de varios semiconductores III-V a temperatura ambiente.

² Para $a_{InSb} = 6.49 \text{ \AA}$, $a_{AlSb} = 6.135 \text{ \AA}$, $x = 0.1$, resulta $a_{AlInSb} = 6.45 \text{ \AA}$. Ver referencia [58]

1.3.1. Métodos de fabricación

Haz Molecular Epitaxial

El sustrato en donde la heteroestructura crecerá ³ se coloca sobre un sujetador en el evaporador, el cual se encuentra a ultra alto vacío (del orden de $5 \cdot 10^{-11}$ mbar). Los elementos que compondrán la heteroestructura (Ga, As y Al) [48] son vaporizados formando un gas, el cual saldrá a través de unos pequeños orificios que apuntan al sustrato.

Para controlar el crecimiento sobre el sustrato se coloca un “opturador” delante de cada elemento, el cual puede ser abierto o cerrado dependiendo de la cantidad de material que se quiera agregar. Una vez que el haz de electrones impacte sobre la muestra, al observar el patrón de difracción se podrá controlar en forma muy precisa la cantidad de monocapas que se depositan sobre el sustrato. En la Figura 1.5 se muestra el dispositivo utilizado. Con esta técnica se puede hacer crecer material de una monocapa por segundo ó $1 \mu m$ por hora. Algunas de sus ventajas residen en la gran capacidad de controlar el grosor de las capas y la reproducción de los mismos. Sin embargo, es una técnica muy costosa, por lo que se dificulta la producción a gran escala.

Esta técnica fue utilizada por diversos investigadores desde principios de la década del '80 [49, 50, 51]. Gossard et. al y Pfeiffer et. al estudiaron el efecto Hall cuántico fraccionario (FGHE) en un gas de electrones bidimensional en muestras crecidas usando esta técnica [52]. Hsu y Wang, Ihn y Song y el grupo de Franklin hicieron crecer nanocables, o superredes de arseniuro de galio (GaAs) o antimoniuro de indio (InSb) en sustratos de silicio (Si) [53]. Al ajustar ciertas condiciones de crecimiento, como la temperatura, MBE puede producir orientación cristalina controlada y diámetros uniformes a lo largo del eje del cable de GaAs.

³ El sustrato puede ser de GaAs o de InP.

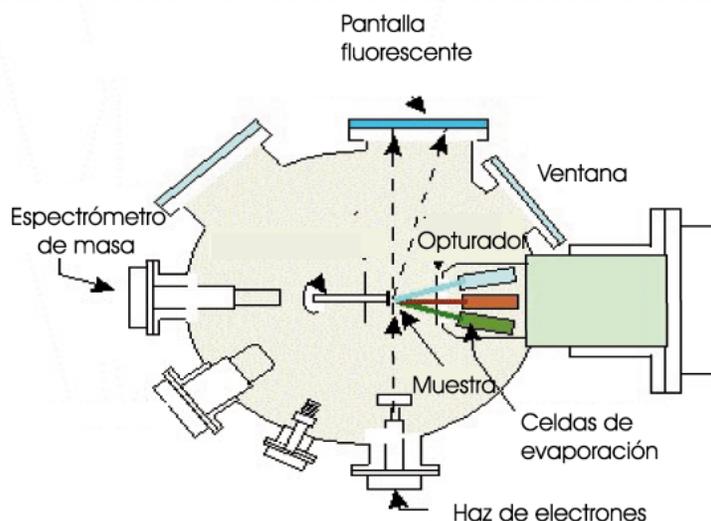


Figura 1.5: Dispositivo experimental de MBE.

Metal-Organic Chemical Vapour Deposition (MOCVD)

Esta clase de aparato trabaja cerca de la presión atmosférica. El sustrato es colocado sobre un bloque calentado dentro de una cámara, a través de la cual pasan diferentes gases por medio de portadores de hidrógeno. La composición de los gases puede ser variada rápidamente con el fin de controlar la composición del material crecido.

A diferencia de MBE, es más barato y más rápido, permitiendo una producción aceptable para la comercialización de los productos. MOCVD produce mejores instrumentos optoelectrónicos que la técnica MBE, sin embargo, el principal problema son los gases tóxicos que se generan en la reacción (ver Figura 1.6). Para el caso de GaAs, la composición de los gases es:



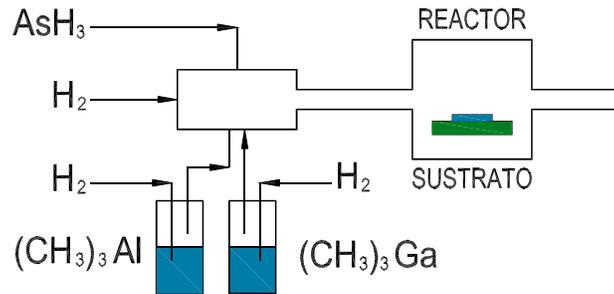


Figura 1.6: Dispositivo experimental de MOCVD.

Fabricación de Nanowiskers o Nanowires

Como se mencionó anteriormente, los *nanowires* [54] son nanocables que poseen propiedades interesantes que no se encuentran en el *bulk* o en los materiales 3D. Esto se debe a que los electrones en los *nanowires* están confinados lateralmente, ocupando niveles de energía diferentes a los niveles continuos de energía que se encuentran en el *bulk*.

Una propiedad del confinamiento cuántico que exhiben los *nanowires*, por ejemplo, los nanotubos de carbono, son los valores discretos de la conductancia. Estos valores discretos se los referencia como cuantos de conductancia y son números enteros. Algunos ejemplos incluyen *nanowires* moleculares inorgánicos, los cuales poseen un diámetro de 0.9 nm, y pueden ser de cientos de micrones de longitud, otros pueden estar basados en semiconductores como InP, Si, GaN, etc., dieléctricos (SiO_2) o metales (Ni, Pt). Debido a la baja densidad de electrones y baja masa efectiva, los cuantos de conductancia son más pronunciados en semiconductores - como el Si y el GaAs - que en metales.

Los *nanowires* no se observan espontáneamente en la naturaleza y deben ser producidos en laboratorios. Pueden ser suspendidos, depositados o sintetizados de los elementos.

Un *nanowire* suspendido es un cable en una cámara de vacío sujetado desde los extremos. Puede ser producido por un grabado químico de un cable mayor, o por el bombardeo de un alambre mayor con algunas partículas altamente energéticas (átomos o moléculas).

Un *nanowire* depositado es un cable en una superficie de diferente naturaleza; por ejemplo, una sola franja de átomos metálicos sobre una superficie no conductora. Una técnica para crear *nanowires* es el método de síntesis Vapor-Líquido-Sólido (VLS). Esta técnica utiliza como fuente de material un láser o una fuente de gas, la cual es expuesta a un catalizador. Los mejores catalizadores son *nanoclusters* de metales líquidos (como el oro), que pueden ser adquiridos en forma coloidal y depositados en un substrato o auto-ensamblado a partir de una película delgada. Este proceso puede producir *nanowires* cristalinos para el caso de materiales semiconductores.

La fuente entra en los *nanoclusters* y comienza a saturarlos. Una vez que se llega a la supersaturación, la fuente se solidifica y crece hacia el exterior del *nanocluster*. La longitud final puede ajustarse con solo apagar la fuente. Los compuestos de *nanowires* pueden ser creados por el cambio de fuentes alternando diferentes materiales aún si están en la fase de crecimiento.

Los *nanowires* podrán complementar o reemplazar a los nanotubos de carbono en algunas aplicaciones, y ser utilizados para la nueva generación de nuevos dispositivos de computación cuántica.

1.3.2. Métodos de caracterización: medición de la relajación de espín

Relajación y desfasaje de espín

Los avances tecnológicos de los últimos años han permitido la fabricación de sistemas semiconductores de dimensiones nanométricas. La interacción espín-órbita (SO) aparece en materiales semiconductores como consecuencia del confinamiento electrónico y de la ruptura de simetrías de inversión, que dan lugar a desdoblamientos de espín intrínsecos en ausencia de campos magnéticos en las heteroestructuras. La intensidad de estas interacciones depende de las características del material y puede ser controlada por un campo eléctrico

externo. La vinculación entre la interacción SO y el confinamiento cuántico es una herramienta que permite la manipulación de los grados de libertad de espín de los electrones con el movimiento orbital de los mismos y viceversa.

La relajación y el desfase de espín son procesos que llevan al equilibrio del espín. El hecho de que el espín electrónico posea vidas largas fuera del equilibrio en los semiconductores, permitiendo que la información codificada en el espín viaje distancias macroscópicas, es lo que hace que la espintrónica juegue un papel importante en la tecnología. Para electrones móviles, el tiempo de relajación de espín T_1 (llamado también tiempo longitudinal) y el tiempo de desfase de espín T_2 (llamado también tiempo transversal) están definidos por las siguientes ecuaciones: la precesión de espín, el decaimiento, y la difusión de la magnetización \mathbf{M} bajo un campo magnético $\mathbf{B}(t) = \mathbf{B}_0(t)\hat{z} + \mathbf{B}_1(t)$, con un campo longitudinal estático \mathbf{B}_0 en la dirección \hat{z} y un campo oscilante transverso en la dirección perpendicular al eje \hat{z} . Las ecuaciones de Bloch-Torrey que describen las componentes de la magnetización dependientes del tiempo son:

$$\begin{aligned}\frac{dM_x}{dt} &= \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B})_x - \frac{M_x}{T_2} + D\nabla^2 M_x, \\ \frac{dM_y}{dt} &= \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B})_y - \frac{M_y}{T_2} + D\nabla^2 M_y, \\ \frac{dM_z}{dt} &= \gamma (\mathbf{M} \times \mathbf{B})_z - \frac{M_z - M_z^0}{T_1} + D\nabla^2 M_z,\end{aligned}\tag{1.2}$$

donde $\gamma = -g\mu_B/\hbar$ es la constante giromagnética, g es el factor- g electrónico, μ_B es el magnetón de Bohr y D es la constante de difusión.

El tiempo de relajación de espín T_1 es el tiempo que le toma a la magnetización longitudinal alcanzar el equilibrio. Mientras que el tiempo T_2 es clásicamente el tiempo que le toma a un ensamble de espines transversos, inicialmente precediendo en fase alrededor del campo longitudinal, perder su fase debido a fluctuaciones espaciales y temporales de las frecuencias de precesión. En el caso de un electrón la dinámica está descrita por estos dos

tiempos: T_1 , el cual describe cuán rápido es despolarizado el espín y T_2 el cual representa el tiempo característico después del cual la información de la fase es perdida [55]. En general, T_2 es menor que T_1 .

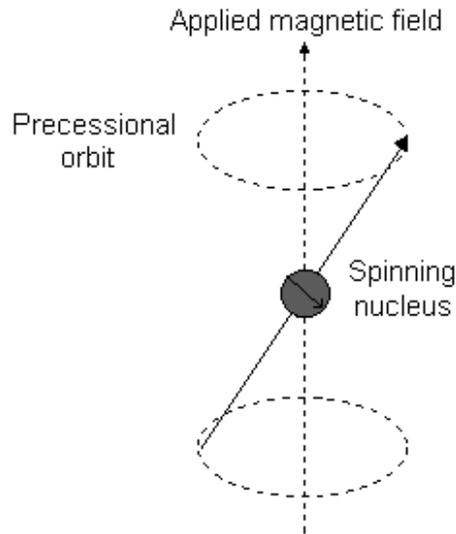


Figura 1.7: Precesión de Larmor.

Estudiemos tres situaciones diferentes para la magnetización dependiente del tiempo: sin relajación, con relajación longitudinal y con relajación transversal.

1. Precesión de Larmor (ver Figura 1.7): no hay relajación, se aplica un campo estático $\mathbf{B} = B_0 \hat{z}$ y no hay difusión:

$$\begin{aligned}
 \frac{d\mathbf{M}}{dt} &= \gamma \mathbf{M} \times \mathbf{B}, \\
 \frac{dM_x}{dt} &= \gamma B_0 M_y, \\
 \frac{dM_y}{dt} &= -\gamma B_0 M_x, \\
 \frac{dM_z}{dt} &= 0.
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

Las soluciones de la magnetización son:

$$\begin{aligned} M_x(t) &= \cos(\omega_0 t) M_x^0 + \sin(\omega_0 t) M_y^0, \\ M_y(t) &= -\sin(\omega_0 t) M_x^0 + \cos(\omega_0 t) M_y^0, \\ M_z(t) &= M_z^0, \end{aligned} \tag{1.4}$$

donde M_i^0 es la componente i de la magnetización inicial. Esto da como resultado la precesión de Larmor del vector de espín \mathbf{S} en un cono alrededor del eje z .

2. Tiempo de relajación longitudinal T_1 : supongamos que el vector de magnetización total se encuentra alineado con el campo aplicado \mathbf{B} y tiene el valor M_0 . Las componentes M_x y M_y son nulas y $M_z = M_0$:

$$\frac{dM_z}{dt} = \frac{(M_z - M_0)\hat{z}}{T_1}. \tag{1.5}$$

La solución es:

$$M_z(t) = M_z^0 e^{-t/T_1} + M_0(1 - e^{-t/T_1}), \tag{1.6}$$

donde T_1 es el tiempo de relajación longitudinal.

Por ejemplo, el fenómeno de *spin-flip*, donde un espín $1/2$ en un sólido puede pasar de *spin-up* a *spin-down* en un tiempo T_1 , puede ser analizado análogamente como en el caso en donde la magnetización se invierte:

$$\begin{aligned} M_z^0 &= M_z(t=0) = -M_0, \\ M_z(t) &= M_0(1 - 2e^{-t/T_1}). \end{aligned} \tag{1.7}$$

3. Tiempo de relajación transversal T_2 : supongamos que solo existe componente transversal de la magnetización.

$$\frac{d\mathbf{M}}{dt} = \frac{(M_x \hat{x} + M_y \hat{y})}{T_2}, \quad (1.8)$$

y la solución es:

$$M(t) = M^0 e^{-t/T_2} e^{-i\omega_0 t}, \quad (1.9)$$

donde ω_0 es la frecuencia de precesión alrededor del campo estático en \hat{z} , el cual es determinado por el factor- g de Landè. La magnetización transversal presenta un comportamiento oscilatorio con un decaimiento exponencial determinado por la constante T_2 .

1.3.3. Semiconductores

El semiconductor es un sólido cuya conductividad eléctrica puede ser controlada en un gran rango, permanentemente o dinámicamente. Los semiconductores cumplen un papel muy importante en el campo de la tecnología ya que son utilizados para la construcción de muchas piezas, como en la fabricación de componentes electrónicos, entre otros. Son similares a los aislantes. Sin embargo, estos últimos poseen un mayor *band-gap*⁴ comparado con el de los semiconductores. Los semiconductores pueden ser de un material elemental como el silicio (Si) o el germanio (Ge), o bien compuestos de más de un elemento, como el arseniuro de galio (GaAs), el antimoniuro de indio (InSb) o el arseniuro de indio (InAs).

Los electrones en los semiconductores pueden tener energías sólo dentro de ciertas bandas entre la energía del estado fundamental, correspondiente a electrones ligados al núcleo atómico del material, y la energía de electrones libres, la cual es requerida para que un electrón escape enteramente del material. Cada energía de banda corresponde a un número

⁴ Energías que los electrones deben adquirir para ser libres de fluir.

de estados discretos de los electrones, y muchos de éstos están llenos hasta una banda llamada banda de valencia ⁵. Tanto los semiconductores como los aislantes se distinguen de los metales debido a que la banda de valencia de los primeros está llena en condiciones normales. La facilidad con la cual los electrones en un semiconductor pueden ser excitados de la banda de valencia a la banda de conducción ⁶ depende del *band-gap* entre bandas.

Arseniuro de galio (GaAs)

El arseniuro de galio (GaAs) pertenece al grupo III-V de la tabla periódica y está compuesto de dos elementos: galio (Ga) y arsénico (As) (ver Figura 1.8). Ha sido muy estudiado debido a su gran importancia en circuitos integrados de frecuencia microondas, diodos infrarojos, diodos láser y celdas solares [56].

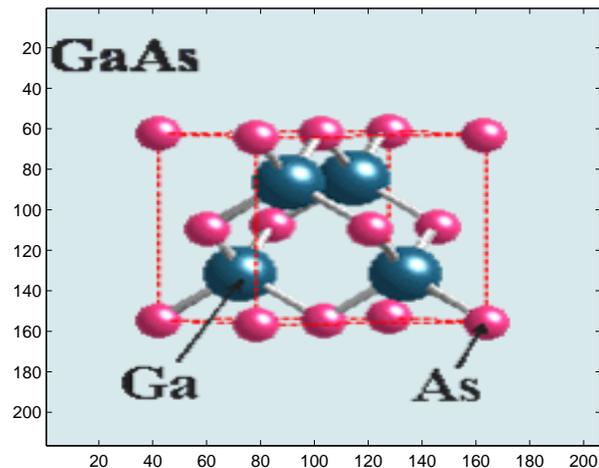


Figura 1.8: Estructura cristalina del Arseniuro de Galio.

⁵ Banda de valencia: es el más alto de los intervalos de banda de energía que se encuentra ocupado por electrones.

⁶ Banda de conducción: banda de energía parcialmente ocupada de electrones.

GaAs [57] posee propiedades electrónicas superiores a las del silicio (Si), semiconductor altamente utilizado en la electrónica. Los dispositivos fabricados con este semiconductor generan menos ruido que los fabricados con silicio cuando operan a alta frecuencia. Otra ventaja del GaAs es que posee un *band-gap* directo ⁷ el cual puede ser utilizado para emitir luz. En cambio, el Si posee un *band-gap* indirecto ⁸, por lo que produce muy baja respuesta para emitir luz.

GaAs es un semiconductor ideal para aplicaciones en computación y microelectrónica. El arseniuro de galio, en combinación con aluminio (Al), $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, forman heteroestructuras, las cuales pueden ser crecidas mediante la técnica “Haz Molecular Epitaxial” (MBE). Debido a que GaAs y AlAs poseen constante de red similares, las capas pueden ser crecidas de distintos espesores. Estos dos materiales pueden combinarse para fabricar *nanowhiskers* como los descritos anteriormente. Ver Figura 1.9. Para determinar la profundidad de los pozos de potenciales que forman una heteroestructura, por ejemplo $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ como muestra la Figura 1.9, se debe conocer la diferencia de *bandgap*, ΔE_G , entre los semiconductores que la componen, y adjudicar el 60% de dicho valor para la banda de conducción y el 40% para la banda de valencia. En nuestro caso, GaAs posee un *bandgap* $E_{G1}(\text{GaAs}) = 1.424 \text{ eV}$ y $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ posee $E_{G2}(\text{AlGaAs}) = E_{G1}(\text{GaAs}) + 1.247x \text{ eV}$ para $x < 0.45$. Con $x = 0.3$ resulta $E_{G2}(\text{AlGaAs}) = 1.7981 \text{ eV}$. Esta última fórmula depende de la con-

⁷ Un semiconductor con *band-gap* directo implica que el mínimo de la banda de conducción cae directamente por encima del máximo de la banda de valencia en el espacio momento. En un semiconductor con *band-gap* directo, los electrones que se encuentran en el mínimo de la banda de conducción pueden combinarse directamente con los huecos que se encuentran en el máximo de la banda de valencia, mientras conservan el momento. La energía de la recombinación a través del *band-gap* será emitido en la forma de un fotón de luz. A esto se lo denomina emisión espontánea.

⁸ En un semiconductor con *band-gap* indirecto, el momento del mínimo de la banda de conducción y el máximo de la banda de valencia no coinciden, por lo que una transición directa a través del *band-gap* no conserva momento y está prohibido. La recombinación ocurre por la mediación de un fonón o un defecto cristalográfico, el cual permite la conservación del momento. En este proceso no se emite luz. La emisión de luz en estos semiconductores es muy ineficiente y débil.

centración - x - de aluminio en GaAs. Finalmente, $\Delta E_G = 0.3741$ eV y la profundidad del pozo de GaAs será de 220 meV aproximadamente [58].

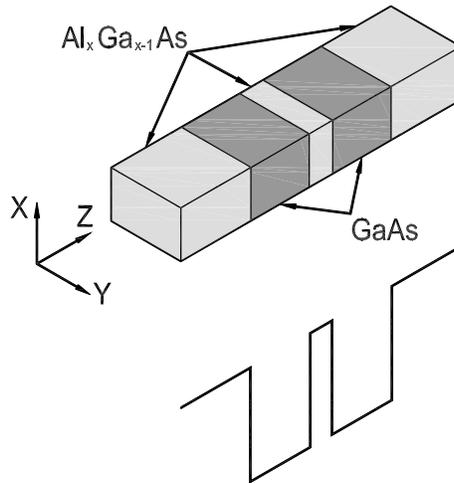


Figura 1.9: Heteroestructura de GaAs de dos pozos cuánticos.

Antimoniuro de indio (InSb)

El antimoniuro de indio (InSb) es un compuesto cristalino que posee dos elementos: indio (In) y antimonio (Sb). Es un semiconductor del grupo III-V utilizado en detectores infrarrojos, entre otras aplicaciones. Una capa de InSb entre medio de dos capas de AlInSb actúa como un pozo cuántico. Esta combinación permite construir transistores bipolares que operan a frecuencias superiores a 85 GHz. Cristales de InSb pueden ser crecidos mediante la técnica “Haz Molecular Epitaxial” (MBE). Posee un *band-gap* directo pequeño comparado con el de GaAs, y los efectos de espín-órbita tienden a ser más fuertes.

Para determinar la profundidad de los pozos de la heteroestructura $Al_xIn_{1-x}Sb/InSb$ se tomaron $E_{G1}(InSb) = 0.17$ eV y $E_{G2}(AlInSb) = E_{G1}(InSb) + 1.976x$, con $x = 0.1$ resulta $E_{G2}(AlInSb) = 0.466$ eV, y $\Delta E_G = 197$ meV y la profundidad resulta 110 meV aproximadamente.

Parámetro	GaAs	InSb	InAs
Zinc-blende	SI	SI	SI
<i>Band-gap</i> directo (a 300 K) (eV)	1.424	0.17	0.354
$m^* = m/m_0$ [99]	0.067	0.013	0.0239
ρ (kg/m ³)	5317.6	5770	5680
Constante dieléctrica ϵ	12.9	16.8	15.15
Constante Potencial de Deformación Ξ_0 (eV)	7	8	5.04
Constante Piezoeléctrica eh_{14} (eV/Å)	0.14	0.061	-0.045
Velocidad longitudinal c_l (m/s)	5290	3400	3830
Velocidad transversal c_t (m/s)	3350	2290	2640

Cuadro 1.1: Parámetros de los semiconductores utilizados [59, 61, 62].

Arseniuro de indio (InAs)

Otro semiconductor muy utilizado es el arseniuro de indio (InAs), el cual está compuesto por indio (In) y arsénico (As) y presenta una apariencia de un cristal cúbico de color gris. Es utilizado para la construcción de diodos láser [59, 44], o de detectores infrarrojos para un rango de longitudes de onda que van de 1 a 3.8 μm . Los puntos cuánticos de estos semiconductores pueden ser formados en una monocapa de arseniuro de indio sobre arseniuro de galio. Las diferencias en las constantes de red de los materiales crean tensiones en la capa de la superficie, lo cual lleva a la formación de puntos cuánticos. Este semiconductor presenta un factor- g que puede variar de 2, para un *bulk*, hasta 15 variando el tamaño del punto como consecuencia del confinamiento cuántico [60]. En forma similar a los dos casos anteriores la heteroestructura $Al_xIn_{1-x}As/InAs$ presenta $E_{G1}(InAs) = 0.354$ eV y $E_{G2}(AlInAs) = 1.45$ eV, tomando $x = 0.48$ resulta $\Delta E_G = 1.096$ eV y la profundidad de los pozos será de 650 meV aproximadamente. En el Cuadro 1.1 se encuentran algunos de los parámetros utilizados en los distintos cálculos de los semiconductores InSb, GaAs y InAs.

Capítulo 2

Interacciones en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales

2.1. Interacción SO en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales

La interacción espín-órbita (SO) ha captado interés en la comunidad científica debido a las implicancias en el campo de la espintrónica [63], como el transporte y la detección de espín. Es responsable, en la mayor parte de los casos, de la relajación de espín, y aparece en puntos cuánticos debido a la pérdida de simetría en la red cristalina y el potencial de confinamiento de la nanoestructura. La intensidad de estas interacciones no sólo depende de las características del material, sino también puede ser controlada por campos eléctricos externos.

En este capítulo haremos una breve descripción de los términos de Rashba y de Dresselhaus para el caso de un gas de electrones cuasi-bidimensional (cuasi-2D) estudiado por varios autores, y para dos puntos cuánticos cuasi-unidimensional (cuasi-1D) estudiado por nosotros.

2.1.1. Interacción Rashba

En los semiconductores, el acoplamiento espín-órbita es consecuencia de los efectos relativistas causados por el campo eléctrico debido a la falta de simetría de inversión en ciertas heteroestructuras. Dependiendo del origen de este campo eléctrico, se distinguen dos contribuciones [64]: el campo eléctrico creado por la asimetría de inversión del *bulk* del material - término de Dresselhaus - o la asimetría estructural en la heteroestructura - término de Rashba [65, 66]-. Este último mecanismo constituye la base de las nanoestructuras propuestas. Datta y Das describieron como el campo eléctrico puede ser usado para modular la corriente de espín. Esta corriente modulada en la estructura proviene de la precesión del espín debido al acoplamiento SO. La intensidad del acoplamiento SO de Rashba depende, como se mencionó anteriormente, del campo eléctrico efectivo (debido al confinamiento) perpendicular al plano del pozo cuántico. Otra posibilidad de controlar esta interacción, la cual fue demostrada experimentalmente [67, 68, 69], es por medio de un campo eléctrico externo perpendicular al plano del pozo cuántico.

El Hamiltoniano que describe la interacción Rashba se escribe como [70]:

$$H_R = \frac{\gamma_R}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}, \quad (2.1)$$

donde γ_R es la constante de Rashba que depende del material, σ son las matrices de Pauli, y V es el potencial de confinamiento [71]. Tomando el producto vectorial se obtiene:

$$H_R = \frac{\gamma_R}{\hbar} \left[\sigma_x \left(\frac{\partial V_y}{\partial y} p_z - \frac{\partial V_z}{\partial z} p_y \right) - \sigma_y \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} p_z - \frac{\partial V_z}{\partial z} p_x \right) + \sigma_z \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} p_y - \frac{\partial V_y}{\partial y} p_x \right) \right]. \quad (2.2)$$

La influencia del acoplamiento espín-órbita de Rashba en puntos cuánticos ha sido tratada en diversos trabajos teóricos [72, 73]. Las geometrías más estudiadas son puntos cuánticos dentro de pozos cuánticos cuasi-2D con confinamiento parabólico en el plano [74, 75, 76].

En estos trabajos se considera un gas de electrones cuasi-2D normal al eje z [77], con

potencial de confinamiento parabólico en el plano (x,y) . La función de onda de este sistema se escribe como:

$$\Psi_{n,m}(x, y, z) = \phi(z) \varphi_{n,m}(x, y). \quad (2.3)$$

El Hamiltoniano efectivo de Rashba en 2D se obtiene como:

$$\begin{aligned} H_{2dR}(x, y) &= \int dz \phi^*(z) H_R(x, y, z) \phi(z) = \\ &= \frac{\gamma_R}{\hbar} \left[\sigma_x \left(\frac{\partial V_y}{\partial y} \langle p_z \rangle - \langle \frac{\partial V}{\partial z} \rangle p_y \right) - \sigma_y \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} \langle p_z \rangle - \langle \frac{\partial V_z}{\partial z} \rangle p_x \right) + \right. \\ &\left. + \sigma_z \left(\frac{\partial V_x}{\partial x} p_y - \frac{\partial V_y}{\partial y} p_x \right) \right], \end{aligned} \quad (2.4)$$

reagrupando y usando que $\langle p_z \rangle = 0$ ⁹:

$$H_{2dR}(x, y) = \frac{\gamma_R}{\hbar} \left(\langle \frac{\partial V_z}{\partial z} \rangle (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) + \sigma_z (p_y \frac{\partial V_x}{\partial x} - p_x \frac{\partial V_y}{\partial y}) \right), \quad (2.5)$$

si además, $\frac{\partial V_x}{\partial x}$ y $\frac{\partial V_y}{\partial y}$ son mucho menor que $\frac{\partial V_z}{\partial z}$, el Hamiltoniano de una partícula que describe un electrón en dicha estructura es:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(x, y) + \alpha_R (\sigma_y p_x - \sigma_x p_y), \quad (2.6)$$

donde $V(x, y)$ es el potencial de confinamiento parabólico, y el último término corresponde al acoplamiento Rashba en dicha estructura, $\alpha_R = \frac{\gamma_R}{\hbar} \langle \frac{\partial V_z}{\partial z} \rangle$.

⁹ Para un campo magnético nulo, las autofunciones pueden escribirse reales y el valor medio de expectación del momento resulta ser nulo [101].

A partir de este Hamiltoniano se estudiaron funciones de onda, niveles de energía, factor- g , relajación de espín.

Por otro lado, hay un creciente interés y progreso experimental en otro tipo de puntos cuánticos definidos dentro de estructuras cuasi-1D, llamados *nanorods* o *nanowhiskers* [78]. En estas estructuras se puede introducir un confinamiento adicional en la dirección longitudinal, permitiendo la formación de heteroestructuras cuasi-1D, como puntos cuánticos múltiples. Los *nanorods* pueden ser crecidos con diversos materiales semiconductores. Sus anchos laterales pueden ser controlados seleccionando el tamaño de las nanopartículas de oro, las cuales son utilizadas para catalizar su crecimiento, y pueden ser hechas tan pequeñas como 3 nm [79]. Recientemente, han sido medidas [80] las propiedades de transporte de estos *nanorods*. Motivados por estos experimentos, estudiamos la estructura electrónica de puntos cuánticos dobles acoplados cuasi-1D incluyendo acoplamiento espín-órbita. Este tipo de sistema de puntos también atrajo el interés en el campo del control cuántico de funciones de onda orbital debido a su simplicidad y *tunneling* [81, 82, 83, 84]. Para nuestro caso, las funciones de onda utilizadas se escriben como:

$$\Psi_n(x, y, z) = \phi_n(z) \varphi(x, y). \quad (2.7)$$

donde $\varphi(x, y) = \phi(x)\phi(y)$ son las funciones de onda del estado fundamental del oscilador armónico y $\phi_n(z)$ son funciones de onda las cuales describiremos más adelante.

El Hamiltoniano efectivo de Rashba en 1D se obtiene como:

$$\begin{aligned} H_{1dR}(z) &= \int \int dx dy \varphi(x, y)^* H_R(x, y, z) \varphi(x, y) = \\ &= \frac{\gamma_R}{\hbar} [\sigma_x \left(\left\langle \frac{\partial V_y}{\partial y} \right\rangle p_z - \frac{\partial V_z}{\partial z} \langle p_y \rangle \right) - \sigma_y \left(\left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle p_z - \frac{\partial V_z}{\partial z} \langle p_x \rangle \right) + \\ &\quad + \sigma_z \left(\left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle \langle p_y \rangle - \left\langle \frac{\partial V_y}{\partial y} \right\rangle \langle p_x \rangle \right)], \end{aligned} \quad (2.8)$$

donde σ_i , $i = x, y, z$, son las matrices de Pauli, V_x y V_y son los potenciales de confinamiento laterales y γ_R es el parámetro de Rashba que depende del material. Los promedios $\langle \dots \rangle$ están tomados con las funciones de onda de energía más baja de los potenciales de confinamiento asumiendo el ancho de los *nanorods* pequeños. Nuevamente, usando que los valores medios de p_x y p_y son nulos resulta:

$$H_{1dR} = \frac{\gamma_R}{\hbar} p_z \left(\left\langle \frac{\partial V_y}{\partial y} \right\rangle \sigma_x - \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle \sigma_y \right). \quad (2.9)$$

2.1.2. Interacción Dresselhaus

Los primeros trabajos publicados por Gene Dresselhaus en *Physical Review* entre 1953 y 1954 describen las masas efectivas y la interacción espín-órbita en los semiconductores de germanio (Ge) [85, 86], silicio (Si) [87] y antimonio de indio (InSb) [88]. Una de las publicaciones más relevantes que posteriormente dio origen a la interacción de Dresselhaus fue publicado en 1955 [89]. En dicho trabajo se estudió los efectos del acoplamiento espín-órbita en estructuras *zinc-blende*. Éstas consisten en dos redes cúbicas centradas en las caras (fcc) consideradas como subredes. Cada subred está desplazada por un cuarto de la diagonal del cuerpo y está compuesta de una sola especie de átomo. Si ambos átomos son iguales se obtiene una estructura de diamante. La principal diferencia con esta última estructura es la falta de simetría de inversión. Sin simetría de inversión uno aún conserva el resultado del teorema de la degeneración de Kramers. Este teorema afirma que los niveles de energía de los sistemas con un número impar de electrones permanecen al menos doblemente degenerados en presencia puramente de campos eléctricos, es decir, en ausencia de campos magnéticos [90]. Es una consecuencia de la invarianza de inversión temporal de los campos eléctricos, y se deriva de la aplicación del operador T antiunitario a la función de onda de un número impar de electrones. Es válido para cualquier configuración de campos eléctricos estáticos

o dependientes del tiempo ¹⁰.

Esta separación puede ser descripta por el Hamiltoniano:

$$H_D = \frac{\gamma_D}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - p_z^2) + \sigma_y p_y (p_z^2 - p_x^2) + \sigma_z p_z (p_x^2 - p_y^2)], \quad (2.10)$$

donde $\sigma_i, i = x, y, z$, son las matrices de Pauli, $p_i = \hbar k_i$ las coordenadas x, y, z de los momentos y γ_D es el parámetro de Dresselhaus que depende del material [91].

En forma análoga al caso de Rashba, teniendo un gas de electrones 2D, escribiendo las funciones de onda como $\Psi(x, y, z) = \phi(z) \varphi_{n,m}(x, y)$, la ecuación 2.10 resulta:

$$\begin{aligned} H_{2dD}(p_x, p_y) &= \int dz \phi^*(z) H_D \phi(z) = \\ &= \frac{\gamma_D}{\hbar^3} [\sigma_x p_x (p_y^2 - \langle p_z^2 \rangle) + \sigma_y p_y (\langle p_z^2 \rangle - p_x^2) + \\ &\quad + \sigma_z \langle p_z \rangle (p_x^2 - p_y^2)]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Suponiendo que p_x^2 y p_y^2 son mucho menores que p_z^2 , el Hamiltoniano se escribe:

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(x, y) + \alpha_D (\sigma_x p_x - \sigma_y p_y), \quad (2.12)$$

donde $\alpha_D = \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \langle p_z^2 \rangle$.

Nuevamente, para nuestro problema de un electrón en el punto doble cuántico cuasi-1D, usando que las funciones de onda se escriben como $\Psi(x, y, z) = \phi(x, y) \phi_n(z)$:

¹⁰ En ausencia de campo magnético $\Psi_{\mathbf{k}}$ y $i\sigma_y \Psi_{\mathbf{k}}^*$ son soluciones del Hamiltoniano para la misma energía. La segunda solución proviene del vector de onda $-\mathbf{k}$, y por lo tanto se tiene dos soluciones \mathbf{k} y $-\mathbf{k}$ con la misma energía. $E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k})$, pero ahora la parte periódica de las funciones de Bloch no satisfacen más la condición $u_{-\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(-\mathbf{r})$, y así una doble degeneración en toda la zona de Brillouin ya no es requerida [89]. Por lo tanto, en cristales cúbicos con simetría T_d aparece una separación de espín de la banda de conducción, el cual es cúbico en el vector de onda \mathbf{k} del electrón.

$$\begin{aligned}
H_{2dD}(p_z) &= \int \int dx dy \phi^*(x, y) H_D \phi(x, y) = \\
&= \frac{\gamma_D}{\hbar^3} [\sigma_x \langle p_x \rangle (\langle p_y^2 \rangle - p_z^2) + \sigma_y \langle p_y \rangle (p_z^2 - \langle p_x^2 \rangle) + \\
&\quad + \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle)].
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Tomando que $\langle p_x \rangle = 0$ y $\langle p_y \rangle = 0$, el Hamiltoniano se escribe:

$$H_{1dD} = \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle). \tag{2.14}$$

En el Capítulo 3 tendremos en cuenta las expresiones 2.5 y 2.9 para estudiar cómo el término de Rashba y el término de Dresselhaus influyen en los resultados obtenidos en la estructura electrónica y en la relajación de espín para el problema de un electrón en un punto cuántico doble cuasi-unidimensional.

2.2. Interacción electrón-fonón en puntos cuánticos cuasi-unidimensionales

Los fonones son cuantos de vibración de los iones fuera de las posiciones de menor energía. Estos cuantos de vibración pueden ser longitudinales o transversales. Los primeros son como ondas de sonido en el aire, es decir, los iones vibran en la misma dirección en que viajan provocando zonas alternadas de compresión y dilatación. En cambio, en los últimos, los iones vibran en forma perpendicular a la dirección de propagación, como las ondas electromagnéticas en el espacio libre.

La relajación de espín debido a la interacción electrón-fonón posee dos contribuciones [92]:

- Potencial de deformación debido a los fonones acústicos longitudinales.
- Potencial piezoeléctrico debido a fonones acústicos longitudinales y transversales.

Potencial de deformación longitudinal

El Potencial de deformación [93] se obtiene tomando el límite de longitud de onda larga, reteniendo solo en el Hamiltoniano de interacción electrón-fonón:

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{G}} M_{\mathbf{q}+\mathbf{G}} \rho(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \left(a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right), \quad (2.15)$$

$$\rho(\mathbf{q}) = \int d^3 \mathbf{r} e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} \rho(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

$$M_{\mathbf{q}} = -V_{ei}(\mathbf{q}) \mathbf{q} \cdot \hat{\xi}_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2}, \quad (2.17)$$

donde $M_{\mathbf{q}}$ es un elemento de matriz, $\rho(\mathbf{q} + \mathbf{G})$ es la densidad de carga localizada, $\omega_{\mathbf{q}}$ es la energía del fonón, $V_{ei}(\mathbf{q})$ es un potencial, ρ es la densidad de volumen, V es el volumen, y $\hat{\xi}_{\mathbf{q}}$ son las polarizaciones.

Nuevamente, al tomar el límite de $V_{ei}(\mathbf{q})$ cuando \mathbf{q} tiende a cero, se obtiene la constante de deformación Ξ_0 . A longitudes de onda larga $\hat{\xi} \rightarrow \hat{q}$, y sólo los fonones longitudinales son importantes si la banda no está degenerada.

$$H_{ep} = \Xi_0 \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho V \omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} q \rho(\mathbf{q}) \left(a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right). \quad (2.18)$$

Luego, usando la Regla de oro de Fermi para calcular las transiciones entre dos estados

mediante la interacción electrón-fonón debido al Potencial de deformación, resulta:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{q}} |M_{\mathbf{q}}|^2 |\langle f | e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} | i \rangle|^2 \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \omega_q)], \quad (2.19)$$

$$|M_{\mathbf{q}}|^2 = \frac{\Xi_0^2 \hbar q^2}{2 \rho \omega_q V} = \frac{\Xi_0^2 \hbar q^2}{2 \rho c_l q V} = \frac{\Xi_0^2 \hbar q}{2 \rho c_l V}, \quad (2.20)$$

donde ρ es la densidad de volumen, Ξ_0 es la constante del Potencial de deformación que depende de cada material, c_l es la velocidad longitudinal, V es el volumen, $|f\rangle$ y $|i\rangle$ son los autoestados final e inicial respectivamente, $\omega_q = c_l q$, $n_q = 1/\exp(\Delta E/k_B T - 1)$ ¹¹, y $\Delta_{f,i} = \epsilon_f - \epsilon_i$ es la diferencia de energía final e inicial.

Escribiendo la ecuación 2.19 mediante integrales se tiene:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\Xi_0^2 \hbar q}{2 \rho c_l V} \left| \int d^3 \mathbf{r} \langle f | e^{i\mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} | i \rangle \right|^2 \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \omega_q)]. \quad (2.21)$$

Potencial piezoelectrico

El Potencial piezoelectrico debido a fonones acústicos, son modulaciones de densidad periódica, las cuales generan campos eléctricos periódicos. El cristal debe poseer una falta de simetría de inversión para ser piezoelectrico. El grupo IV, como el silicio o el germanio, no son piezoelectricos. El Hamiltoniano de interacción electrón-fonón debido al Potencial piezoelectrico se escribe:

$$H_{ep} = i \sum_{\mathbf{q}} \left(\frac{\hbar}{2\rho v \omega_q} \right)^{1/2} M_{\lambda}(\hat{q}) \rho(\mathbf{q}) \left(a_{\mathbf{q}} + a_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \right), \quad (2.22)$$

¹¹ La probabilidad de que el estado de un fonón con energía $\hbar\omega$ sea excitado a temperatura T es definido como el número de ocupación n_q , y viene dado por la función de distribución de Bose-Einstein.

donde $M_\lambda(\hat{q})$ es el elemento de matriz que depende solo de la dirección de \mathbf{q} y de la polarización λ (fonones acústicos o transversales, $M_\lambda(\hat{q}) = \frac{2\pi h_{14}}{\kappa} \xi_i \xi_j \beta_{ijk} e_k$, y $\xi_i = \frac{q_i}{q}$, e_k es un vector unitario que apunta en la dirección k y $(i,k) = (x,y,z)$). Resolviendo el siguiente término [94, 95, 96]:

$$\begin{aligned} \xi_i \xi_j \beta_{ijk} = & \frac{1}{q^2} (q_x q_x \beta_{xxk} + q_x q_y \beta_{xyk} + q_x q_z \beta_{xzk} + q_y q_x \beta_{yxk} + q_y q_y \beta_{yyk} + \\ & + q_y q_z \beta_{yzk} + q_z q_x \beta_{zxk} + q_z q_y \beta_{zyk} + q_z q_z \beta_{zzk}) . \end{aligned} \quad (2.23)$$

Para un cristal de simetría cúbica sin un centro de inversión β_{ijk} es distinto de cero sólo si i,j,k son diferentes, y sus valores son $\beta_{xyz} = \beta_{xzy} = \dots = h_{14}$.

$$M(\hat{q}) = \frac{4\pi h_{14}}{\kappa q^2} (q_y q_z e_x + q_x q_z e_y + q_x q_y e_z) . \quad (2.24)$$

Para los fonones piezoeléctricos acústicos longitudinales se toman coordenadas cilíndricas: $e_x = q_x/q = Q \cos(\phi)/q$, $e_y = q_y/q = Q \sin(\phi)/q$, $e_z = q_z/q$, $\phi = (0, 2\pi)$, $Q^2 = q_x^2 + q_y^2$, y reemplazando las mismas en la ecuación 2.24 se obtiene:

$$M(\hat{q}) = \frac{6\pi h_{14}}{\kappa} \frac{Q^2 q_z}{q^3} \sin(2\phi) . \quad (2.25)$$

Nuevamente, usando la Regla de oro de Fermi para el cálculo debido al Potencial piezoeléctrico longitudinal resulta:

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\hbar}{2 \rho c_l V q} \left(\frac{6\pi h_{14}}{\kappa} \frac{Q^2 q_z}{q^3} \sin(2\phi) \right)^2 \left| \int d^3 \mathbf{r} \langle f | \mathbf{r} \rangle e^{i \mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} \langle \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 \\ & \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \omega_q)] . \end{aligned} \quad (2.26)$$

Para el Potencial piezoeléctrico transversal existen transverso 1 y transverso 2. En el primer caso se tiene $e_x = -\text{sen}(\phi)$, $e_y = \text{cos}(\phi)$ y $e_z = 0$, y reemplazando en la ecuación 2.24 resulta:

$$M(\hat{q}) = 4\pi \frac{h_{14}}{\kappa} q_z \frac{Q}{q^2} \text{cos}(2\phi). \quad (2.27)$$

Para el segundo caso, $e_x = q_z \text{cos}(\phi)/q$, $e_y = q_z \text{sen}(\phi)/q$ y $e_z = -Q/q$, y reemplazando en la ecuación 2.24:

$$M(\hat{q}) = 2\pi \frac{h_{14}}{\kappa} \frac{Q^3 \text{sen}(2\phi)}{q^2} \left(2 \frac{q_z^2}{Q^2} - 1\right). \quad (2.28)$$

Luego, para el Potencial piezoeléctrico transverso 1 y transverso 2:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \frac{\hbar}{2\rho c_t V q} \left(4\pi \frac{h_{14}}{\kappa} q_z \frac{Q}{q^2} \text{cos}(2\phi)\right)^2 \cdot \left| \int d^3\mathbf{r} \langle f|\mathbf{r}\rangle e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}} \langle \mathbf{r}|i\rangle \right|^2 \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \omega_q)], \quad (2.29)$$

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3\mathbf{q} \frac{\hbar}{2\rho c_t V q} \left(2\pi \frac{h_{14}}{\kappa} \frac{Q^3 \text{sen}(2\phi)}{q^2} \left(2 \frac{q_z^2}{Q^2} - 1\right)\right)^2 \cdot \left| \int d^3\mathbf{r} \langle f|\mathbf{r}\rangle e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}} \langle \mathbf{r}|i\rangle \right|^2 \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \omega_q)]. \quad (2.30)$$

Si consideramos nuestros puntos cuánticos cuasi-1D, los estados inicial y final son de la forma $\langle \mathbf{r}|i, f\rangle = \alpha(x)\alpha(y)\varphi_{i,f}(z)$, donde $\alpha(x)$ y $\alpha(y)$ son los estados fundamentales del oscilador armónico. $\varphi_{i,f}(z)$ se describirá en mayor detalle en el Capítulo 3.

Entonces,

$$\int d^3\mathbf{r} \langle f|\mathbf{r}\rangle e^{i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}} \langle \mathbf{r}|i\rangle = \int e^{iq_x x} \alpha^2(x) dx \cdot \int e^{iq_y y} \alpha^2(y) dy \cdot \int e^{iq_z z} \varphi_f^*(z) \varphi_i(z) dz, \quad (2.31)$$

Para x y para y la integral es la misma:

$$\int e^{iq_x x} \alpha^2(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq_x x} \left(\frac{\alpha_x}{\pi}\right)^2 e^{-\alpha_x x^2} dx, \quad (2.32)$$

$$\left| \int d^3 \mathbf{r} \langle f | \mathbf{r} \rangle e^{i \mathbf{r} \cdot \mathbf{q}} \langle \mathbf{r} | i \rangle \right|^2 = e^{\frac{-q_x^2}{2\alpha_x}} e^{\frac{-q_y^2}{2\alpha_y}} |I(q_z)|^2, \quad (2.33)$$

donde $\alpha_{x,y} = \frac{\omega_{x,y} m^*}{\hbar}$ y $I(q_z) = \int e^{iq_z z} \varphi_f^*(z) \varphi_i(z) dz$.

Resumiendo, las ecuaciones que se usarán en el Capítulo 3 para el cálculo de las tasas de relajación de espín para el sistema de un electrón son [97]:

1. Potencial de deformación

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\Xi_0^2 \hbar q}{2\rho c_l V} e^{\frac{-q_x^2}{2\alpha_x}} e^{\frac{-q_y^2}{2\alpha_y}} |I(q_z)|^2 \cdot \\ & \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q)], \end{aligned} \quad (2.34)$$

2. Potencial piezoelectrico longitudinal

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\hbar}{2\rho c_l V} \frac{36\pi^2 h_{14}^2 Q^4 q_z^2}{\kappa^2 q^7} \text{sen}(2\phi) e^{\frac{-q_x^2}{2\alpha_x}} e^{\frac{-q_y^2}{2\alpha_y}} |I(q_z)|^2 \cdot \\ & \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \hbar\omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q)], \end{aligned} \quad (2.35)$$

3. Potencial piezoelectrico transverso 1

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\hbar}{2\rho c_t V} \frac{16\pi^2 h_{14}^2 Q^2 q_z^2}{\kappa^2 q^5} \cos^2(2\phi) e^{\frac{-q_x^2}{2\alpha_x}} e^{\frac{-q_y^2}{2\alpha_y}} |I(q_z)|^2 \cdot \\ & \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \hbar\omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q)], \end{aligned} \quad (2.36)$$

4. Potencial piezoelectrico transverso 2

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} = & \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \mathbf{q} \frac{\hbar}{2\rho c_t V} \frac{4\pi^2 h_{14}^2 Q^6}{\kappa^2 q^7} \text{sen}^2(2\phi) \left(2\frac{q_z^2}{Q^2} - 1\right)^2 e^{\frac{-q_x^2}{2\alpha_x}} e^{\frac{-q_y^2}{2\alpha_y}} |I(q_z)|^2 \cdot \\ & \cdot [n_q \delta(\Delta_{f,i} - \hbar\omega_q) + (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q)], \end{aligned} \quad (2.37)$$

donde i, f son los estados iniciales y finales, V es el volumen, Ξ_0 y h_{14} son las constantes de los Potenciales de deformación y piezoeléctrico, respectivamente, que dependen del material, $c_{l,t}$ son las velocidades l =longitudinal y t =transversal, n_q es la función de distribución de Bose-Einstein y $\Delta_{f,i} = \epsilon_f - \epsilon_i$ es la diferencia entre la energía del estado final e inicial.

El Hamiltoniano electrón-fonón desarrollado hasta aquí es de partícula única. Para el caso de dos electrones, como se mostrará en el Capítulo 4, se tiene:

1. Potencial de deformación

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int qdqd\phi dQ \left| \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle \right|^2 \cdot \\ &\cdot \frac{Q}{\sqrt{Q^2 - q^2}} \frac{\Xi_0^2 \hbar Q}{2\rho c_l V} (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q), \end{aligned} \quad (2.38)$$

2. Potencial piezoeléctrico longitudinal acústico

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int qdqd\phi dQ \frac{Q}{\sqrt{Q^2 - q^2}} 18\pi^2 \left(\frac{h_{14}}{\kappa}\right)^2 \frac{\hbar}{\rho c_l V} q^4 \text{sen}^2(2\phi) \frac{Q^2 - q^2}{Q^7} \cdot \\ &\cdot \left| \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle \right|^2 (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q), \end{aligned} \quad (2.39)$$

3. Potencial piezoeléctrico transverso 1

$$\begin{aligned} \Gamma_{i \rightarrow f} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int qdqd\phi dQ \frac{Q}{\sqrt{Q^2 - q^2}} 8\pi^2 \left(\frac{h_{14}}{\kappa}\right)^2 \frac{\hbar}{\rho c_l V} q^2 \cos^2(2\phi) \frac{q_z^2}{Q^5} \cdot \\ &\cdot \left| \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle \right|^2 (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q), \end{aligned} \quad (2.40)$$

4. Potencial piezoeléctrico transverso 2

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{V}{(2\pi)^3} \int \int \int q dq d\phi dQ \frac{Q}{\sqrt{Q^2 - q^2}} 2\pi^2 \left(\frac{\hbar_{14}}{\kappa}\right)^2 \frac{\hbar}{\rho c_l V} \text{sen}^2(2\phi) \frac{q^6}{Q^7} \left(2\frac{q_z^2}{q^2} - 1\right)^2 \cdot \left| \int \int d^3\mathbf{r}_1 d^3\mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle \right|^2 (n_q + 1) \delta(\Delta_{f,i} + \hbar\omega_q), \quad (2.41)$$

Las funciones $|\Psi_j\rangle$ son los estados iniciales y finales de dos electrones, las cuales se presentarán en el Capítulo 4.

Capítulo 3

Un electrón en dos puntos cuánticos cuasi-unidimensionales

3.1. Estructura electrónica

En este capítulo mostraremos en forma teórica cómo la interacción espín-órbita de efecto Rashba y de Dresselhaus influyen en la estructura electrónica cuasi-unidimensional de dos puntos cuánticos semiconductores. Se calcularon [98] los niveles de energía, las autofunciones, el factor- g y el valor medio de S_z para dicha estructura, construidos con diferentes materiales. Se determinó que eligiendo la forma del confinamiento lateral, la contribución de los términos de Dresselhaus y de Rashba en el Hamiltoniano pueden o no ser suprimida. Además, variando los parámetros de confinamiento de la heteroestructura, se puede controlar en gran medida el factor- g .

Hamiltoniano cuasi-unidimensional

El sistema considerado consiste en dos puntos cuánticos semiconductores unidimensionales. Los semiconductores utilizados para la heteroestructura fueron antimonio de indio (InSb), antimonio de galio (GaSb), arseniuro de indio (InAs) y arseniuro de galio (GaAs).

Llamamos a x y a y las dos direcciones transversales, y a z la dirección longitudinal del punto cuántico, y tomamos como $V_z(z)$ el potencial de confinamiento que define a los dos pares acoplados de puntos cuánticos. La profundidad de los puntos para InSb es de unos 100 meV aproximadamente, mientras que para GaAs es de 220 meV aproximadamente. En todos los casos asumimos un ancho del *nanowhisker* de 2-5 nm, y el ancho de cada punto de 30 nm, con un parámetro de separación de barrera variable (inicialmente, $b = 3$ nm). En la Figura 3.1 se muestra el potencial de InSb junto con sus funciones de onda y los niveles de energía correspondientes.

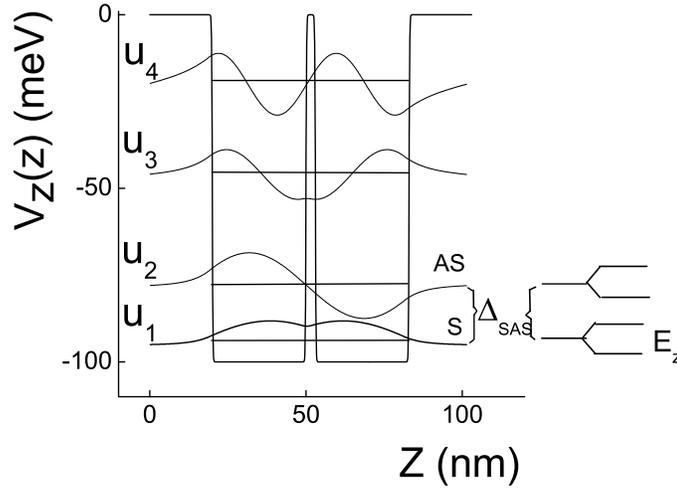


Figura 3.1: InSb: Potencial de los dos puntos y sus funciones de onda dentro del mismo (u_i , $i=1,4$). Cada nivel tiene degeneración 2 por el espín, el cual es separado por un campo magnético. S: función de onda del fundamental simétrica. AS: función de onda primer excitado antisimétrica.

El Hamiltoniano completo para esta estructura, en ausencia de campo magnético y en presencia de la interacción SO, se escribe como:

$$H = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_z(z) + H_{1dR} + H_{1dD}, \quad (3.1)$$

donde m^* es la masa efectiva de la banda de conducción que depende de cada material, $V_z(z)$ es el potencial de confinamiento, y H_{1dR} y H_{1dD} son los Hamiltonianos de Rashba y de Dresselhaus, debido a la asimetría de inversión estructural de la nanoestructura y a la asimetría de inversión del *bulk* de los semiconductores III-V, respectivamente.

Usando las ecuaciones 2.9 y 2.14 del Capítulo 2:

$$H_{1dR} = \frac{\gamma_R}{\hbar} p_z \left(\left\langle \frac{\partial V_y}{\partial y} \right\rangle \sigma_x - \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle \sigma_y \right), \quad (3.2)$$

$$H_{1dD} = \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle). \quad (3.3)$$

En el Cuadro 3.1 se muestran los parámetros utilizados en los cálculos para diferentes materiales semiconductores.

Parámetro	GaAs	GaSb	InAs	InSb
$m^* = m/m_0$	0.067	0.041	0.0239	0.013
γ_R (\AA^2)	5.33	33	110	500
γ_D ($10^3 \text{ meV}\text{\AA}^3$)	24	187	130	220
h_{14} (10^{-5} erg cm)	2.34	1.5	0.54	0.75
c_l (10^5 cm/s)	5.14	4.30	4.20	3.69
c_t (10^5 cm/s)	3.03	2.49	2.35	2.29
ρ (g/cm^3)	5.3176	5.6137	5.6670	5.7747
g_0	-0.44	-7.8	-15	-51

Cuadro 3.1: Parámetros de los semiconductores utilizados [28], [64], [99].

Según el grado de simetría de la estructura se diferencian cuatro casos [100] de acuerdo a los potenciales de confinamiento laterales $V_x(x)$ y $V_y(y)$:¹²

(a) V_x y V_y poseen simetría de inversión alrededor del origen y $V_x=V_y$

$$H_{SO} = H_{1dR} + H_{1dD} = 0, \quad (3.4)$$

no produce acoplamiento SO.

(b) V_x y V_y no poseen simetría de inversión alrededor del origen y $V_x=V_y$

$$H_{SO} = H_{1dR} + H_{1dD} = H_{1dR} = \frac{\gamma_R}{\hbar} p_z \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle (\sigma_x - \sigma_y), \quad (3.5)$$

sólo existe acoplamiento Rashba.

(c) V_x y V_y poseen simetría de inversión alrededor del origen y $V_x \neq V_y$

$$H_{SO} = H_{1dR} + H_{1dD} = H_{1dD} = \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle), \quad (3.6)$$

sólo existe acoplamiento Dresselhaus.

(d) V_x y V_y no poseen simetría de inversión alrededor del origen y $V_x \neq V_y$

$$H_{SO} = H_{1dR} + H_{1dD} = \frac{\gamma_R}{\hbar} p_z \left(\sigma_x \left\langle \frac{\partial V_y}{\partial y} \right\rangle - \sigma_y \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle \right) + \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle), \quad (3.7)$$

representa el caso más general y ambas contribuciones están presente.

A continuación se estudiaron los niveles de energía, valor medio de S_z y factor- g para cada uno de estos casos.

¹² Recordar como se mencionó anteriormente, los Hamiltonianos de Rashba y de Dresselhaus se simplifican notoriamente en ausencia de campo magnético, ya que los autoestados pueden ser elegidos reales y los valores de expectación de los momentos son nulos [101].

Niveles de energía

Para calcular los niveles de energía y las autofunciones se expandió el Hamiltoniano total para cada uno de los casos anteriores ((a),..., (d)) en una base de 300 funciones de onda de una caja cuántica de tamaño L , $\phi_n(z) = \sqrt{2/L} \text{sen}(n\pi z/L)$, y se lo diagonalizó numéricamente sin aproximaciones para obtener los coeficientes $A_{j,n}$ y $B_{j,n}$. Las funciones de onda completas (con espín) que diagonalizan el Hamiltoniano se escriben como:

$$\Psi_n(x, y, z) = \alpha(x)\alpha(y)\varphi_j(z), \quad (3.8)$$

donde $\varphi_j(z) = \sum_{n=1}^{300} (A_{j,n}|+\rangle + B_{j,n}|-\rangle)\phi_n(z)$, $|+\rangle$ y $|-\rangle$ representa el espín *up* y el espín *down* respectivamente, y $\alpha(x)$ y $\alpha(y)$ son las funciones de onda del oscilador armónico con frecuencia ω_x y ω_y .

El tamaño L de la caja es tal que los dos puntos cuánticos se encuentran contenidos totalmente dentro del mismo, incluyendo las barreras externas.

Debido a la degeneración de espín, se introdujo un campo magnético pequeño a lo largo de la dirección z . Este campo fue elegido de manera tal que las funciones de onda orbitales x - y no sean perturbadas significativamente. De esta forma, el término de Zeeman agregado en el Hamiltoniano total resulta: $H_z = \frac{\mu_B}{2} g_0 B \sigma_z$, donde μ_B es el magnetón de Bohr, $\mathbf{B} = B\hat{z}$ es el campo magnético y g_0 es el factor- g del Cuadro 3.1.

Nos proponemos mostrar los resultados para los casos (b) y (c) (Rashba o Dresselhaus solamente), puesto que el caso (d) no presenta grandes diferencias con (b) y (c). Para el caso (b) se fijó la intensidad del término de Rashba a través del campo eléctrico estructural $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$; y para el caso (c) se usó como potenciales de confinamiento laterales dos potenciales de oscilador armónico de distinta frecuencia: $V_q(q) = 1/2m^*\omega_q^2 q^2$, $q = x, y$.

En la Figura 3.2 se graficaron los dos niveles de energía más bajos para los dos puntos cuánticos InSb, tomando $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 0.5 \text{ meV}/\text{Å}$ para el caso (b) y $l_x = 50 \text{ Å}$, $l_y = 20 \text{ Å}$ para el caso (c). Los índices (de 1 a 6) del eje horizontal denotan la inclusión de los diferentes

términos en el Hamiltoniano. La Figura 3.2 muestra cómo los niveles de energía de H_0 (1 y 4) cambian con la inclusión de la contribución de Rashba H_{1dR} (caso (b), 2) y de Dresselhaus H_{1dD} (caso (c), 5) sin campo magnético. Se obtuvieron resultados similares para el resto de los semiconductores del Cuadro 3.1, los cuales no serán mostrados en este trabajo.

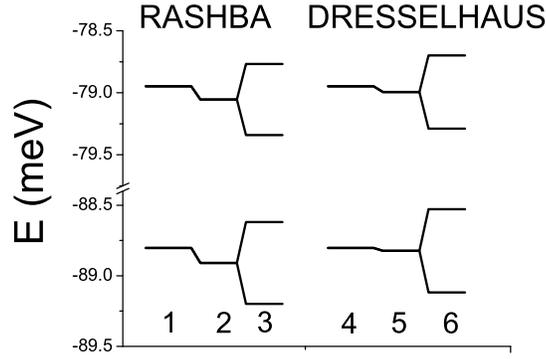


Figura 3.2: Niveles de energía para el estado fundamental y el primer excitado de la estructura InSb. Comparación de los valores de energía de (1,4) $H_0 = P_z^2/2m^* + V_z(z)$ con (2) $H_0 + H_{1dR}$, (5) $H_0 + H_{1dD}$, (3) $H_0 + H_{1dR} + H_z$, y (6) $H_0 + H_{1dD} + H_z$. El campo magnético es $B = 0.2$ T.

De las comparaciones se puede deducir que el efecto de Rashba es siempre mayor que el de Dresselhaus en los niveles de energía para los parámetros utilizados, los cuales son representativos para los posibles experimentos. Puede observarse que tanto los términos de Rashba como los de Dresselhaus no rompen la degeneración de espín, pero baja el valor de los niveles de energía, y estos valores dependen de los parámetros de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$ para Rashba, y l_x y l_y para Dresselhaus. Para los parámetros elegidos, Rashba baja el nivel en 0.1 meV para InSb y 0.1 μeV para GaAs, mientras que Dresselhaus lo hace en 0.01 meV para InSb y en 0.01 μeV para GaAs. Notese que el efecto es mucho menor para GaAs debido a que su constante de Rashba γ_R es 100 veces menor. Como puede verse en la Figura 3.3, el

corrimiento de energía producido por Rashba varía cuadráticamente con el campo eléctrico estructural $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$.

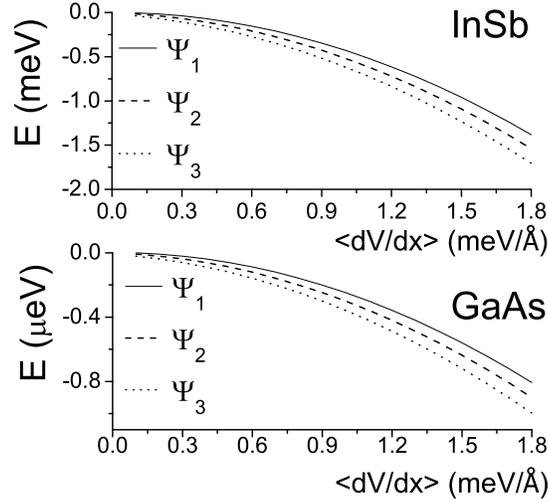


Figura 3.3: Contribución del término de Rashba a los niveles de energía de los puntos cuánticos de InSb (a) y de GaAs (b) en función de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$. Ψ_1 : estado fundamental, Ψ_2 y Ψ_3 son el primer y segundo estado excitado, respectivamente.

En la Figura 3.4 se muestra cómo los niveles de energía varían en el caso (c) en función de l_x para los dos niveles más bajos de energía para un $l_y = 50 \text{ \AA}$ fijo. Nuevamente, la dependencia es cuadrática. Esto nos lleva a pensar que las correcciones de espín-órbita a los niveles de energía pueden ser estimadas utilizando teoría de perturbaciones. Para verificar esta afirmación se realizaron los cálculos perturbativos para el caso de tener sólo Rashba agregando un campo magnético $B = 0.1 \text{ T}$ y así trabajar con teoría de perturbaciones no degeneradas. Una comparación entre el cálculo exacto y el perturbado a segundo orden nos lleva a una diferencia del 17% para $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 1.5 \text{ meV/\AA}$, y a diferencias mayores a medida que aumenta este parámetro, como es de esperarse. Estos resultados concuerdan con los hallados en la referencia [75] para puntos cuánticos circulares 2D, donde se encontraron

diferencias de hasta un 30% entre los resultados exactos y los perturbativos a segundo orden.

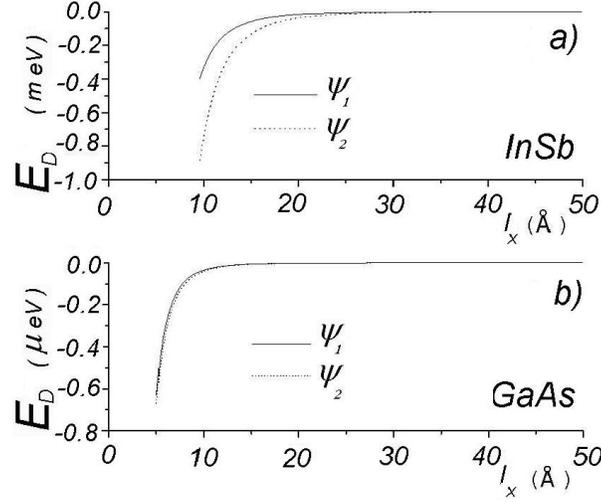


Figura 3.4: Contribución del término de Dresselhaus a los niveles de energía de los puntos cuánticos de InSb (a) y de GaAs (b) en función de l_x . Ψ_1 : estado fundamental, Ψ_2 es el primer estado excitado, para $l_y = 50$ Å.

En el Cuadro 3.2 se muestran todos los niveles de energía para los dos puntos cuánticos de InSb, comparando cada una de las contribuciones de Rashba y de Dresselhaus (no se muestran los niveles de GaAs por ser tan pequeñas las diferencias).

Factor- g efectivo y valor medio de S_z

Se tomó un campo magnético $\mathbf{B} = 0.1 \text{ T} \hat{z}$ para romper la degeneración de espín del estado fundamental, y así permitir el cálculo del factor- g efectivo (g^*) en función de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$ (caso (b)) para GaAs, InSb, InAs y GaSb. En las figuras se muestra el factor- g normalizado:

$$\frac{g^*}{g_0} = \frac{(E_2 - E_1)}{\frac{\mu_B B g_0}{2}}, \quad (3.9)$$

donde E_1 y E_2 son los niveles de energía de Zeeman para el estado fundamental.

Antimoniuro de Indio		(InSb)	
Niveles de Energía (meV)	$H_0 = \frac{P_z^2}{2m} + V(z)$	$H_0 + H_{1dR}$	$H_0 + H_{1dD}$
ϵ_1	-88.80	-88.91	-88.82
ϵ_2	-78.95	-79.05	-78.99
ϵ_3	-46.15	-46.26	-46.21
ϵ_4	-19.80	-19.91	-19.85

Cuadro 3.2: Niveles de energía de InSb. Los parámetros $\langle dV/dx \rangle$ y l_x y l_y son los mismos que los de la Figura 3.2.

La Figura 3.5 muestra los resultados para el caso (b) (sólo Rashba) en función de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$. La tendencia a decrecer se observa en todos los materiales, pero la magnitud del mismo varía según el semiconductor. La mayor variación se encuentra en InSb, mientras que en GaAs es prácticamente invariante. Estas diferencias en los decrecimientos del g^*/g_0 se deben a los diferentes valores de γ_R para cada material (ver Cuadro 3.1).

Examinemos qué ocurre con el g^*/g_0 cuando se modifica la forma del potencial longitudinal $V_z(z)$, es decir, variando el ancho de la barrera b y el tamaño de los puntos cuánticos (hasta ahora cada punto cuántico tenía $L_{QD1} = L_{QD2} = 300 \text{ \AA}$).

En la Figura 3.6 (a) se grafica el g^*/g_0 para $b = 30, 130, \text{ y } 330 \text{ \AA}$ en función de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$. Se aumentó el tamaño del ancho de la barrera pero reduciendo al mismo tiempo el tamaño de los puntos cuánticos de manera tal de mantener constante el largo total de la estructura en 630 \AA . Puede notarse que incrementando b se llega gradualmente a tener dos puntos cuánticos desacoplados, y una fuerte variación en el g^* . Por otro lado, en la Figura 3.6 (b), se fijó $b = 30 \text{ \AA}$ y se cambió el tamaño de los puntos. En un caso se tomó $L_{QD1} = 100 \text{ \AA}$ y $L_{QD2} = 500 \text{ \AA}$, y en el otro $L_{QD1} = L_{QD2} = 300 \text{ \AA}$. El caso de potencial simétrico produce

una mayor variación de g^* que el caso asimétrico.

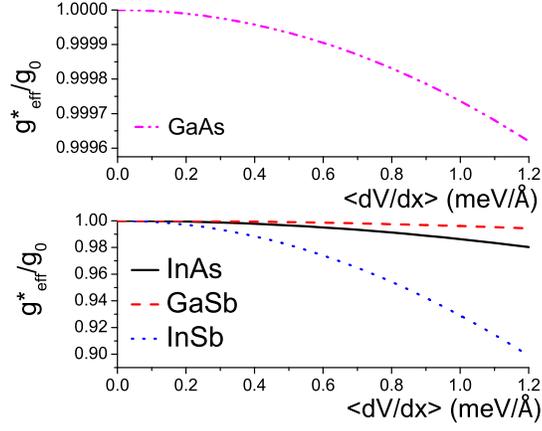


Figura 3.5: Efecto del Hamiltoniano de Rashba en el factor- g efectivo. g^*/g_0 para el estado fundamental para diferentes semiconductores en función de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$.

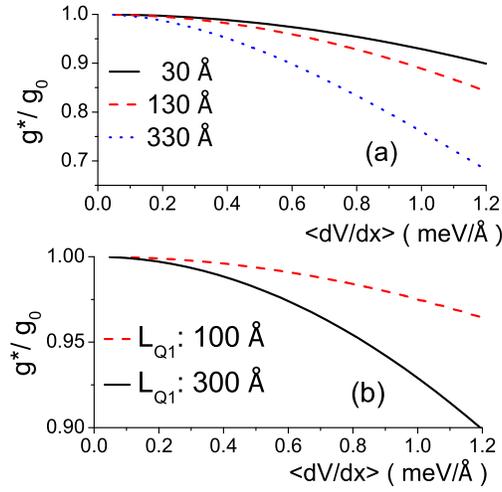


Figura 3.6: Factor- g efectivo para el estado fundamental de la estructura InSb en presencia del efecto Rashba. (a) Para distintos anchos de barrera $b = 30, 130$ y 330 Å y (b) para distintos tamaños de puntos cuánticos. Caso asimétrico: $L_{QD1} = 100$ Å y $L_{QD2} = 500$ Å, caso simétrico: $L_{QD1} = L_{QD2} = 300$ Å.

Con este resultado calculamos el valor medio de S_z en función de $\langle \frac{dV}{dx} \rangle$ para puntos cuánticos de InSb para los cuatro pares de estados de Zeeman, comparando el caso simétrico con el asimétrico. Nuevamente, se consideró un $B = 0.1$ T. Como es de esperarse, en ausencia del parámetro de Rashba, los valores medios son: $\langle S_z \rangle = \pm \frac{1}{2}$. La Figura 3.7 muestra los resultados para una estructura simétrica (los dos pozos iguales), y la Figura 3.8 para una estructura asimétrica (los dos pozos de tamaño diferente).

El caso simétrico muestra un “cruce” en $\langle S_z \rangle$ (Figura 3.7 (a)) mientras que el asimétrico muestra un anticruce (ver Figura 3.8 (a)). Con esta información se recalculó el factor- g efectivo para los cuatro pares de autoestados para el caso simétrico (Figura 3.7 (b)) y el asimétrico (Figura 3.8 (b)). El factor- g efectivo se anula en el cruce de $\langle S_z \rangle$. Esta anulación de g^* es un efecto potencialmente útil en aplicaciones espintrónicas, puesto que puede ser controlado mediante el parámetro $\langle \frac{dV}{dx} \rangle$.

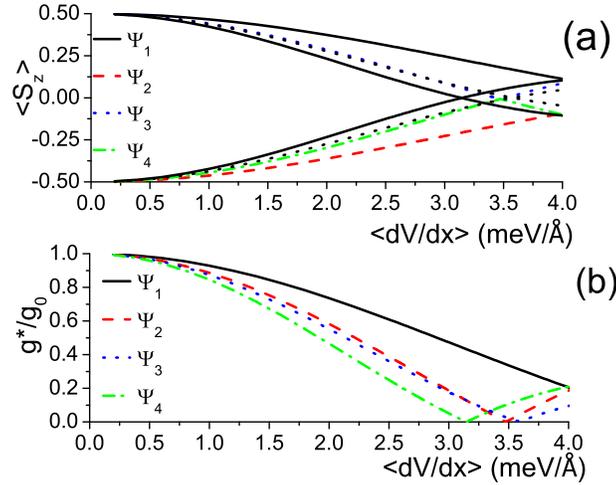


Figura 3.7: Valor medio de S_z y factor- g efectivo para sistemas de InSb con potencial $V_z(z)$ simétrico (dos pozos cuánticos simétricos con $L_{QD1} = L_{QD2} = 300$ Å). a) $\langle S_z \rangle$ como función de $\langle \frac{dV}{dx} \rangle$ para los cuatro niveles de energía; b) g^*/g_0 para los mismos estados.

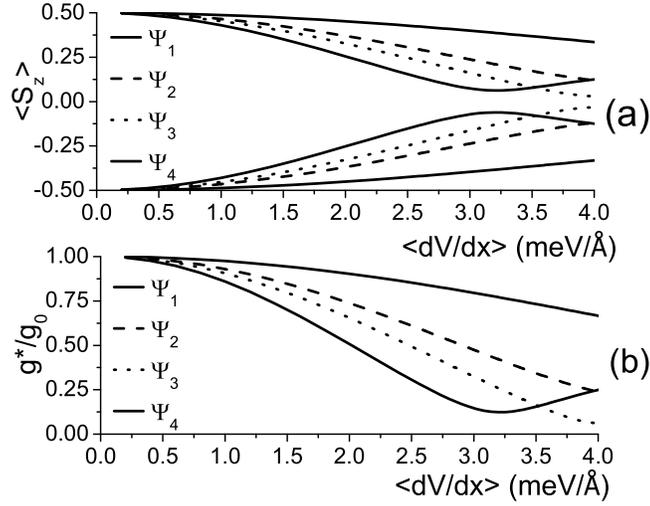


Figura 3.8: Valor medio de S_z y factor- g efectivo para sistemas de InSb con potencial $V_z(z)$ asimétrico (dos pozos cuánticos asimétricos con $L_{QD1} = 100 \text{ \AA}$ y $L_{QD1} = 500 \text{ \AA}$). a) $\langle S_z \rangle$ como función de $\langle \frac{dV}{dx} \rangle$ para los cuatro niveles de energía. b) g^*/g_0 para los mismos estados.

3.2. Tasas de relajación de espín

Luego de estudiar los estados electrónicos de los dos puntos cuánticos acoplados y de analizar los estados de espín debido a la interacción espín-órbita, nos propusimos calcular las transiciones de *spin-flip* inducidas por el *scattering* de fonones entre los estados mezcla producidos por el acoplamiento de Rashba. Se estudiaron los diferentes modos acústicos de fonones presentes en los semiconductores *zinc-blende*. Notese que entre estados de espín puro el acoplamiento con fonones no puede producir transiciones. En cambio, si puede producir las entre estados mezcla como los generados por el efecto Rashba. A pesar de esto, a menudo utilizamos el término de *spin-flip* para referirnos a transiciones entre estados mezcla. Consecuentemente, no habrá relajación de espín mediada por la interacción elec-

trón-fonón para geometrías en las que sólo aparezca el acoplamiento Dresselhaus. En el caso donde el acoplamiento de Rashba está activo, encontramos que las tasas de relajación muestran una fuerte dependencia con el ancho de la barrera que separa ambos puntos cuánticos (b), y puede ser controlada con el campo magnético. Este tipo de heteroestructura provee un sistema interesante donde aparece una competencia entre el gap-simétrico-antisimétrico con el *Zeeman splitting*.

Los anticruces en los niveles de energía que aparecen en el espectro, cada vez que estas dos escalas de energía coinciden, producen fuertes variaciones en las transiciones de espín, es decir, un pico para un valor dado del ancho de la barrera. Asimismo, en otros sistemas de puntos cuánticos se han observado picos similares en las transiciones, los que se deben a efectos de geometría [102, 103]. Además de la diferencia en su naturaleza física, el valor en el ancho de la barrera, para el cual aparece este pico en nuestro sistema, puede ser seleccionado variando el campo magnético, como se verá más adelante. Los Hamiltonianos del sistema considerados nuevamente son:

$$H = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_z(z) + H_B + \frac{\gamma_R}{\hbar} p_z \left\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \right\rangle (\sigma_x - \sigma_y), \quad (3.10)$$

$$H = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_z(z) + H_B + \frac{\gamma_D}{\hbar^3} \sigma_z p_z (\langle p_x^2 \rangle - \langle p_y^2 \rangle), \quad (3.11)$$

donde γ_R y γ_D son constantes que dependen del material, y se tomó inicialmente el ancho de los dos puntos cuánticos de 30 nm con una separación de barrera de 3 nm para luego ser variada, y un campo magnético débil en la dirección z . Dependiendo de cómo sean los potenciales de confinamiento laterales aparecerá Rashba o Dresselhaus únicamente. Los estados que diagonalizan dicho Hamiltoniano serán una combinación de estados con espines *up* y *down*.

En los siguientes cálculos la temperatura utilizada fue 298 K, con un parámetro de Rashba de $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 0.5 \text{ meV}/\text{Å}$ para los semiconductores antimonio de indio (InSb) y arseniuro de galio (GaAs) en presencia de la interacción espín-órbita de Rashba, la cual mezcla estados de espines opuestos. Esto nos permitió calcular transiciones mediadas por fonones acústicos entre el estado fundamental y los dos autoestados excitados más bajos. Se tuvo en cuenta la contribución de todos los modos de los fonones y de los mecanismos de acoplamiento para los cálculos.

Antes de mostrar los resultados de las tasas de relajación es importante observar el comportamiento de los niveles de energía en función del ancho de la barrera central, b .

En la Figura 3.9 a) se muestran los resultados de los primeros cuatro niveles de energía en función del ancho de la barrera central - b - para el caso donde se tiene sólo el acoplamiento Dresselhaus con un campo magnético $B = 0.8 \text{ T}$. El segundo y tercer nivel, los cuales poseen distinto espín, no se mezclan. Sólo muestran un nivel de cruce, pues Dresselhaus sólo corre los niveles de espín sin mezclarlos. En la Figura 3.9 b) y c) se encuentra el valor medio S_z y los niveles de energía, respectivamente, en función de b , para la estructura estudiada, teniendo en cuenta sólo el acoplamiento de Rashba (nuevamente, en presencia de un campo magnético $B = 0.8 \text{ T}$). En este caso, en la Figura 3.9 c) se observa un anticruce entre el segundo y tercer nivel de energía, cuyos estados en S_z se intercambian en $b_c(0.8 \text{ T}) = 11.2 \text{ nm}$. A valores bajos de b , el segundo estado es el espacialmente simétrico con espín *down*, mientras que el tercer estado es el espacialmente antisimétrico con espín *up*. Al aumentar el ancho de la barrera decrece el *splitting* simétrico-antisimétrico (Δ_{SAS} en la Figura 3.1), permitiendo que la interacción espín-órbita produzca una fuerte mezcla. El cual resulta en el anticruce y el cambio de espín que se ven en las Figuras 3.9 b) y c). Este valor de “cruce” es dependiente del campo magnético, ya que éste controla la competencia que existe entre la separación Zeeman y Δ_{SAS} .¹³

¹³ El campo está en la dirección z de la estructura y, por lo tanto, no modifica Δ_{SAS} .

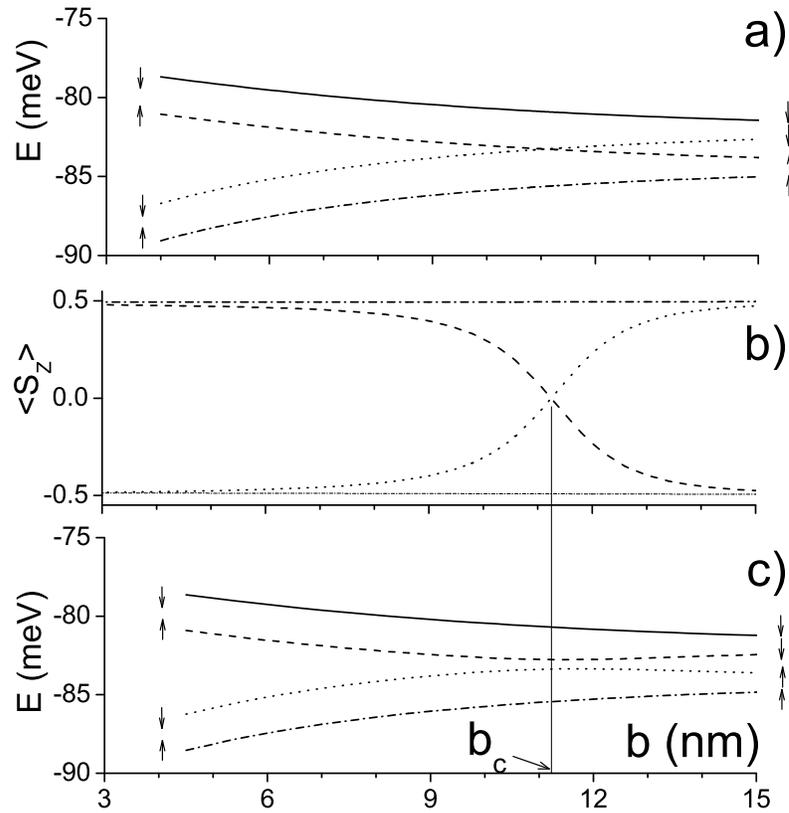


Figura 3.9: InSb: a) Niveles de energía para los 4 niveles más bajos en función del ancho de la barrera central, b , con acoplamiento Dresselhaus. b) y c) $\langle S_z \rangle$ y niveles de energía, respectivamente, con acoplamiento Rashba. $B = 0.8$ T en ambos sistemas. Las flechas indican espín up y down lejos del (anti)cruce.

En la Figura 3.10 a) los niveles de energía y en b) el valor medio de S_z varían en función de b para los cuatro autoestados más bajos y con un campo magnético fijo ($B = 0.8$ T). Al aumentar b , pero sin dejar fijo la longitud de la estructura, las energías tienden a acercarse hasta un punto en el que el segundo y tercer estado se intercambian (ver Figura 3.10 b) $b_c(0.8 \text{ T}) = 11.2$ nm). Por otro lado, si se aumenta b , pero se mantiene fija la longitud

total de la estructura los niveles de energía, se acercan y se elevan (ver Figura 3.11). En la Figura 3.10 c), se muestra b_c con la variación del campo magnético para los semiconductores de GaAs y InSb. Cuando B disminuye, b_c (en el cual el espín cambia) toma valores más altos. En la Figura 3.10 d) se muestra el valor medio $\langle S_z \rangle$ vs b para GaAs y el valor de la barrera, para el cual el segundo y tercer estado se intercambian, resultando en $b_c(0.8 \text{ T}) = 7.7 \text{ nm}$.

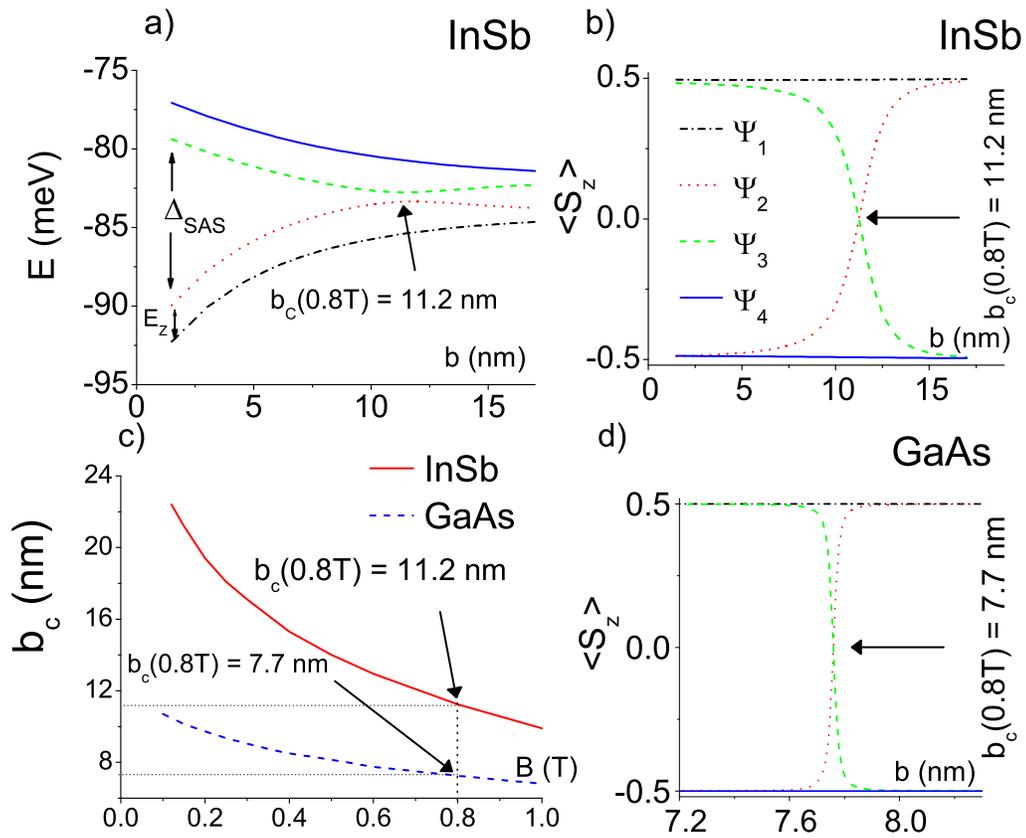


Figura 3.10: InSb: a) Niveles de energía y b) valor medio $\langle S_z \rangle$ en función del ancho de la barrera para los 4 autoestados, $B = 0.8 \text{ T}$. c) b_c en función del campo magnético B para GaAs y InSb. $b_c(T) = 11.2 \text{ nm}$. d) Valor medio de S_z vs b para GaAs. $b_c(0.8\text{T}) = 7.7 \text{ nm}$.

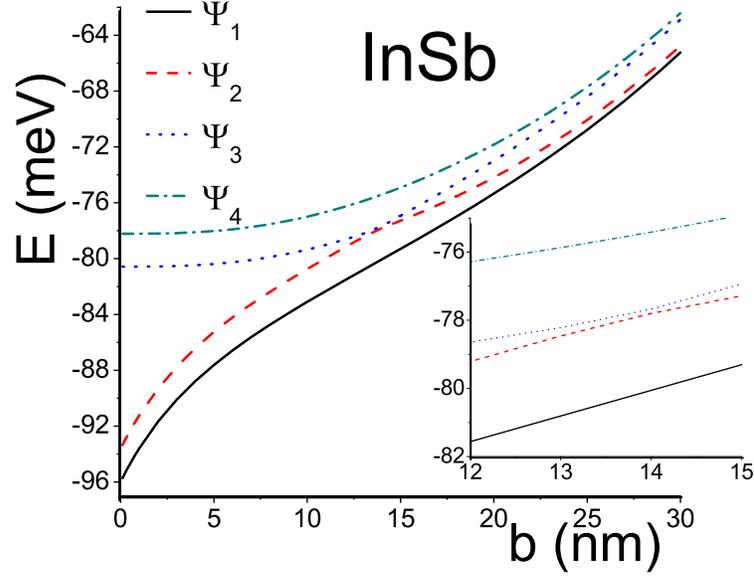


Figura 3.11: InSb: Niveles de energía vs b manteniendo fija la longitud total de la estructura en $L = 103$ nm. Ψ_1 es el estado fundamental, Ψ_i , $i = 2,3,4$ son estados excitados. $B = 0.8$ T y $\langle dV/dx \rangle = 0.1$ meV/Å.

3.2.1. Tasas de relajación en función del campo magnético

Una vez establecido cómo la interacción Rashba influye en los niveles de energía de las diferentes heteroestructuras, procedimos a estudiar la tasa de relajación de espín entre el estado fundamental y los dos estados excitados de energía más bajos, teniendo en cuenta la contribución de los distintos fonones acústicos, es decir, el Potencial de deformación (PD), el Potencial piezoeléctrico longitudinal (Piezo LA), el transversal 1 (Piezo TA1) y el transversal 2 (Piezo TA2) [104]. Partiendo de la Regla de oro de Fermi:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{Q}, \alpha} |\langle f | U_{\mathbf{Q}, \alpha} | i \rangle|^2 n \delta(\Delta E - \hbar \omega_{\alpha}), \quad (3.12)$$

donde $\mathbf{Q} = (q_x, q_y, q_z) = (\mathbf{q}, q_z)$ es el momento del fonón, α indica los fonones acústicos: modo longitudinal, ℓ , y modos transversales, $t = TA1$ y $TA2$, $\Delta E = E_f - E_i$ y n es la distribución de fonones de Bose-Einstein con energía $\hbar\omega_\alpha = \hbar c_\alpha Q$. $\langle f |$ y $\langle i |$ son los estados final e inicial, respectivamente, obtenidos por diagonalización numérica exacta del Hamiltoniano $H = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_z$. El potencial $U_{Q,\alpha}$ posee dos contribuciones: Potencial de deformación $\Xi_\ell(\mathbf{Q})$ y Potencial piezoeléctrico $\Lambda_{\ell,t}(\mathbf{Q})$ [105]:

$$U_{q,\alpha=\ell,t} = (\Xi_\ell(\mathbf{Q}) + i\Lambda_{\ell,t}(\mathbf{Q}))e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.13)$$

Para semiconductores *zinc-blende*, los potenciales de fonones se escriben en coordenadas cilíndricas como:

$$\begin{aligned} \Xi_\ell(\mathbf{Q}) &= \Xi_0 \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V c_\ell}} \sqrt{q}, \\ \Lambda_\ell(\mathbf{Q}) &= \frac{6\pi h_{14}}{\kappa} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V c_\ell}} \sin(2\phi) \frac{Q^2 q_z}{q^{7/2}}, \\ \Lambda_{TA1}(\mathbf{Q}) &= \frac{4\pi h_{14}}{\kappa} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V c_{TA}}} \cos(2\phi) \frac{Q q_z}{q^{5/2}}, \\ \Lambda_{TA2}(\mathbf{Q}) &= \frac{2\pi h_{14}}{\kappa} \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho V c_{TA}}} \sin(2\phi) \frac{Q^3}{q^{7/2}} \left(2 \frac{q_z^2}{Q^2} - 1\right), \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde Ξ_0 y h_{14} son las constantes del *bulk*, κ es la constante dieléctrica, ρ es la densidad de masa, V es el volumen, y $c_{\ell,TA1,TA2}$ son las velocidades del sonido de cada modo (ver deducción en el Capítulo 2.2).

Usando las ecuaciones del Capítulo 2.2 para el cálculo de las tasas de relajación de espín debido a cada una de las contribuciones de fonones, para el Potencial de deformación:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{\Xi_0^2}{8\pi^2 \rho c_l} \int \int \int dQ d\phi dq \frac{Qq^2}{\sqrt{q^2 - Q^2}} n e^{-\frac{Q^2}{2}(\cos^2(\phi)/\alpha_x - \sin^2(\phi)/\alpha_y)} \cdot \int dz e^{i\sqrt{q^2 - Q^2}z} \varphi_f^*(z) \varphi_i(z) \delta\left(\frac{\Delta E}{\hbar c_l} - q\right), \quad (3.15)$$

donde $q_x = Q \cos(\phi)$, $q_y = Q \sin(\phi)$, $q^2 = Q^2 + q_z^2$, $dq_x dq_y = Q dQ d\phi$, $dq_z = \frac{q}{\sqrt{q^2 - Q^2}} dq$.

$\varphi_j(z) = \sum_{n=1}^{300} A_{j,n} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi z/L) |+\rangle + B_{j,n} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(n\pi z/L) |-\rangle$, $j = i, f$. De forma similar pueden escribirse las ecuaciones para el resto de los Potenciales piezoeléctricos.

En la Figura 3.12 se muestran las contribuciones a las tasas de relajación de espín (SR) en los QDs de InSb y GaAs debido a cada uno de los diferentes acoplamientos de fonones acústicos: Potencial de deformación (PD) longitudinal, Potencial piezoeléctrico longitudinal (Piezo LA) y transversales (TA1 y TA2). Las tasas corresponden a transiciones entre los dos estados más bajos de energía. En los QDs de InSb se observa que la tasa de SR es dominada por el Potencial de deformación, mientras que para GaAs domina el Potencial piezoeléctrico TA1. Asimismo, puede verse que en el caso de InSb, las contribuciones provenientes del Piezo TA2 y LA son varios órdenes de magnitud menor para campos magnéticos superiores a 0.3 T. Lo mismo ocurre para el caso de PD en comparación con el resto de los mecanismos en GaAs, siendo el mismo despreciable. La interacción SO resulta en mayores tasas de relajación de espín para InSb que para GaAs, debido al pequeño *band-gap*.

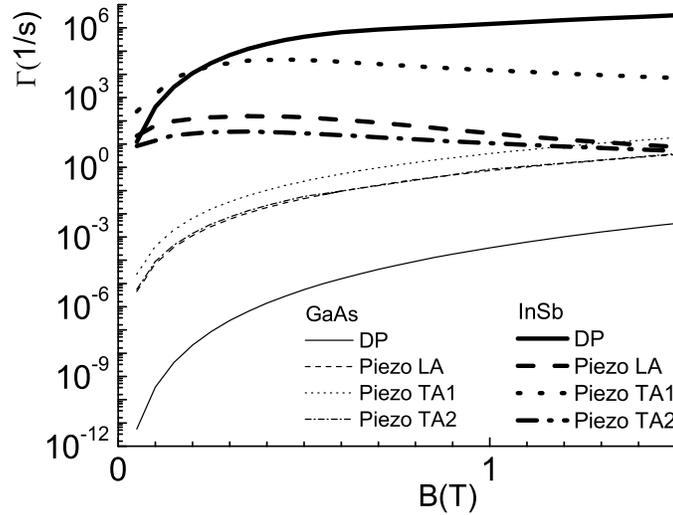


Figura 3.12: Tasas de relajación de espín debido a los diferentes fonones acústicos: Potenciales de deformación (DP), piezoeléctrico longitudinal (Piezo LA), transverso 1 (Piezo TA1) y transverso 2 (Piezo TA2), para InSb (trazos gruesos) y GaAs (trazos finos) en función del campo magnético. Se consideró $b_c = 3$ nm.

En la Figura 3.13 se muestra la suma de todas las contribuciones de los fonones a la tasa de relajación para las transiciones del primer (Ψ_2) y del segundo (Ψ_3) estado excitado al estado fundamental (Ψ_1) en función de la separación de la barrera b . Está representado para dos valores de campo magnético: $B = 0.5$ T y $B = 0.8$ T. La transición de *spin-flip* ($\Gamma_{\uparrow\downarrow}$) *up-to-down* corresponde a Ψ_2 para valores bajos de b , y Ψ_3 para valores altos de b . Para un campo dado, esta tasa de *spin-flip* muestra un pico en un ancho de barrera que coincide con el cruce b_c , como se observa en la Figura 3.13. Además, al aumentar el campo magnético, la posición de este pico en $\Gamma_{\uparrow\downarrow}$ se corre hacia valores menores de b_c . Análogamente, puede verse un pico en la Figura 3.14 para GaAs, con $B = 0.1$ T y $B = 0.8$ T. Para esta heteroestructura, el pico es más angosto que en el caso de InSb, debido a que el acoplamiento de SO es más débil.

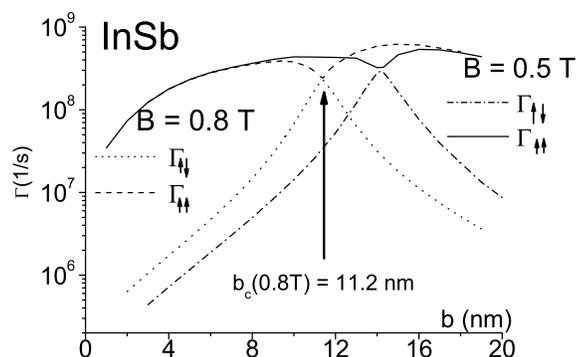


Figura 3.13: InSb: Tasas de relajación de espín en función del ancho de la barrera central b para dos valores dados de campo magnético ($B = 0.8$ T y $B = 0.5$ T) para las transiciones del estado fundamental al primer excitado ($\Gamma_{\uparrow\downarrow}$) y al segundo excitado ($\Gamma_{\uparrow\uparrow}$).

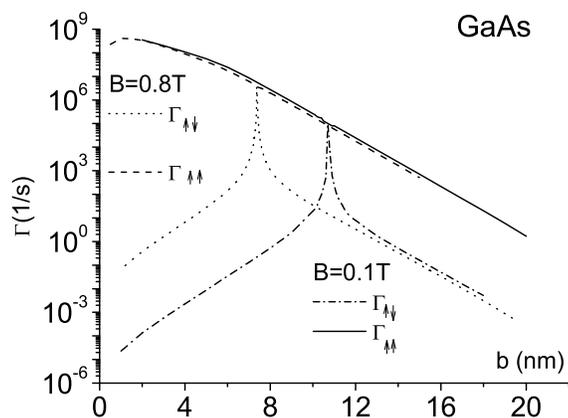


Figura 3.14: GaAs: Idem que la Fig.3.13, para $B = 0.1$ T y $B = 0.8$ T para las mismas transiciones.

Hay que tener en cuenta que estas transiciones no son exactamente “*spin-flip*”, particularmente en el pico y alrededor de él, ya que los estados excitados involucrados no son autoestados de espín. Por otro lado, las transiciones $\Gamma_{\uparrow\uparrow}$ muestran pequeños *dips* para la misma posición b_c , reflejando también el mismo carácter de mezcla de espines de los estados Ψ_2 y Ψ_3 . La aparición de los picos en las tasas de relajación de espín provienen de las mezclas de niveles cuando los estados simétrico-antisimétrico se anticruzan en el doble punto cuántico. Finalmente, se calcularon las tasas de relajación teniendo en cuenta las mismas transiciones para el caso de interacción SO debido al acoplamiento Dresselhaus. Estas transiciones no son *spin-flip*, sino que son de tipo orbital mediadas por *scattering* de fonón. En la Figura 3.15 se observa la tasa de relajación para GaAs y InSb teniendo en cuenta la interacción Dresselhaus, no se registran picos.

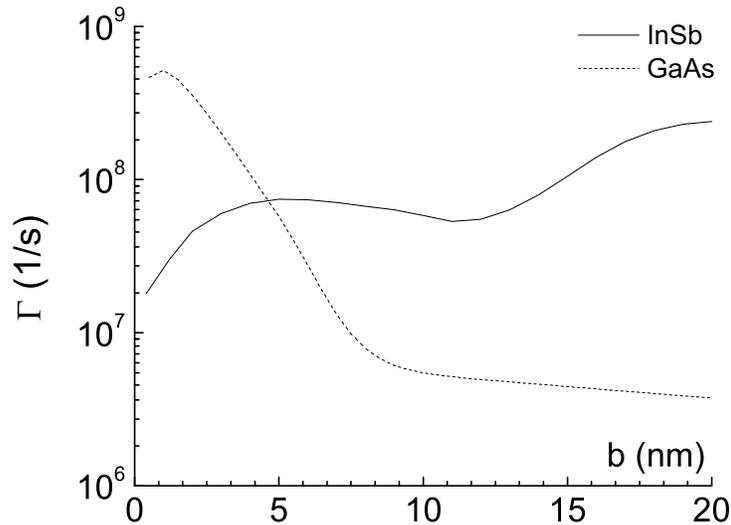


Figura 3.15: Tasas de relajación entre estados en función del ancho de la barrera central b tomando en cuenta la contribución de todos los fonones para el caso de GaAs y InSb. Transiciones del estado fundamental al primer excitado (GS-1).

3.2.2. Tasas de relajación en función de la temperatura y $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$

Luego de haber estudiado las tasas de relajación en función del campo magnético, analizamos la influencia de la temperatura y $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$ en los resultados de los mismos para determinar la forma más adecuada de variar su valor.

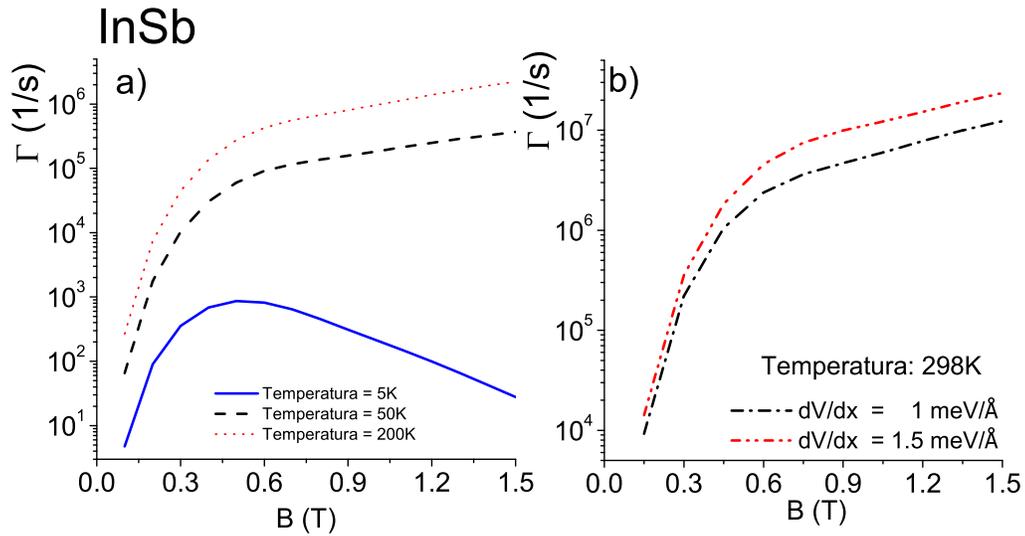


Figura 3.16: Tasas de relajación de espín debido al Potencial de deformación. a) para las temperaturas 5K, 50K y 200K. b) para $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 1$ meV/Å y 1.5 meV/Å.

En la Figura 3.16 a) se grafica la tasa de relajación en función del campo magnético para tres temperaturas distintas - $T = 5$ K, 50 K y 200 K - para el Potencial de deformación en la heteroestructura de InSb. La tasa de relajación para un rango de temperaturas que va desde 50 K a 300 K ¹⁴ varía un orden de magnitud aproximadamente, sin embargo su forma es similar creciendo monótonamente al aumentar el valor del campo magnético. Para temperaturas más bajas, $T = 5$ K, la tasa de relajación baja hasta tres órdenes de magnitud

¹⁴ En la figura solo se muestra dos temperaturas: 50 K y 200 K.

comparado con $T = 200$ K. La curva presenta un máximo y luego decrece monótonamente para campos mayores a 0.7 T. En la Figura 3.16 b), dada una temperatura fija $T = 298$ K, se graficó la tasa de relajación para dos parámetros de Rashba diferentes. En este caso, aumentar el valor del parámetro de Rashba no cambia significativamente el valor la tasa. Para valores menores a 0.5 T se lo puede considerar despreciable. Esto demuestra que el valor de la tasa de relajación de espín puede ser modificado en mayor medida por la temperatura que por el parámetro de Rashba para InSb.

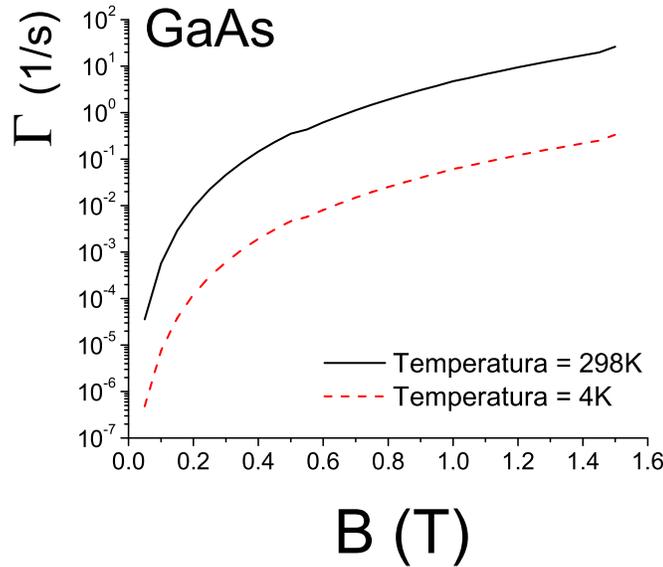


Figura 3.17: Tasas de relajación de espín en función del campo magnético para GaAs debido a la contribución de todos los fonones para las temperaturas 4K y 298K. $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 0.5$ meV/Å

En la Figura 3.17 se grafica la tasa de relajación en función del campo magnético para GaAs comparando dos temperaturas $T = 4$ K y $T = 298$ K. Puede notarse la diferencia con la Figura 3.16 a) donde aparece un máximo para $T = 5$ K mientras que para GaAs una baja temperatura no influye en la tasa de relajación. Esto se debe a que la diferencia de

energía entre los estados involucrados es tres veces menor para GaAs que para InSb dando lugar a que $n_q = 1/(\exp(\Delta E/Tk_b) - 1)$ es prácticamente constante con la temperatura.

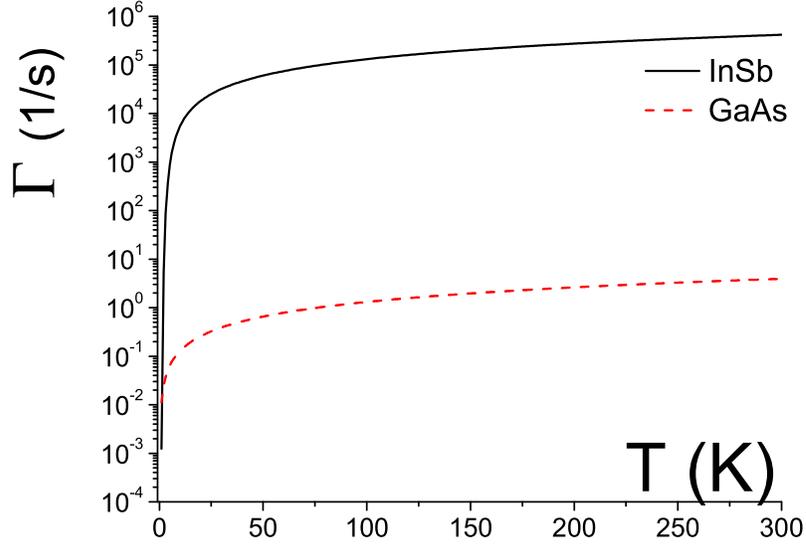


Figura 3.18: Tasas de relajación de espín en función de la temperatura debido a la contribución de todos los fonones para InSb y para GaAs. $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 0.5 \text{ meV}/\text{\AA}$ y $B = 1 \text{ T}$.

En la Figura 3.18 se muestra la dependencia de la tasa de relajación con la temperatura para InSb y GaAs. Para temperaturas mayores a 150 K el aumento en el valor de la tasa es cada vez menor para ambos materiales. En la Figura 3.19 se observa la dependencia cuadrática de la tasa de relajación de espín con el parámetro de Rashba para cada una de las contribuciones de fonones. GaAs presenta la misma dependencia con el parámetro de Rashba por lo que no se mostrará en este trabajo.

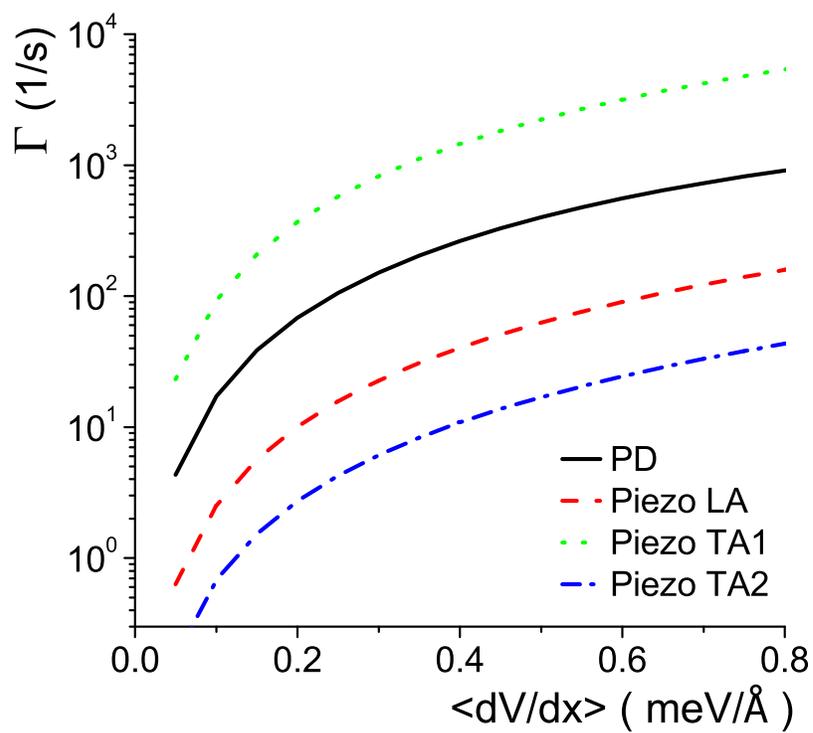


Figura 3.19: InSb: Tasa de relajación en función del parámetro $\langle dV/dx \rangle$ para las distintas contribuciones de fonones.

Capítulo 4

Dos electrones en dos puntos cuánticos cuasi-unidimensionales

4.1. Estructura electrónica

4.1.1. Dos electrones sin interacción

Hamiltoniano y funciones de onda

Luego de haber estudiado el sistema con un electrón, consideramos un sistema con dos electrones en dos puntos cuánticos idénticos de 30 nm acoplados, en el cual la dirección z es mucho mayor que las direcciones transversales (aproximadamente 2 nm) y, por lo tanto, sólo el primer modo transversal se encuentra activo. Como primer caso se tomaron dos electrones sin interacción y posteriormente con interacción Rashba y Coulomb, de manera tal de analizar la influencia de los mismos en las propiedades del sistema (Capítulos 4.1.2 y 4.1.3). En nuestros cálculos consideramos estructuras de semiconductores como AlInSb, AlGaAs y AlInAs.

El Hamiltoniano de los dos electrones independientes en dicha estructura viene dado por:

$$H_{2e^-} = \frac{P_{z_1}^2}{2m^*} + V_z(z_1) + \frac{P_{z_2}^2}{2m^*} + V_z(z_2), \quad (4.1)$$

donde m^* es la masa efectiva de la banda de conducción, $p_{x,y,z}$ es el momento y $\sigma_{x,y,z}$ denotan las matrices de Pauli.

Como primer ejemplo estudiamos la heteroestructura compuesta de AlInSb. Para formar la base de autofunciones en el espacio de Hilbert de dos electrones se utilizaron todos los estados $u_n(z)$ ($n = 1, 4$ para este caso) que diagonalizan la matriz de un electrón $H_0 = \frac{P_z^2}{2m^*} + V_z(z)$ (ver Figura 3.1), los cuales generan una base de 28 estados de dos partículas, es decir:

$$\begin{aligned} \varphi_i &= u_i(z_1)u_i(z_2) |0, 0\rangle, \\ \varphi_{j+3} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_j(z_2) + u_j(z_1)u_1(z_2)) |0, 0\rangle, \\ \varphi_{k+5} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2(z_1)u_k(z_2) + u_k(z_1)u_2(z_2)) |0, 0\rangle, \\ \varphi_{10} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_3(z_1)u_4(z_2) + u_4(z_1)u_3(z_2)) |0, 0\rangle, \\ \varphi_{l+9} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)) |1, 1\rangle, \\ \varphi_{l+12} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)) |1, -1\rangle, \\ \varphi_{l+15} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_l(z_2) - u_l(z_1)u_1(z_2)) |1, 0\rangle, \\ \varphi_{m+17} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)) |1, 1\rangle, \\ \varphi_{m+19} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)) |1, -1\rangle, \\ \varphi_{m+21} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_2(z_1)u_m(z_2) - u_m(z_1)u_2(z_2)) |1, 0\rangle, \\ \varphi_{26} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)) |1, 1\rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\varphi_{27} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)) |1, -1\rangle, \\
\varphi_{28} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_3(z_1)u_4(z_2) - u_4(z_1)u_3(z_2)) |1, 0\rangle,
\end{aligned} \tag{4.2}$$

donde $i = 1, \dots, 4$, $j, l = 2, \dots, 4$, $k, m = 3, 4$. Las funciones de onda de espín para dos partículas son el estado singlete $|S = 0, m_S = 0\rangle$ y los estados triplete $|1, 1\rangle$, $|1, 0\rangle$, $|1, -1\rangle$.

Las autofunciones son una combinación lineal de los φ_k :

$$\Psi_i(z_1, z_2) = \sum_{k=1}^{28} C_{ik} \varphi_k(z_1, z_2), \tag{4.3}$$

donde $i = 1, \dots, 28$ y los coeficientes C_{ik} se obtienen de la diagonalización numérica.

A partir de $H_{2e^-} = \sum_{i=1}^2 \frac{P_{z_i}^2}{2m^*} + V_{z_i}(z_i)$ se puede generar una matriz de 28x28 diagonal, donde sus elementos son de la forma $\varepsilon_i + \varepsilon_j$ con $i, j = 1, \dots, 4$ y $i \leq j$. ε_i son los niveles de energía para el caso de un electrón (ver Cuadro 3.1). Las energías $\varepsilon_i + \varepsilon_j$ con $i \neq j$ tienen degeneración 4 por el espín. En el Cuadro 4.1 se encuentran los valores de energía para los dos electrones sin interacción para los semiconductores de $\text{Al}_{0.1}\text{In}_{0.9}\text{Sb}$, $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ y $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$. Los seis estados con energías más bajas dados en la ecuación 4.2 son:

$$\begin{aligned}
\Psi_1(z_1, z_2) &= u_1(z_1)u_1(z_2) |0, 0\rangle, \\
\Psi_2(z_1, z_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_2(z_2) - u_2(z_1)u_1(z_2)) |1, 1\rangle, \\
\Psi_3(z_1, z_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_2(z_2) + u_2(z_1)u_1(z_2)) |0, 0\rangle, \\
\Psi_4(z_1, z_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_2(z_2) - u_2(z_1)u_1(z_2)) |1, 0\rangle, \\
\Psi_5(z_1, z_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}} (u_1(z_1)u_2(z_2) - u_2(z_1)u_1(z_2)) |1, -1\rangle, \\
\Psi_6(z_1, z_2) &= u_2(z_1)u_2(z_2) |0, 0\rangle,
\end{aligned} \tag{4.4}$$

$H_{2e^-} = \sum_{i=1}^2 \frac{P_{z_i}^2}{2m^*} + V_{z_i}$	AlInSb (meV)	AlGaAs (meV)	AlInAs (meV)
$\epsilon_1 + \epsilon_1$	-177.60	-431.76	-1283.23
$\epsilon_1 + \epsilon_2$	-167.75	-417.04	-1282.35
$\epsilon_1 + \epsilon_3$	-134.95	-415.78	-1240.24
$\epsilon_1 + \epsilon_4$	-108.60	-392.70	-1236.66
$\epsilon_2 + \epsilon_2$	-157.90	-402.32	-1281.48
$\epsilon_2 + \epsilon_3$	-125.10	-401.06	-1239.36
$\epsilon_2 + \epsilon_4$	-98.75	-377.98	-1235.79
$\epsilon_3 + \epsilon_3$	-92.30	-399.80	-1197.24
$\epsilon_3 + \epsilon_4$	-65.95	-376.72	-1193.67
$\epsilon_4 + \epsilon_4$	-39.60	-353.64	-1190.10

Cuadro 4.1: Valores de energía para un sistema de dos electrones sin interacción de AlInSb, AlGaAs y AlInAs.

En la Figura 4.1 se muestran las curvas de nivel de la densidad de probabilidad de dos electrones sin interacción (ecuación 4.4) [106]. $\Psi_1(z_1, z_2)$ es el estado fundamental, y los $\Psi_{i=2,6}(z_1, z_2)$ son los estados excitados de nivel de energía más baja. Los cuatro lóbulos de Ψ_1 poseen igual amplitud. Los estados Ψ_2, Ψ_3 y Ψ_4 son estados triplete. Ψ_5 describe a los dos electrones en un mismo punto cuántico (localización con *entanglement*). Ψ_6 es similar a Ψ_1 pero al contener orbitales antisimétricos (u_2) posee pequeña amplitud en la barrera que separa a los puntos cuánticos.

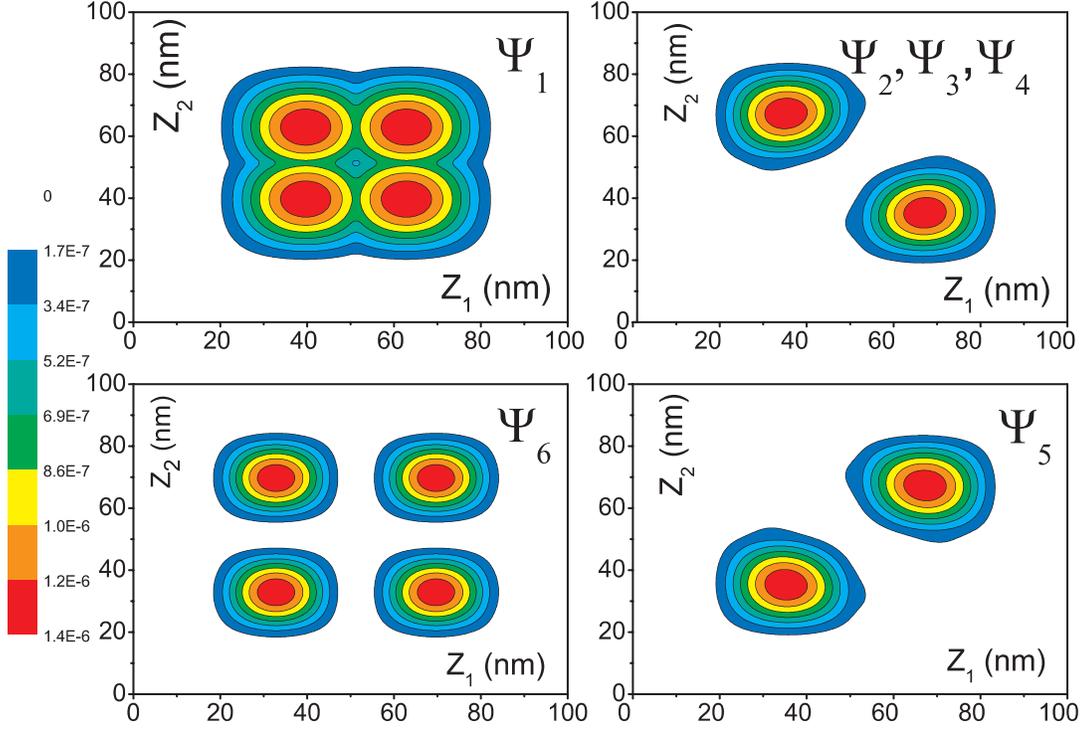


Figura 4.1: InSb: Curvas de nivel de la densidad de probabilidad de los primeros seis estados de dos electrones sin interacción. Ψ_1 es el estado fundamental (singlete), $\Psi_{2,3,4}$ son estados excitados (triplete).

Niveles de energía y $\langle S_z \rangle$

Para el estudio de los niveles de energía y los valores medios de S_z se introdujo un campo magnético en el Hamiltoniano, como puede verse [107]:

$$H_Z = -\mathbf{u} \cdot \mathbf{B} = -\left(\frac{-g_0\mu_B\mathbf{S}}{\hbar}\right) \cdot \mathbf{B} = \frac{1}{2}g_0\mu_B B(\sigma_{z_1} + \sigma_{z_2}). \quad (4.5)$$

donde \mathbf{u} es el momento magnético, μ_B es el magnetón de Bohr, g_0 es el factor- g , \mathbf{B} es el

campo magnético en la dirección z , y σ_{z_1} y σ_{z_2} son las componentes z de las matrices de Pauli. Este Hamiltoniano de Zeeman actúa sobre la parte de espín de las funciones de onda de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 H_Z|0,0\rangle &= 0|0,0\rangle, \\
 H_Z|1,0\rangle &= 0|1,0\rangle, \\
 H_Z|1,\pm 1\rangle &= \pm\mu_B g B|1,\pm 1\rangle,
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

En la Figura 4.2 se muestran los niveles de energía y el valor medio de S_z para el antimonio de indio en función del campo magnético. Como se mencionó anteriormente, la estructura AlInSb posee 28 niveles de energía provenientes de la combinación de los 4 estados ligados que presenta el sistema de una sola partícula. Las estructuras de AlGaAs y de AlInAs poseen 12 estados de un electrón en lugar de 4, como ocurre en la de AlInSb. Con esta cantidad de estados, la dimensión de la matriz del Hamiltoniano es muy grande y requiere mucho tiempo computacional para resolver los cálculos. Por este motivo, se tomaron solamente los primeros 4 estados del sistema de un electrón para formar una base de dos electrones. Sin embargo, los estados que no se tuvieron en cuenta para formar la base completa de dos electrones se encuentran a niveles de energía muy por encima de estos, haciendo que esta sea una buena aproximación.

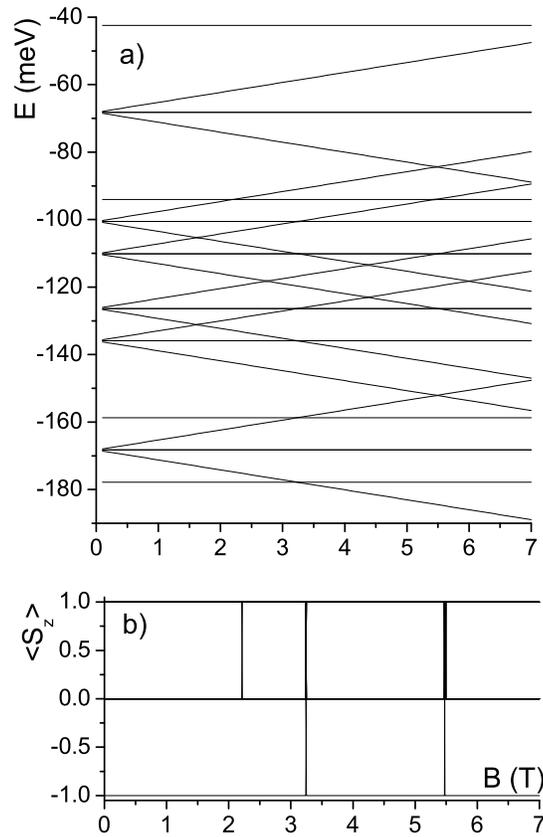


Figura 4.2: InSb: a) Niveles de energía, y b) valor medio de $S_z = S_{z_1} + S_{z_2}$ en función del campo magnético para el sistema de dos electrones sin interacción.

En la Figura 4.3 se muestran los niveles de energía y sus valores medios de S_z para los distintos estados de AlInAs y AlGaAs. Pueden observarse los diferentes rangos de energías en los puntos cuánticos para cada una de las heteroestructuras: entre -40 a -200 meV para AlInSb, entre -1190 a -1290 meV para AlInAs, entre -399 a -432 meV para GaAs.

En estas últimas dos figuras las funciones de onda espaciales no dependen del campo magnético y sólo las energías de Zeeman cambian con B , las energías presentan una dependencia lineal con el campo. Para campo magnético nulo, Ψ_1 es un estado singlete ($|0, 0\rangle$,

$S_z = 0$), pero acercándose a $B = 3$ T (en InSb) y a $B = 1$ T (en InAs) aparece un *crossing*, y su parte de espín se transforma en triplete $|1, 1\rangle$ ($S_z = 1$). En el cruce, el primer estado excitado Ψ_2 va de $S_z = 1$ a $S_z = 0$. Para el caso de AlGaAs no aparecen *crossings* en el rango de campo magnético graficado debido al pequeño valor del factor- g de este material (-0.44). Pero puede decirse que para campos mayores a 6 T aparecerá un cruce similar a los de InSb y InAs. Hay algunos niveles que se encuentran degenerados, como Ψ_2 , Ψ_3 y Ψ_4 para $B = 0$ T, pero con $S_z = 1, 0, -1$ respectivamente, y su degeneración se rompe al aumentar el campo magnético.

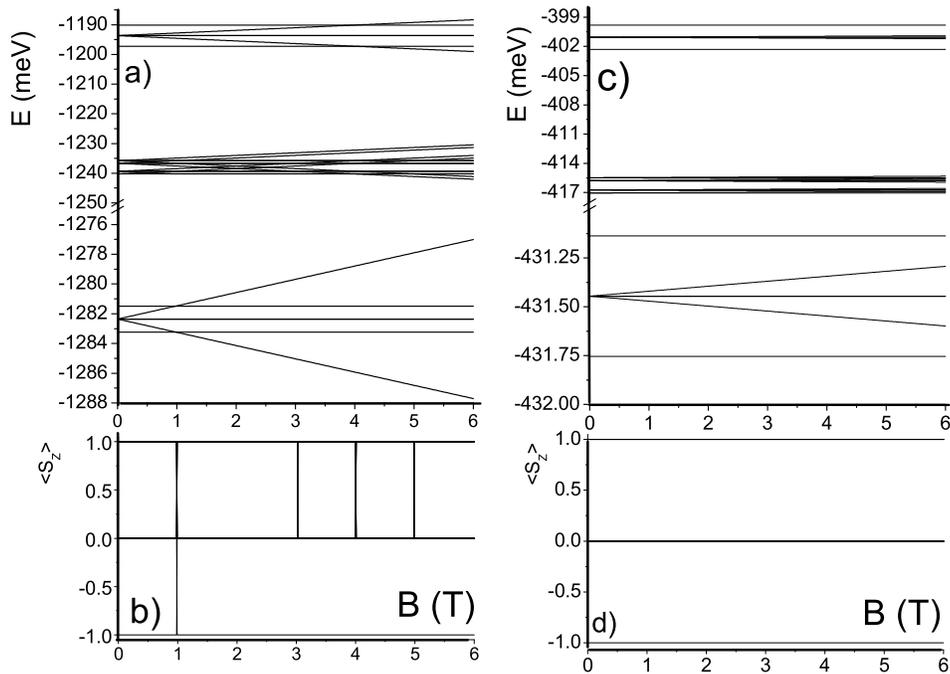


Figura 4.3: Niveles de energías (a) para los puntos cuánticos de AlInAs, (c) de AlGaAs y valor medio de $S_z = S_{z_1} + S_{z_2}$ en función del campo magnético para los puntos cuánticos de (b) AlInAs y de (d) AlGaAs.

4.1.2. Dos electrones con interacción espín-órbita

Hamiltoniano y funciones de onda

Considerando la interacción espín-órbita de tipo Rashba en el sistema de dos electrones sin interacción de la sección 4.1.1 el Hamiltoniano se escribe:

$$H_{1d} = \frac{P_{z_1}^2}{2m^*} + V_z(z_1) + \frac{P_{z_2}^2}{2m^*} + V_z(z_2) + H_{1dR}, \quad (4.7)$$

donde m^* es la masa efectiva, $p_{x,y,z}$ es el momento, $\sigma_{x,y,z}$ denotan las matrices de Pauli y H_{1dR} corresponde al Hamiltoniano cuasi-unidimensional del acoplamiento de Rashba.

$$H_{1dR} = H_{1dR_1} + H_{1dR_2} = \frac{\gamma_R}{\hbar} \left\langle \frac{\partial V}{\partial x_1} \right\rangle p_{z_1} (\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1}) + \frac{\gamma_R}{\hbar} \left\langle \frac{\partial V}{\partial x_2} \right\rangle p_{z_2} (\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2}), \quad (4.8)$$

Para formar la matriz correspondiente a la interacción SO de Rashba, se debe conocer cómo actúan las matrices de Pauli sobre las funciones de espín de dos partículas, es decir:

$$\begin{aligned} (\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})|++\rangle &= ((1+i)|+\rangle\langle-| + (1-i)|-\rangle\langle+|)_1 \otimes 1_2 |++\rangle, \\ &= (1-i)|-+\rangle, \\ (\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})|--\rangle &= (1+i)|+-\rangle, \\ (\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}}((1-i)|--\rangle \mp (1+i)|++\rangle), \end{aligned} \quad (4.9)$$

donde σ_{x_1} y σ_{y_1} actúan sobre $|+\rangle$ o $|-\rangle$ de la primera partícula de los estados $|\pm\pm\rangle$ y $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle)$. De forma similar se obtienen los casos para $(\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2})$ actuando sobre la segunda partícula en los estados $|\pm\pm\rangle$ y $\frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle \pm |-+\rangle)$. Finalmente, los elementos de matriz no nulos son:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle + - | \mp \langle - + |)(\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})| + + \rangle &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i), \\
\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle + - | \mp \langle - + |)(\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})| - - \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i), \\
\langle + + |(\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})\frac{1}{\sqrt{2}}(| + - \rangle \mp | - + \rangle) &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i), \\
\langle - - |(\sigma_{x_1} - \sigma_{y_1})\frac{1}{\sqrt{2}}(| + - \rangle \mp | - + \rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i), \\
\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle + - | \mp \langle - + |)(\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2})| + + \rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i), \\
\frac{1}{\sqrt{2}}(\langle + - | \mp \langle - + |)(\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2})| - - \rangle &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i), \\
\langle + + |(\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2})\frac{1}{\sqrt{2}}(| + - \rangle \mp | - + \rangle) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i), \\
\langle - - |(\sigma_{x_2} - \sigma_{y_2})\frac{1}{\sqrt{2}}(| + - \rangle \mp | - + \rangle) &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - i),
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Los elementos de matriz correspondientes a la parte espacial del término de Rashba se obtienen a partir de:

$$\begin{aligned}
u_i(z_1)u_j(z_2)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z_1})u_k(z_1)u_l(z_2) &= -i\hbar \int_0^L u_i(z_1)\frac{\partial}{\partial z_1}u_k(z_1)dz_1 \int u_j(z_2)u_l(z_2)dz_2, \\
&= -i\hbar \delta_{jl} \sum_{n,m=1;n \neq m}^{300} C_{in}C_{km} \frac{2mn}{L(n^2 - m^2)}(1 - (-1)^{n+m}),
\end{aligned} \tag{4.11}$$

$$\begin{aligned}
u_i(z_1)u_j(z_2)(-i\hbar\frac{\partial}{\partial z_2})u_k(z_1)u_l(z_2) &= -i\hbar \int_0^L u_j(z_2)\frac{\partial}{\partial z_2}u_l(z_2)dz_2 \int u_i(z_1)u_k(z_1)dz_1, \\
&= -i\hbar \delta_{ik} \sum_{n,m=1;n \neq m}^{300} C_{jn}C_{lm} \frac{2mn}{L(n^2 - m^2)}(1 - (-1)^{n+m}),
\end{aligned} \tag{4.12}$$

A modo de ejemplo, se muestra el cálculo de uno de los elementos no nulos de la matriz de H_{1dR} , y en forma similar se puede obtener el resto de los elementos:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi_1 | H_{1dR} | \varphi_{11} \rangle &= \\
&= -\alpha_R \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \int_0^L \int_0^L u_1(z_1)u_1(z_2)p_{z_1} \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1(z_1)u_2(z_2) - u_2(z_1)u_1(z_2))dz_1dz_2 + \\
&\quad + \alpha_R \frac{(1-i)}{\sqrt{2}} \int_0^L \int_0^L u_1(z_1)u_1(z_2)p_{z_2} \frac{1}{\sqrt{2}}(u_1(z_1)u_2(z_2) - u_2(z_1)u_1(z_2))dz_1dz_2, \\
&= -\alpha_R \frac{(1-i)}{2} \left[\int \int u_1u_1p_{z_1}u_1u_2dz_1dz_2 - \int \int u_1u_1p_{z_1}u_2u_1dz_1dz_2 \right] + \\
&\quad + \alpha_R \frac{(1-i)}{2} \left[\int \int u_1u_1p_{z_2}u_1u_2dz_1dz_2 - \int \int u_1u_1p_{z_2}u_2u_1dz_1dz_2 \right], \\
&= -\gamma_R \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle (1+i) \sum_{n,m=1;n \neq m}^{300} C_{1n}C_{2m} \frac{2mn}{L(n^2 - m^2)} (1 - (-1)^{n+m}), \quad (4.13)
\end{aligned}$$

donde $\alpha_R = \frac{\gamma_R}{\hbar} \left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle$ y $L = 103$ nm es el tamaño de la heteroestructura con los dos puntos cuánticos.

A continuación se describen las seis primeras funciones de onda que diagonalizan el sistema con dos electrones no interactuantes con una interacción Rashba de parámetro $\left\langle \frac{dV}{dx} \right\rangle = 0.5$ meV/Å, en ausencia de campo magnético, para la heteroestructura AlInSb en la base de estados de la ecuación 4.2:

$$\begin{aligned}
\Psi_1 &= (0.998; 0.000)\varphi_1 - (0.006; 0.000)\varphi_6 + (0.009; 0.000)\varphi_2 + (0.002; 0.000)\varphi_9 + \\
&\quad + (0.070; 0.070)\varphi_{11} - (0.060; 0.060)\varphi_{14} + (-0.010; 0.010)\varphi_{16}, \\
\Psi_2 &= (0.070; 0.070)\varphi_1 + (0.040; 0.040)\varphi_6 - (0.070; 0.070)\varphi_2 - (0.008; 0.008)\varphi_9 + \\
&\quad + (0.988; 0.000)\varphi_{11} - (0.001; 0.001)\varphi_{14} + (0.030; 0.030)\varphi_{18} + (-0.003; 0.001)\varphi_{13} + \\
&\quad + (0.005; 0.000)\varphi_{20} - (0.008; 0.008)\varphi_{25}, \\
\Psi_3 &= (0.789; 0.000)\varphi_5 - (0.003; 0.000)\varphi_7 - (0.002; 0.000)\varphi_8 + (0.001; 0.000)\varphi_{10} + \\
&\quad + (0.614; 0.000)\varphi_{17} - (0.050; 0.050)\varphi_{12} - (0.006; 0.006)\varphi_{15} - (0.002; 0.000)\varphi_{19} - \\
&\quad - (0.001; 0.000)\varphi_{24} - (0.001; 0.001)\varphi_{21} - (0.010; 0.010)\varphi_{25},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_4 &= (-0.614; 0.000)\varphi_5 + (0.002; 0.000)\varphi_7 - (0.001; 0.000)\varphi_8 + (0.788; 0.000)\varphi_{17} + \\
&\quad + (-0.006; 0.006)\varphi_{12} + (0.050; 0.050)\varphi_{15} - (0.003; 0.000)\varphi_{19} - (0.002; 0.000)\varphi_{24} + \\
&\quad + (0.010; -0.010)\varphi_{21} - (0.001; 0.001)\varphi_{23} , \\
\Psi_5 &= (0.078; -0.078)\varphi_1 + (0.030; -0.030)\varphi_6 + (0.060; 0.060)\varphi_2 + (-0.008; 0.008)\varphi_9 + \\
&\quad + (0.001; 0.001)\varphi_{11} + (0.988; 0.000)\varphi_{14} + (0.030; 0.030)\varphi_{18} + (-0.001; 0.003)\varphi_{13} - \\
&\quad - (0.003; 0.000)\varphi_{16} + (0.005; 0.000)\varphi_{22} + (0.008; -0.008)\varphi_{25} , \\
\Psi_6 &= (0.009; 0.000)\varphi_1 + (0.010; 0.000)\varphi_6 + (0.988; 0.000)\varphi_2 - (0.007; 0.000)\varphi_9 + \\
&\quad + (0.060; -0.060)\varphi_{11} + (0.060; 0.060)\varphi_{14} + (-0.050; 0.050)\varphi_{20} - (0.050; 0.050)\varphi_{22} ,
\end{aligned} \tag{4.14}$$

De esta manera, los estados ya no son autoestados de espín sino que son una combinación de estados singlete y triplete, debido a que la interacción Rashba conecta estados de distinto espín. Sin embargo, puede verse que cada estado tiene un autoestado de espín que domina. Por ejemplo, Ψ_1 y Ψ_2 son esencialmente singlete y triplete, respectivamente. De forma similar pueden obtenerse las funciones de onda para AlInAs y AlGaAs.

En la Figura 4.4 se muestra la densidad de probabilidad del estado fundamental y de los primeros estados excitados del sistema de dos electrones no interactuantes con interacción SO de Rashba. Los cuatro lóbulos de la densidad de probabilidad de Ψ_1 y Ψ_6 no son iguales, como en el caso de los dos electrones sin interacción. Dos de ellos se encuentran disminuidos debido a Rashba, el cual introduce mezcla de otros estados de la base. Al aumentar el valor de $\langle dV/dx \rangle$, estos lóbulos son afectados en mayor medida, disminuyendo su amplitud debido a una mayor mezcla de estados de la base. Nótese, además, una diferencia en Ψ_5 en donde aparece una pequeña amplitud en la diagonal comparado con la Figura 4.1.

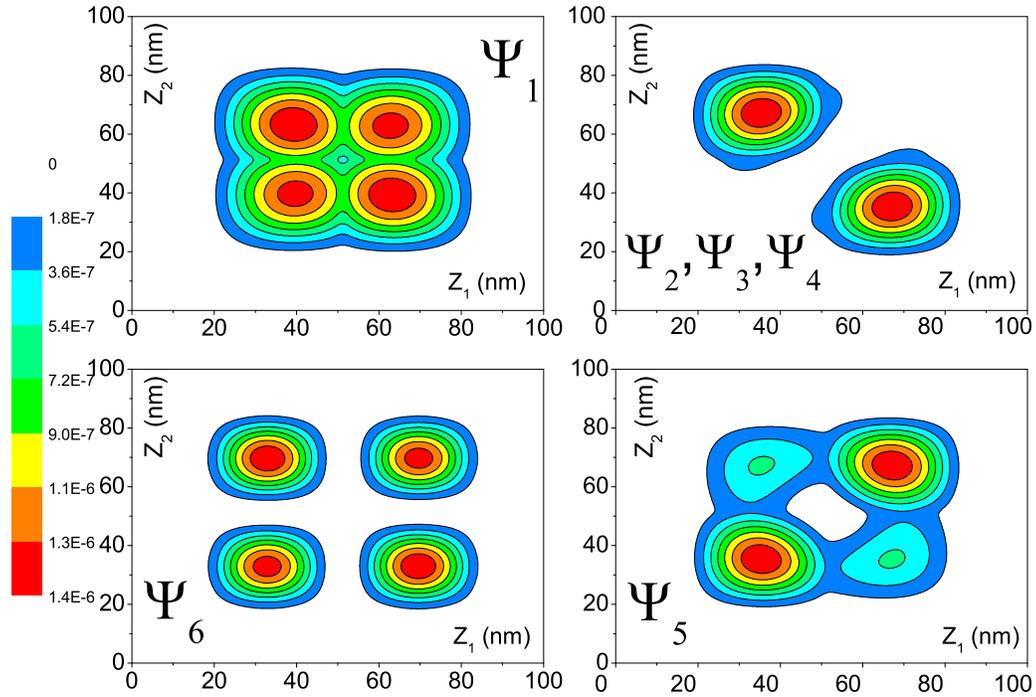


Figura 4.4: Densidad de probabilidad del estado fundamental y de los primeros estados excitados de la heteroestructura AlInSb para dos electrones no interactuantes con interacción Rashba. $\langle dV/dx \rangle = 0.5 \text{ meV/\AA}$.

Niveles de energía y $\langle S_z \rangle$

En la Figura 4.5 se muestran los niveles de energía y el valor medio de S_z para el mismo sistema de dos electrones, pero con un parámetro $\langle dV/dx \rangle = 1 \text{ meV/\AA}$. Los dos cruces alrededor de $B = 3.2 \text{ T}$ (E_1 y E_2 , E_5 y E_6) que podían verse en la Figura 4.2 se transformaron en anticruces debido a que los pares de estados involucrados se encuentran acoplados por la interacción Rashba. Puede notarse que aparecen cruces y anticruces, con diferentes anchos

de separación, esto se debe a cuan conectados están los estados debido a la interacción (ver Figura 4.5 b)). Anteriormente se mencionó el caracter dominante de un autoestado de espín en los estados correspondientes a $B = 0$ T. Cabe destacar que esa característica es válida sólo lejos de los anticruces de niveles. En éstos las características de los estados se mezclan.

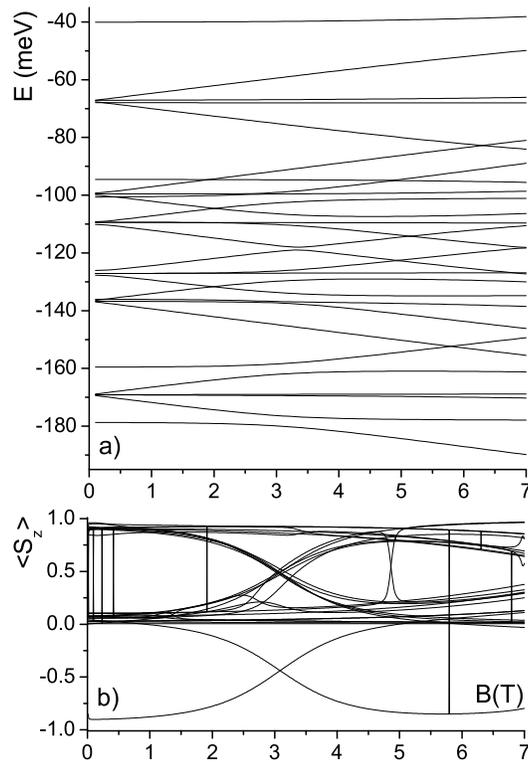


Figura 4.5: InSb: a) Niveles de energía y b) valor medio de S_z en función del campo magnético para el sistema de dos electrones no interactuantes con interacción Rashba.

4.1.3. Dos electrones con interacción espin-órbita y Coulomb

Hamiltoniano y funciones de onda

Luego de haber analizado cómo la interacción Rashba inflúa en los niveles de energía y valores medios de S_z en el sistema de los dos electrones, se introdujo la interacción de Coulomb [108, 109] entre ambos con el fin de comprender las implicancias en dichas propiedades.

A tal fin, el Hamiltoniano queda expresado como:

$$H_{1d} = \frac{P_{z_1}^2}{2m^*} + V_z(z_1) + \frac{P_{z_2}^2}{2m^*} + V_z(z_2) + H_{1dR} + V_{int}(|z_2 - z_1|), \quad (4.15)$$

donde $V_{int}(|z_2 - z_1|)$ es la interacción de Coulomb dada por:

$$V_{int}(|z_2 - z_1|) = \int_0^L \int_0^L \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 dy_1 dy_2 \frac{e^2 \Phi^2(x_1) \Phi^2(x_2) \Phi^2(y_1) \Phi^2(y_2)}{\epsilon \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}}, \quad (4.16)$$

donde $L = 2 \text{ nm}$ es el tamaño lateral, $\Phi(x_i) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\frac{\pi x_i}{L})$, y lo mismo para y_i . La constante dieléctrica para GaAs, InSb y InAs son $\epsilon = 12.85$, $\epsilon = 16.8$ y $\epsilon = 15.5$, respectivamente (ver Figura 4.6). Los elementos de matriz de la interacción Coulombiana son no nulos sólo entre estados de igual parte de espín. En cuanto a la parte espacial, puede verse que por razones de simetría los únicos elementos no nulos son H_{int} y sus conjugados:

$$\begin{aligned} H_{int}(i, j) &= \langle \varphi_i | V_{int} | \varphi_j \rangle & H_{int}(k, l) &= \langle \varphi_k | V_{int} | \varphi_l \rangle \\ H_{int}(8 + 3n, 8 + 3n) &= \langle \varphi_{8+3n} | V_{int} | \varphi_{8+3n} \rangle \\ H_{int}(8 + 3n, 10 + 3n) &= \langle \varphi_{8+3n} | V_{int} | \varphi_{10+3n} \rangle \\ H_{int}(8 + 3n, 18 + 2n) &= \langle \varphi_{8+3n} | V_{int} | \varphi_{18+2n} \rangle \\ H_{int}(8 + 3n, 25 + n) &= \langle \varphi_{8+3n} | V_{int} | \varphi_{25+n} \rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
H_{int}(9 + 3n, 9 + 3n) &= \langle \varphi_{9+3n} | V_{int} | \varphi_{9+3n} \rangle \\
H_{int}(9 + 3n, 19 + 2n) &= \langle \varphi_{9+3n} | V_{int} | \varphi_{19+2n} \rangle \\
H_{int}(10 + 3n, 8 + 3n) &= \langle \varphi_{10+3n} | V_{int} | \varphi_{8+3n} \rangle \\
H_{int}(10 + 3n, 10 + 3n) &= \langle \varphi_{10+3n} | V_{int} | \varphi_{10+3n} \rangle \\
H_{int}(10 + 3n, 18 + 2n) &= \langle \varphi_{10+3n} | V_{int} | \varphi_{18+2n} \rangle \\
H_{int}(18 + 2n, 18 + 2n) &= \langle \varphi_{18+2n} | V_{int} | \varphi_{18+2n} \rangle \\
H_{int}(18 + 2n, 8 + 3n) &= \langle \varphi_{18+2n} | V_{int} | \varphi_{8+3n} \rangle \\
H_{int}(18 + 2n, 10 + 3n) &= \langle \varphi_{18+2n} | V_{int} | \varphi_{10+3n} \rangle \\
H_{int}(18 + 2n, 25 + n) &= \langle \varphi_{18+2n} | V_{int} | \varphi_{25+n} \rangle \\
H_{int}(19 + 2n, 19 + 3n) &= \langle \varphi_{19+2n} | V_{int} | \varphi_{19+3n} \rangle \\
H_{int}(19 + 2n, 9 + 3n) &= \langle \varphi_{19+2n} | V_{int} | \varphi_{9+3n} \rangle \\
H_{int}(25 + n, 8 + 3n) &= \langle \varphi_{25+n} | V_{int} | \varphi_{8+3n} \rangle \\
H_{int}(25 + n, 18 + 2n) &= \langle \varphi_{25+n} | V_{int} | \varphi_{18+2n} \rangle
\end{aligned}$$

donde $i, j = 1, 2, 3, 4, 6, 9$ $i \leq j$, $k, l = 5, 7, 8, 10$ $k \leq l$, $n = 1, 2, 3$. Los mismos fueron calculados de la siguiente manera:

$$H_{int}(1, 1) = \int_0^{L_z} \int_0^{L_z} dz_1 dz_2 u_1^*(z_1) u_1^*(z_2) V_{int}(|z_2 - z_1|) u_1(z_1) u_1(z_2), \quad (4.17)$$

de forma similar se pueden obtener el resto de los elementos de la matriz H_{int} no nulos.

En la Figura 4.7 se muestran las curvas de nivel de la densidad de probabilidad de los primeros seis estados de dos electrones con interacción de Coulomb [110, 111] y Rashba. Puede observarse que en el estado fundamental Ψ_1 los dos electrones están esencialmente localizados en diferentes puntos cuánticos debido a la repulsión Coulombiana, y en estados de una única partícula “bonding” con una amplitud no nula en la región de la barrera central.

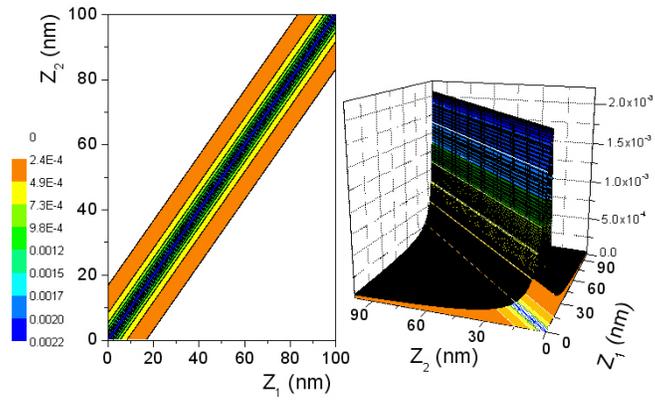


Figura 4.6: Curva de nivel del Potencial Coulombiano: $V_{int}(|z_2 - z_1|)$

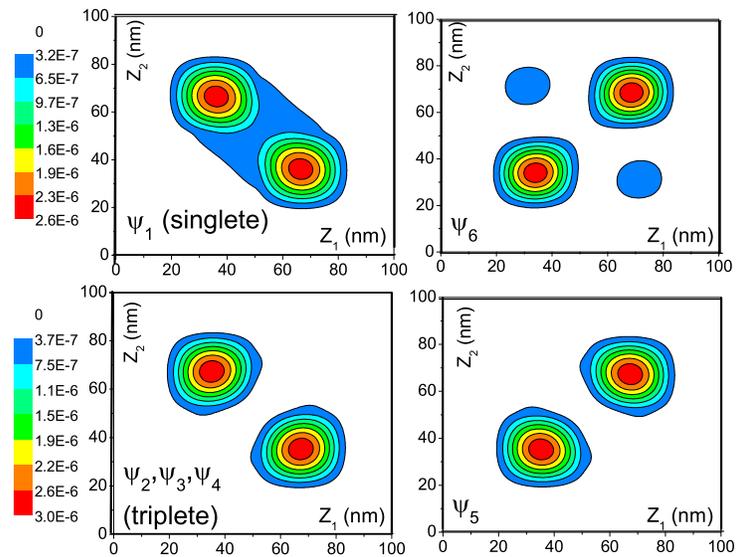


Figura 4.7: InSb: Curvas de nivel de densidad de probabilidad de dos electrones interactuantes con interacción espín-órbita.

Por el contrario, los estados Ψ_2 , Ψ_3 y Ψ_4 poseen también electrones localizados en cada punto pero con orbital “*antibonding*” con amplitud nula en la zona central de la barrera. Ψ_5 y Ψ_6 describen estados con los dos electrones en el mismo punto cuántico.

Las primeras seis funciones de onda que diagonalizan al Hamiltoniano de la ecuación 4.15 con $\langle dV/dx \rangle = 1 \text{ meV}/\text{Å}$ para la heteroestructura AlInSb en ausencia de campo magnético son:

$$\begin{aligned}
\Psi_1(z_1, z_2) &= (0.912; 0.000)\varphi_1 - (0.210; 0.000)\varphi_2 - (0.033; 0.000)\varphi_3 - (0.010; 0.000)\varphi_4 + \\
&+ (0.022; 0.000)\varphi_6 + (0.033; 0.000)\varphi_9 + (-0.164; 0.164)\varphi_{11} + (-0.022; 0.022)\varphi_{13} - \\
&- (0.164; 0.164)\varphi_{14} - (0.022; 0.022)\varphi_{16} + (0.022; -0.022)\varphi_{20} + (0.022; 0.022)\varphi_{22} , \\
\Psi_2(z_1, z_2) &= (0.150, 0.150)\varphi_1 - (0.150, 0.133)\varphi_2 + (0.080, 0.070)\varphi_6 - (0.012, 0.012)\varphi_9 \\
&+ (0.945; 0.000)\varphi_{11} + (0.050; 0.050)\varphi_{14} - (0.000; 0.010)\varphi_{16} + (0.060; 0.060)\varphi_{18} + \\
&+ (0.000; 0.022)\varphi_{22} , \\
\Psi_3(z_1, z_2) &= (-0.070; 0.070)\varphi_{12} + (0.000; 0.090)\varphi_{13} + (0.075; 0.075)\varphi_{15} + (0.988; 0.000)\varphi_{17} \\
&+ (-0.022; 0.000)\varphi_{24} + (0.022; -0.022)\varphi_{21} - (0.022; 0.022)\varphi_{23} , \\
\Psi_4(z_1, z_2) &= (0.110, -0.120)\varphi_1 + (-0.110; 0.120)\varphi_2 + (0.060, -0.070)\varphi_6 + (-0.050; 0.122)\varphi_{11} + \\
&+ (0.945; 0.000)\varphi_{14} + (-0.085; 0.075)\varphi_{18} + (0.000; -0.022)\varphi_{20} + (0.022; -0.022)\varphi_{25} , \\
\Psi_5(z_1, z_2) &= (0.976, 0.000)\varphi_5 + (0.045, 0.000)\varphi_7 - (0.060; 0.000)\varphi_8 + (-0.010; 0.010)\varphi_9 - \\
&- (0.030; 0.000)\varphi_{10} + (-0.090; 0.090)\varphi_{12} + (-0.090; 0.090)\varphi_{15} + (-0.010; 0.010)\varphi_{21} - \\
&- (0.010; 0.010)\varphi_{23} \\
\Psi_6(z_1, z_2) &= (0.280; 0.000)\varphi_1 + (0.988; 0.000)\varphi_2 - (0.030; 0.000)\varphi_3 - (0.022; 0.000)\varphi_4 + \\
&+ (-0.060; 0.000)\varphi_6 - (0.020; 0.000)\varphi_{11} + (0.090; 0.120)\varphi_{14} + (-0.120; 0.120)\varphi_{20} + \\
&+ (-0.120; 0.120)\varphi_{22} , \tag{4.18}
\end{aligned}$$

Como puede observarse, las funciones de onda son una combinación lineal de estados singlete y triplete, pero con un marcado carácter de singlete (Ψ_1 , Ψ_5 , Ψ_6) o triplete (Ψ_2 , Ψ_3 , Ψ_4).

Niveles de energía y $\langle S_z \rangle$

Para el semiconductor AlInSb se grafican (Figura 4.8) los niveles de energía y los valores medios de S_z en función del campo magnético para los primeros ocho estados más bajos del sistema de dos electrones con interacción Coulombiana y Rashba (parámetro de Rashba $\langle dV/dx \rangle = 1 \text{ meV/\AA}$.) El espectro cambió considerablemente comparado con los otros dos casos sin interacción o con sólo interacción de Rashba.

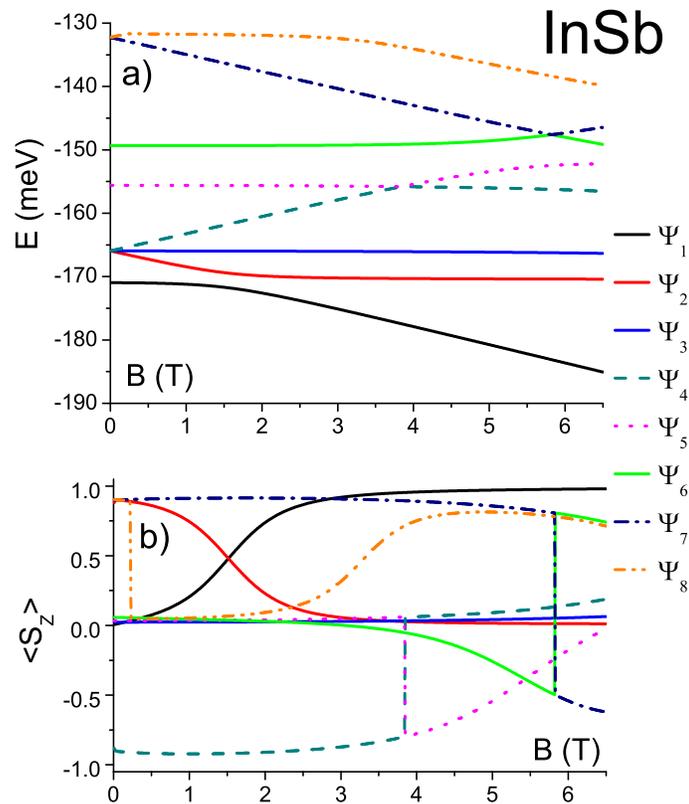


Figura 4.8: AlInSb: a) Niveles de energía, y b) sus correspondientes valores medios de S_z de los primeros 8 estados más bajos en función del campo magnético para el sistema de dos electrones con interacción de Coulomb y de Rashba. $\langle dV/dx \rangle = 1 \text{ meV/\AA}$.

El primer “*anticruce*” entre E_1 y E_2 aparece para un campo magnético $B = 1.6$ T. El proximo “*cruce*” entre E_4 y E_5 aparece para un campo magnético mayor - $B = 3.68$ T - debido a la interacción de Rashba en cada nivel individual, pero no se transforma en “*anticruce*” pues los niveles no están acoplados entre ellos por la interacción Rashba. Esta falta de *mezcla* proviene de las diferentes simetrías espaciales de los estados y de la fuerte interacción de Coulomb. La simetría bajo el “*space-reversal*” (par vs impar) previene la mezcla de un estado con la doble ocupación (singlete Ψ_5) y un estado donde cada punto tiene un electrón (Ψ_4), donde cada estado posee una simetría *space-reversal* opuesta. El ancho de los *anticruces* está determinado principalmente por la fuerza del acoplamiento espín-órbita, y el mismo puede ser ajustado por un campo eléctrico transversal (gate voltage).

En las Figuras 4.9 y 4.10 se representan la energía y S_z para los semiconductores de puntos cuánticos de InAs y de GaAs. Puede notarse que el primer “*anticruce*” entre E_1 y E_2 que aparece en cada una de ellas se encuentra por debajo de $B = 0.2$ T. Estos *anticruces* poseen anchos muy pequeños debido a los bajos valores de sus constante de Rashba. Tanto en las heteroestructuras de GaAs como en las de InAs, estos anticruces aparecen para campos magnéticos pequeños debido a que sus Δ_{SAS} son muy chicos, es decir, sus niveles de energía se encuentran muy próximos, y con sólo introducir un campo magnético menor a 0.2 T éstos se separan y se cruzan mucho antes comparado con el caso de InSb, donde ocurre para campos mayores a 1 T.

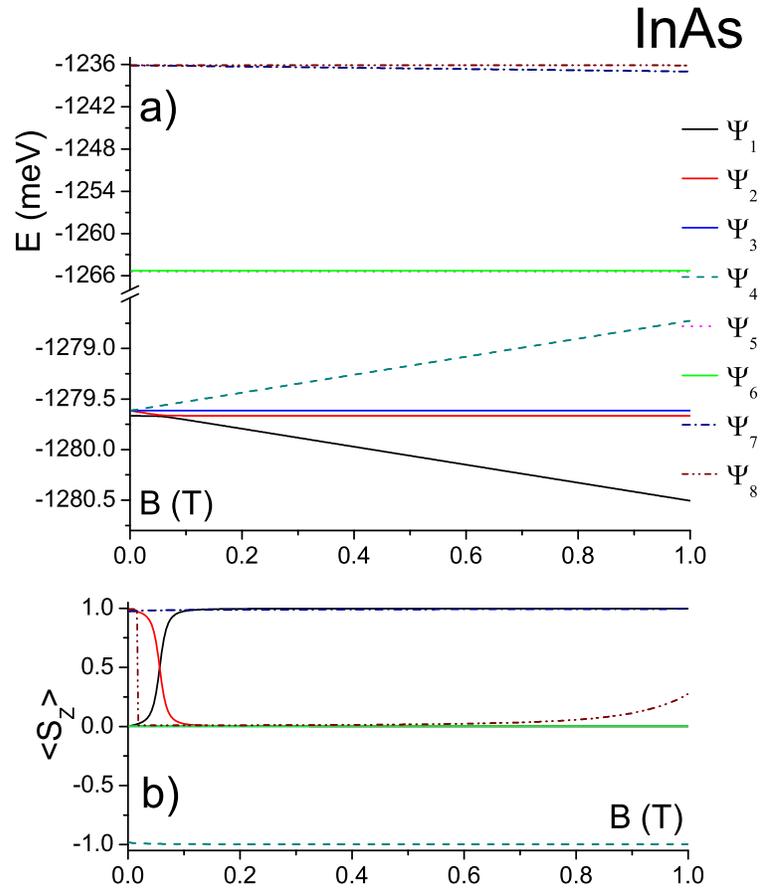


Figura 4.9: AlInAs: a) Niveles de energía, y b) valor medio de S_z de los primeros 8 estados más bajos en función del campo magnético para el sistema de dos electrones con interacción de Coulomb y de Rashba. $\langle dV/dx \rangle = 1$ meV/Å.

En la Figura 4.11 se grafica S_z en función del parámetro de Rashba $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle$ para los primeros seis estados del sistema de dos electrones para un dado campo magnético $B = 0.5$ T para el semiconductor InSb. En esta figura se comparan dos casos, a) sin y b) con interacción Coulombiana, de manera tal de mostrar de forma más eficiente el papel del acoplamiento espín-órbita en la mezcla de espines.

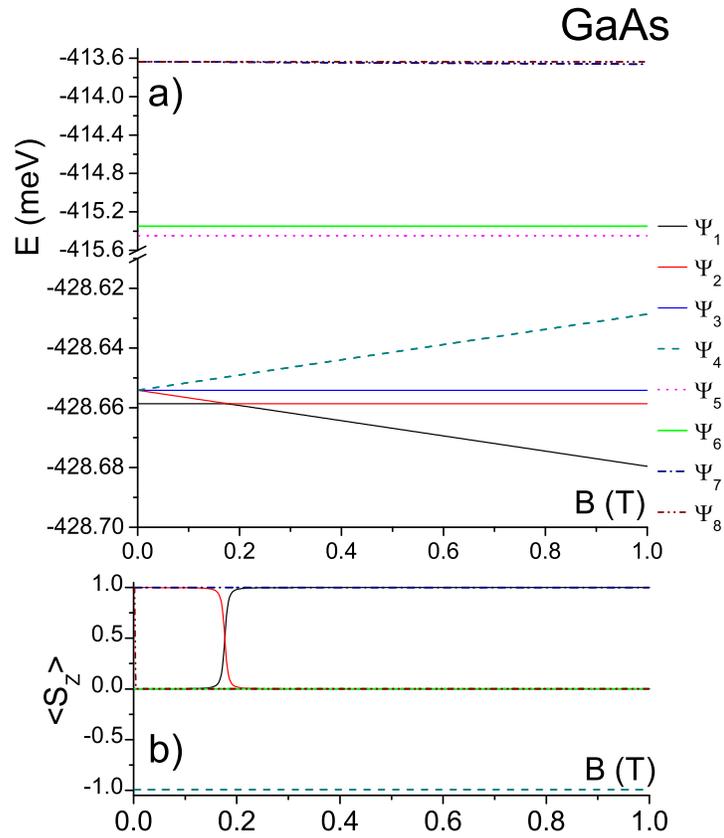


Figura 4.10: GaAs: a) Niveles de energía, y b) valor medio de S_z de los primeros 8 estados más bajos en función del campo magnético para el sistema de dos electrones con interacción de Coulomb y de Rashba. $\langle dV/dx \rangle = 1 \text{ meV/\AA}$.

Como es de esperarse, sin acoplamiento Rashba, $\langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle = 0$, la proyección de espín de cada uno de estos estados $\langle S_z \rangle$ toma naturalmente el valor 1, 0, o -1 , como se ve en ambas figuras. Una diferencia importante entre a) y b) es la simetría alrededor de $S_z = 0$ cuando la interacción de Coulomb está ausente.

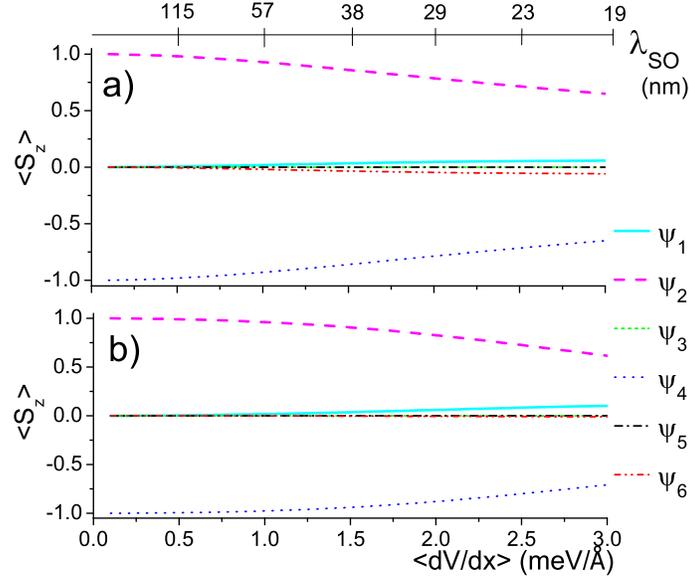


Figura 4.11: InSb: Valor medio $\langle S_z \rangle$ en función del parámetro de Rashba $\langle dV/dx \rangle$ para los primeros 6 autoestados de dos partículas. $B = 0.5$ T. a) sin y b) con interacción de Coulomb. λ_{SO} es la longitud espín-órbita.

El estado fundamental en la Figura 4.11 a) (línea sólida color cyan) comienza con $S_z = 0$, y para cierto valor del parámetro de Rashba alcanza un máximo. Por otro lado, en la Figura 4.11 b), esta simetría alrededor del valor cero se pierde debido a las distintas mezclas de los orbitales de dos partículas (φ_i) producidos por la interacción de Coulomb. La Figura 4.11 incluye un eje (arriba) en términos de la longitud espín-órbita ($\lambda_{SO} = \frac{\hbar^2}{m^* \gamma_R \langle \frac{\partial V_x}{\partial x} \rangle}$) [102], el cual es inversamente proporcional al parámetro de Rashba.

Este parámetro de longitud ayuda a visualizar la intensidad del parámetro de Rashba en comparación con las dimensiones características de la estructura. Es interesante recalcar que la mezcla de espín puede observarse inicialmente para $\lambda_{SO} \simeq 60$ nm, el tamaño del sistema de los dos puntos cuánticos.

4.2. Tasas de relajación de dos electrones

Luego de haber estudiado los niveles de energía y las funciones de onda de dos electrones interactuantes con la interacción de Rashba en el sistema de dos pozos cuánticos, calculamos las tasas de relajación para distintas transiciones de estado, en particular del primer estado excitado al estado fundamental. En las siguientes secciones se muestran tasas de relajación en función del campo magnético comparando las contribuciones de los distintos fonones, como afecta la intensidad del parámetro de Rashba y la temperatura.

4.2.1. Tasas de relajación en función del campo magnético

En este trabajo mostramos los resultados para las heteroestructuras de semiconductores más relevantes que se estudiaron: AlInSb y AlInAs. La temperatura para todos los cálculos fue de 4 K, excepto cuando se estudió su variación para las tasas de relajación.

Como se mencionó en el Capítulo 2 el Hamiltoniano de electrón-fonón es de partícula única. Para el cálculo de las tasas de relajación de dos electrones interactuantes con interacción de Rashba se parte de la Regla de oro de Fermi:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{Q}, \alpha} |\langle f | U_{\mathbf{Q}, \alpha} | i \rangle|^2 (n_q + 1) \delta(\Delta E - \hbar\omega_\alpha), \quad (4.19)$$

donde $\mathbf{Q} = (q_x, q_y, q_z) = (\mathbf{q}, q_z)$ es el momento del fonón, α indica los fonones acústicos: modo longitudinal, ℓ , y modos transversales, $t = TA1$ y $TA2$, $\Delta E = E_f - E_i$ y n_q es la distribución de fonones de Bose-Einstein con energía $\hbar\omega_\alpha = \hbar c_\alpha Q$. $\langle f |$ y $\langle i |$ son los estados final e inicial. El potencial $U_{\mathbf{Q}, \alpha}$ posee dos contribuciones para cada electrón: Potencial de deformación $\Xi_\ell(\mathbf{Q})$ y Potencial piezoeléctrico $\Lambda_{\ell, t}(\mathbf{Q})$:

$$U_{q, \alpha = \ell, t} = (\Xi_\ell(\mathbf{Q}) + i\Lambda_{\ell, t}(\mathbf{Q}))(e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2}). \quad (4.20)$$

donde $\Xi_\ell(\mathbf{Q})$ y $\Lambda_{\ell, t}(\mathbf{Q})$ son los potenciales de un electrón descriptos en la ecuación 3.13 del

Capítulo 3.

Los estados del sistema de dos electrones vienen dados por:

$$\langle \mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \Psi_i \rangle = \alpha(x_1) \alpha(x_2) \alpha(y_1) \alpha(y_2) \sum_{k=1}^{28} C_{ik} \varphi_k(z_1, z_2), \quad (4.21)$$

donde $i = 1, \dots, 28$. Escribiendo la ecuación 4.20 en términos de integrales nos lleva a las ecuaciones 2.38 a 2.41 del Capítulo 2 donde:

$$\begin{aligned} & \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i \mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle = \\ & = \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i \mathbf{Q} \mathbf{r}_1} | \Psi_i \rangle + \int \int d^3 \mathbf{r}_1 d^3 \mathbf{r}_2 \langle \Psi_f | e^{i \mathbf{Q} \mathbf{r}_2} | \Psi_i \rangle, \\ & = \sum_{m=1, j=1}^{28} C_{m,f}^* C_{i,j} e^{-\frac{q_x^2}{2\alpha_x}} e^{-\frac{q_y^2}{2\alpha_y}} \int \langle \psi_m^* | e^{iq_z z_1} | \psi_j \rangle dz_1 dz_2 + \\ & + \sum_{m=1, j=1}^{28} C_{m,f}^* C_{i,j} e^{-\frac{q_x^2}{2\alpha_x}} e^{-\frac{q_y^2}{2\alpha_y}} \int \langle \psi_m^* | e^{iq_z z_2} | \psi_j \rangle dz_1 dz_2, \end{aligned} \quad (4.22)$$

donde $|\psi_j\rangle$ es la base de 28 estados de dos partículas de la ecuación 4.2.

Comenzamos mostrando la transición entre el primer estado excitado y el estado fundamental para el semiconductor AlInSb. En la Figura 4.12 se muestra para el mismo semiconductor, la tasa de relajación en función del campo magnético para las contribuciones del Potencial de deformación, a), Potencial piezoeléctrico TA1+TA2, b), y Potencial piezoeléctrico LA, c).

En el mismo está representado para cada caso distintos valores de $\langle dV/dx \rangle$. La contribución más dominante proviene del Potencial de deformación con varios órdenes de magnitud mayor comparado con los Potenciales piezoeléctricos independientemente del valor de $\langle dV/dx \rangle$.

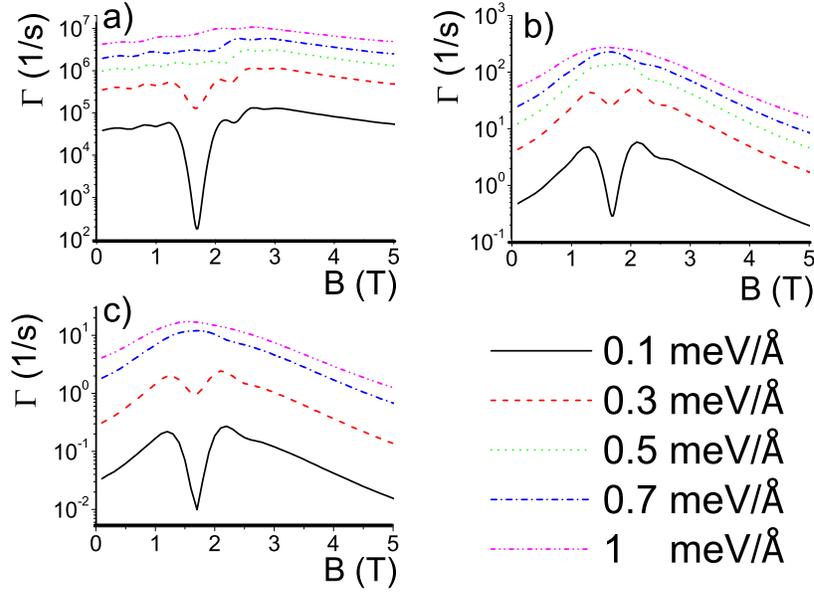


Figura 4.12: AlInSb: Γ en función del campo magnético para a) el Potencial de deformación, b) el Potencial piezoeléctrico TA1+TA2 y c) el Potencial piezoeléctrico LA para distintos valores del parámetro $\langle dV/dx \rangle$.

Para un determinado campo magnético - $B = 1.7$ T - aparece un pronunciado mínimo para valores pequeños de $\langle dV/dx \rangle$. Por ejemplo, para el Potencial de deformación con un $\langle dV/dx \rangle = 0.1$ meV/Å, el mínimo tiene una profundidad de dos décadas. Al aumentar la intensidad de la constante de Rashba, $\langle dV/dx \rangle$, este efecto va desapareciendo en todos los Potenciales (de 0.1 meV/Å a 1 meV/Å). Otra forma de observar lo anterior es por medio de la Figura 4.13 con las curvas de nivel de la tasa de relajación en función del campo magnético y del parámetro de Rashba.

Curvas similares pueden verse en la Figura 4.14 donde este efecto de la disminución del valor de Γ es notorio para las contribuciones del Potencial piezoeléctrico LA y TA1+TA2.

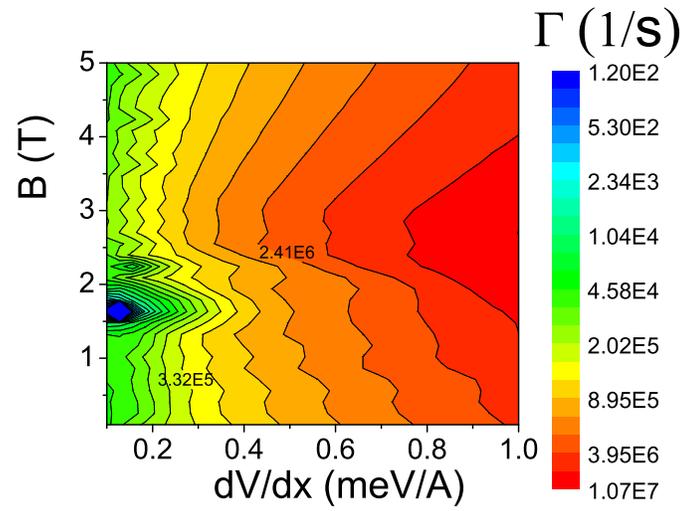


Figura 4.13: AlInSb: Curvas de nivel de Γ en función del campo magnético y $\langle dV/dx \rangle$ para el Potencial de deformación.

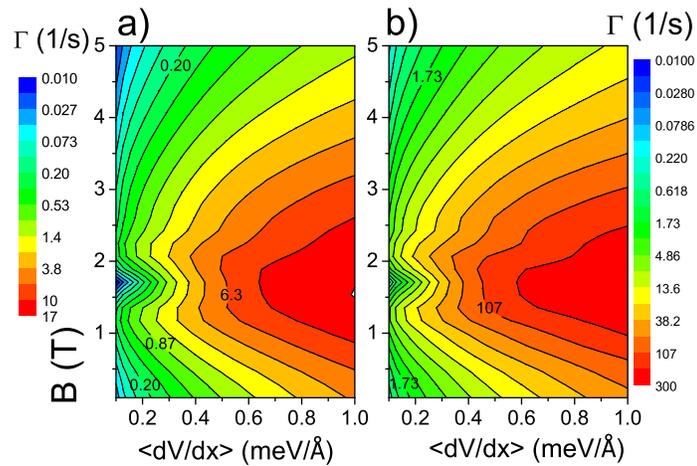


Figura 4.14: AlInSb: Curvas de nivel Γ vs campo magnético vs $\langle dV/dx \rangle$ para a) el Potencial Piezoeléctrico LA y b) el Potencial Piezoeléctrico TA1+TA2.

Posteriormente comparamos estos resultados con la heteroestructura AlInAs. En la Figura 4.15 puede verse las tasas de relajación, Γ en función del campo magnético para cada uno de los distintos fonones y a su vez para distintos valores del parámetro de Rashba.

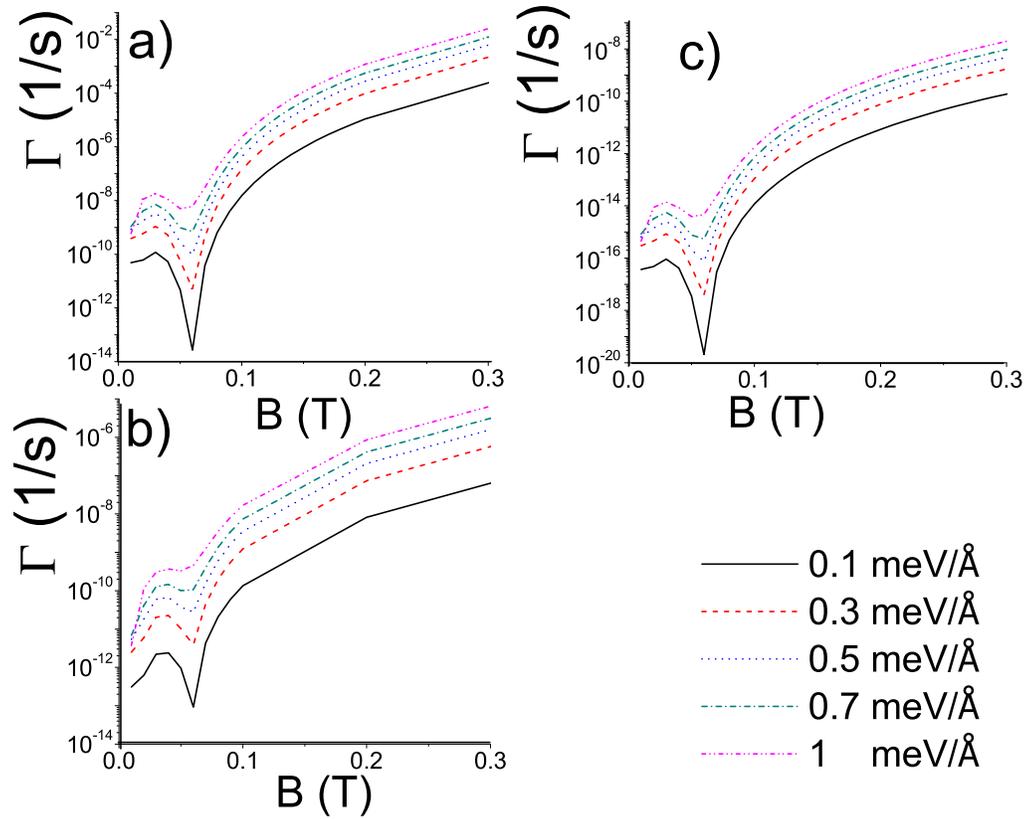


Figura 4.15: AlInAs: Γ en función del campo magnético para a) el Potencial de deformación, b) el Potencial piezoeléctrico LA y c) el Potencial piezoeléctrico TA1+TA2 para distintos valores del parámetro $\langle dV/dx \rangle$.

En todos los casos se observa un *dip* para un campo magnético menor a 0.1 T, como se observaba en el anticruce entre E_1 y E_2 de la Figura 4.9. A medida que el valor del parámetro de Rashba va aumentando este *dip* va disminuyendo variando hasta dos órdenes de magnitud. La mayor contribución en las tasas de relajación se debe al Potencial de deformación. Sin embargo, presenta valores menores en las tasas, Γ , que en el caso de AlInSb debido a que su constante de Rashba es aproximadamente 5 veces menor que para este último. El comportamiento de este mismo *dip* puede notarse en la Figura 4.16 para el Potencial de deformación ubicado en un campo magnético cercano a 0.05 T. Claramente puede verse que al aumentar el valor de $\langle dV/dx \rangle$ la tasa en esa zona comienza a aumentar, pasando de 10^{-11} 1/s - para 0.1 meV/Å - a 10^{-9} 1/s - para 1 meV/Å - .

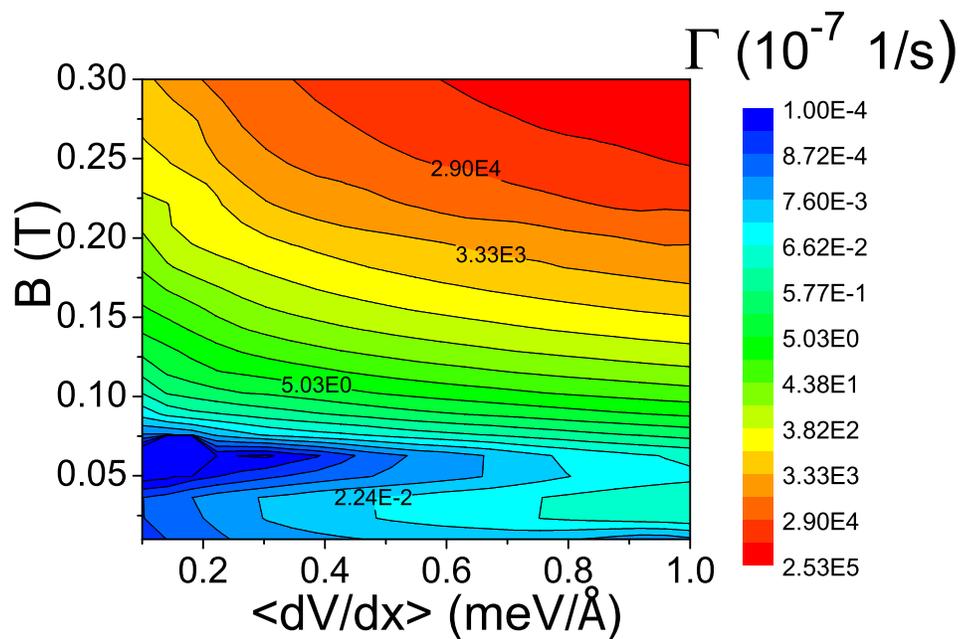


Figura 4.16: AlInAs: Curvas de nivel Γ vs campo magnético vs $\langle dV/dx \rangle$ para el Potencial de deformación.

En las Figuras 4.17 y 4.18 se muestran curvas de nivel de las tasas de relajación para los Potenciales piezoeléctricos LA y TA1+TA2, Γ , en función del campo magnético y $\langle dV/dx \rangle$ para AlInAs. Consideramos un rango de campo de 0.01 T a 0.2 T.

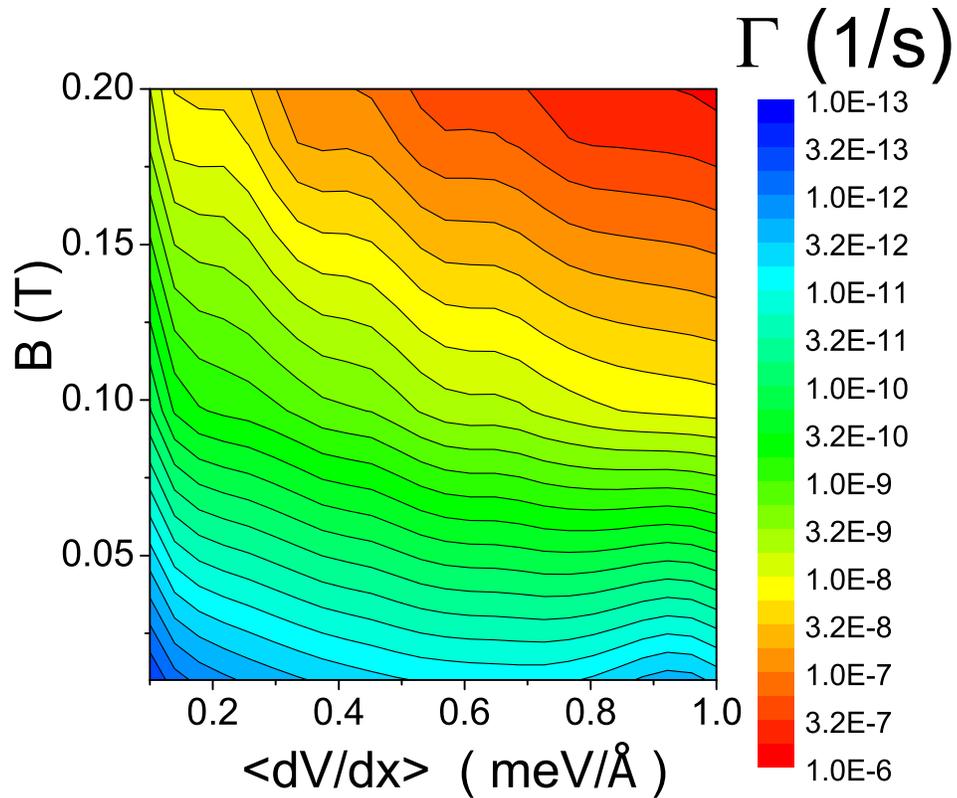


Figura 4.17: AlInAs: Curvas de nivel Γ vs campo magnético vs $\langle dV/dx \rangle$ para el Potencial piezoeléctrico LA. T = 4 K.

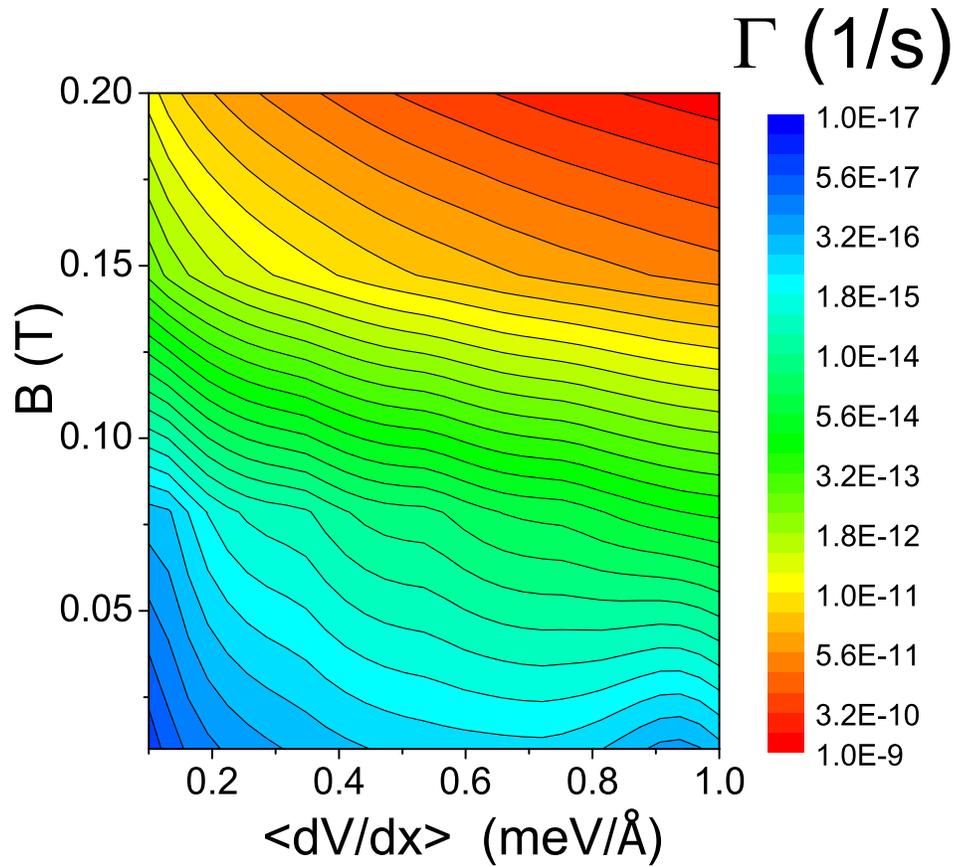


Figura 4.18: AlInAs: Curvas de nivel Γ vs campo magnético vs $\langle dV/dx \rangle$ para el Potencial piezoeléctrico TA1+TA2. T = 4 K.

4.2.2. Tasas de relajación en función de la temperatura

Como en el Capítulo 3.2.2, luego de haber estudiado las tasas de relajación en función del campo magnético, analizamos la influencia de la temperatura en las mismas para las heteroestructuras de AlInSb y AlInAs. En todos los casos se tomó la contribución del potencial de deformación por ser el dominante.

En la Figura 4.19 se grafica la tasa de relajación para la heteroestructura AlInSb con dos electrones interactuantes y $\langle dV/dx \rangle = 0.1 \text{ meV/\AA}$ del primer estado excitado al estado fundamental en función, a), del campo magnético para las temperaturas 298 K, 100 K y 4 K, b), de la temperatura para $B = 0.5 \text{ T}$ y $B = 3 \text{ T}$.

Puede verse el *dip* en $B = 1.7 \text{ T}$ para cada una de las temperaturas. Al aumentar la temperatura para un mismo valor de campo (ver Figura 4.19 a)) los valores de las tasas aumentan alrededor de un orden de magnitud al pasar de 4 K a 298 K, pero la forma de las curvas no cambia. Esto contrasta con el caso de un electrón donde observamos una gran variación del valor de Γ al bajar la temperatura.

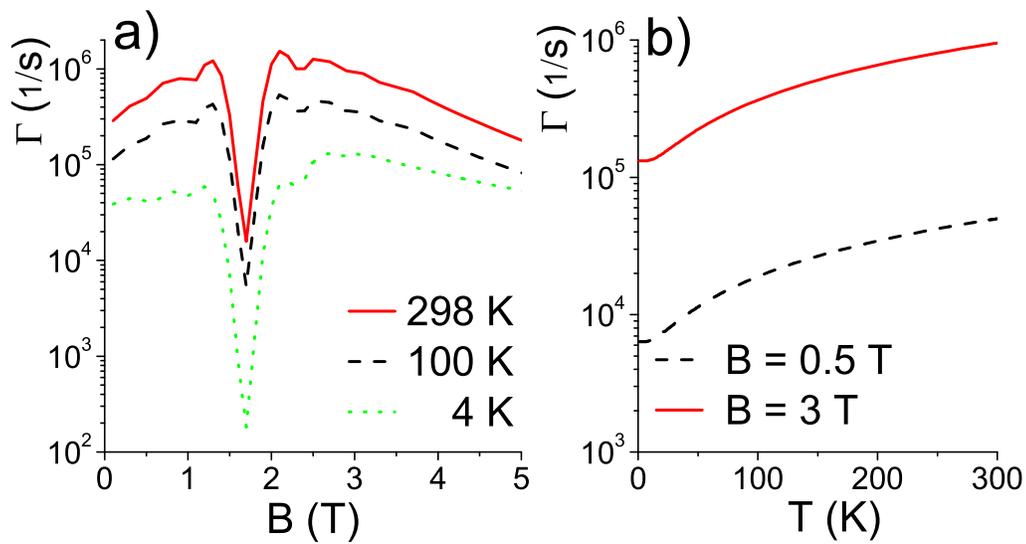


Figura 4.19: AlInSb: Γ en función a) del campo magnético para distintas temperaturas, b) de la temperatura para distintos valores de campo magnético. $\langle dV/dx \rangle = 0.1 \text{ meV/\AA}$.

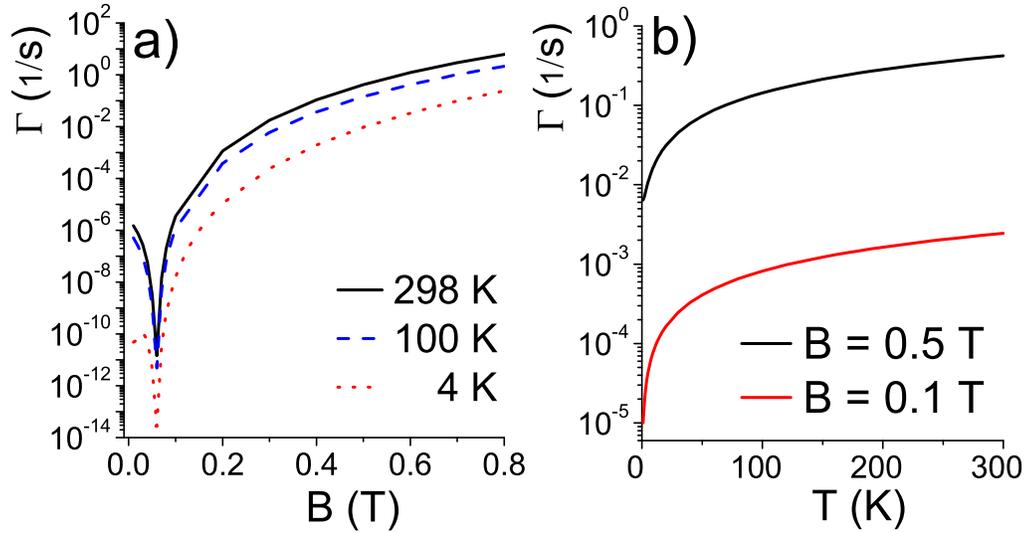


Figura 4.20: AlInAs: Γ en función a) del campo magnético para distintas temperaturas, b) de la temperatura para distintos valores de campo magnético. $\langle dV/dx \rangle = 0.1$ meV/Å.

En la Figura 4.20 se grafica para el Potencial de deformación la tasa de relajación para la heteroestructura AlInAs para el sistema equivalente de dos electrones interactuantes y $\langle dV/dx \rangle = 0.1$ meV/Å tomando las mismas temperaturas (a) pero con $B = 0.1$ T y $B = 0.5$ T (b). Puede observarse el anticruce para un campo menor a 0.1 T. Los valores de las tasas correspondientes a campos entre 0.5 T y 0.8 T no superan los 10 (1/s), y por debajo de 0.2 T son muy pequeños. Nuevamente la forma de la curva no se altera. La mayor variación en los valores de las tasas se registran para temperaturas menores a 10 K. Luego de este valor, las tasas varían poco al aumentar la temperatura.

Puede notarse en la Figura 4.19 un pequeño tramo constante en Γ para temperaturas menores a 8 K para ambos campos magnéticos comparado con la Figura 4.20 b), donde para el mismo rango de temperatura esto no ocurre. Esto se debe a que la diferencia de

energía entre los dos niveles más bajos estudiados para el caso AlInAs es mucho menor que para el caso de AlInSb ¹⁵. Por este motivo, es necesario tener temperaturas mayores a 8 K para aumentar los valores de Γ dado un campo magnético para AlInSb, mientras que para AlInAs con temperaturas mayores a 1 K el valor de Γ ya comienza a aumentar.

¹⁵ $\Delta E_{AlInAs} = 3.93E-4$ meV para $B = 0.5$ T y $\Delta E_{AlInAs} = 3.707E-5$ meV para $B = 0.1$ T.
 $\Delta E_{AlInSb} = 3.52E-3$ meV para $B = 0.5$ T.

Capítulo 5

Discusión y conclusiones

En esta tesis se estudió un sistema de dos puntos cuánticos acoplados cuasi-unidimensionales de distintos semiconductores, AlInSb/InSb, AlGaAs/GaAs y AlInAs/InAs, con uno y dos electrones, teniendo en cuenta la interacción de espín-órbita y la coulombiana.

Como primera etapa, para la interacción espín-órbita se obtuvieron los Hamiltonianos de Rashba - ecuación 2.9 - y de Dresselhaus - ecuación 2.14 - para el sistema cuasi-unidimensional a partir de las expresiones originales. Al elegir la forma de los potenciales de confinamiento laterales $V_x(x)$ y $V_y(y)$ puede suprimirse alguno de estos dos términos, dando la posibilidad de analizar en mayor detalle cada uno de ellos. Estos Hamiltonianos bajan los valores de los niveles de energía del caso de un electrón en forma cuadrática con la intensidad de los parámetros que lo caracterizan, pero no rompen la degeneración de espín. Esto indica que las correcciones de SO a los niveles de energía son a segundo orden en teoría de perturbaciones. En cuanto al factor- g , cambiando la intensidad del parámetro de Rashba, el tamaño de los puntos cuánticos o el ancho de la barrera, es posible controlar el valor del factor- g , el cual determina el *Zeeman splitting*. En particular, se puede anular el factor- g . Esto se pudo observar en los cruces de S_z correspondientes. La anulación del factor- g es un efecto potencialmente útil en aplicaciones de espintrónica al poder ser ajustado a través del parámetro de Rashba, $\langle dV/dx \rangle$.

Dentro de los semiconductores estudiados, InSb, GaSb, InAs y GaAs los efectos más fuertes se ven en el semiconductor InSb, ya que su constante de Rashba, $\gamma_R = 500 \text{ \AA}^2$, es más grande comparada con el resto¹⁶.

Posteriormente se estudiaron los niveles de energía y $\langle S_z \rangle$ en función del ancho de la barrera que separa a ambos puntos cuánticos, b . En este punto se compararon los semiconductores InSb y GaAs. Se encontró un anticruce en las graficas para un $\langle dV/dx \rangle$ y campo magnético fijos. El ancho de este anticruce está determinado por el valor de $\langle dV/dx \rangle$; mientras mayor sea su valor, mayor será dicha separación. El valor del ancho de la barrera para el cual aparece este anticruce, b_c , puede ser seleccionado variando el campo magnético. Para campos magnéticos mayores, este anticruce aparecerá para valores de b_c menores debido al *interplay* entre E_z y Δ_{SAS} . Los valores de b_c son siempre menores en el semiconductor de GaAs que en el de InSb para un mismo campo B, debido a que los niveles de energía del primero se encuentran muy próximos ($\Delta_{SAS}(GaAs) \ll \Delta_{SAS}(InSb)$), apareciendo antes el anticruce.

Como segunda etapa se calcularon las transiciones entre los estados mezcla producidos por el acoplamiento de Rashba, inducidas por el *scattering* de fonones. No habrá transiciones de *spin-flip* mediada por la interacción electrón-fonón para geometrías en las que sólo aparezca el acoplamiento de Dresselhaus, ya que el mismo es proporcional a S_z y, por lo tanto, no conecta estados de espín *up* con espín *down*. Se utilizó la regla de oro de Fermi para estudiar las transiciones entre el estado fundamental y los dos estados excitados más bajos. Para InSb y GaAs se compararon las distintas contribuciones de fonones debido a los potenciales de deformación (PD) y piezoeléctricos (LA, TA1+TA2) en función del campo magnético. La tasa de relajación para InSb ($B > 0.3 \text{ T}$) es dominada por el potencial de deformación mientras que para GaAs el potencial piezoeléctrico es el dominante. Esto proviene de que la ecuación para el cálculo de las tasas presenta una dependencia con ΔE muy diferente para PD que para Piezo TA1 y, que la diferencia de energía ΔE es mayor

¹⁶ GaAs: $\gamma_R = 5.33 \text{ \AA}^2$, su factor- g no varía prácticamente.

para InSb que para GaAs. La interacción espín-órbita es mayor para InSb y, por lo tanto, las tasas de relajación resultan en un mayor valor para este semiconductor que para GaAs.

Las graficas de Γ en función de b para los semiconductores de InSb y GaAs presentan un *cusp* para un determinado valor de b . La posición de estos picos concuerda con los anticruces (b_c) que se muestran en las graficas de las energías y S_z en función de b , y pueden ser controlados con un campo magnético chico. El ancho de estos picos está determinado por la intensidad del parámetro de Rashba $\langle dV/dx \rangle$. Puede verse también que el ancho del pico para GaAs es mucho más angosto que para InSb debido a que la constante de Rashba es mucho menor en el primer material (ver Figuras 3.13 y 3.14).

La temperatura juega un papel importante en el valor de las tasas de relajación en función del campo magnético para el semiconductor InSb. Por otro lado, esto no ocurre con $\langle dV/dx \rangle$. Sin embargo, para GaAs la temperatura no resulta en el mismo efecto. Esto se debe a que la diferencia de energía entre los estados involucrados es tres veces menor para GaAs que para InSb en el rango estudiado, dando lugar a que n_q sea prácticamente constante con la temperatura.

Como tercera etapa se estudiaron los dos electrones en el sistema de los dos puntos cuánticos acoplados. A partir de las funciones de onda de un electrón, se formaron la base de dos electrones; las autofunciones serán una combinación de las mismas. Se construyó el Hamiltoniano de dos electrones, luego se sumó el término de Rashba y finalmente se tuvo en cuenta la interacción coulombiana. Así mismo, se graficaron los niveles de energía y el valor medio de S_z en función del campo magnético para los semiconductores InSb, GaAs y InAs.

Algunos cruces de niveles de energía se convierten en anticruces cuando la interacción de espín-órbita de Rashba está presente y sus anchos pueden ser controlados por la intensidad del parámetro de Rashba $\langle dV/dx \rangle$. La posición de estos cruces y anticruces con el campo magnético puede ser seleccionada cambiando el ancho de la barrera entre los puntos. El hecho que algunos cruces no se conviertan en anticruces en presencia de la interacción de

Rashba se debe a que sus niveles no están acoplados entre sí por la interacción. Por lo demás, esta interacción no modifica el aspecto general del espectro de energía. En cambio, la interacción de Coulomb cambia los niveles de energía produciendo desplazamientos de cruces y anticruces y generando nuevos. De esta forma, el espectro de energías cambia notoriamente.

Tanto en las heteroestructuras de GaAs como en las de InAs aparecen anticruces para campos magnéticos mucho más pequeños que en InSb, debido a que los Δ_{SAS} de los primeros son muy chicos, es decir, sus niveles de energía se encuentran muy próximos y con sólo introducir un campo magnético menor a 0.2 T se separan y se cruzan mucho antes comparado con el caso de InSb, donde ocurre para campos mayores a 1 T.

En la última etapa se estudiaron las tasas de relajación entre el estado fundamental y el primer estado excitado en función del campo magnético, $\langle dV/dx \rangle$ y la temperatura. Nuevamente, el valor de las tasas en InSb proviene principalmente de los fonones debido al potencial de deformación, luego al potencial piezoeléctrico TA1+TA2 y, finalmente en menor medida, al potencial piezoeléctrico LA. Para el caso de InAs, la mayor contribución se encuentra en el potencial de deformación, luego en el potencial piezoeléctrico LA y, finalmente, en el piezoeléctrico TA1+TA2. En estas figuras se observa que al disminuir $\langle dV/dx \rangle$ comienza a aparecer un mínimo en las tasas, cuya posición coincide con el anticruce registrado en las figuras de los niveles de energía y S_z ($B = 1.7$ T para InSb y $B = 0.025$ T para InAs). Si se grafica Γ en función del campo magnético en ausencia de la interacción de Coulomb, la curva será muy similar a las curvas con interacción coulombiana pero el mínimo se encontraría cercano a $B = 3$ T, como se ve en el anticruce de la figura de los niveles de energía y S_z correspondiente (ver Figura 4.5). Pero sus valores de Γ son un poco más altos comparados con el caso de tener interacción coulombiana. Esto se debe a que la interacción coulombiana modifica la posición de los niveles de energía de manera tal que Δ_{SAS} se hace muy pequeña.

Al aumentar la temperatura los valores de Γ también aumentan. Sin embargo, para InSb

se encontró un rango de temperaturas - $0 \text{ K} < T < 8 \text{ K}$ - en las que la tasa de relajación permanece constante.

Los valores de las tasas de relajación para el caso de un electrón y dos electrones son comparables. Para el rango de campo magnético estudiado, se observó un mínimo en la tasa de relajación para el caso de dos electrones y no para el caso de un electrón. Este estrecho mínimo que corresponde al anticruce registrado en la gráfica de las energías en función del campo magnético puede resultar de utilidad si se busca tiempos de vida más largos.

Agradecimientos

Quiero agradecer especialmente al Dr. Pablo Tamborenea por todos estos años de enseñanza, por haber creído en mí desde el primer momento; quien no sólo fue mi director de tesis sino también un gran amigo con quien pude contar, por darme la posibilidad de conocer a otros científicos, como el Dr. Sergio Ulloa, a quien también agradezco por darme la posibilidad de investigar junto a su grupo de trabajo con otros investigadores.

Tanto Pablo como Sergio, son excelentes personas, con los que disfruté muchísimo mi trabajo y de quienes también aprendí mucho en lo personal y en lo profesional. Gracias también por darme la posibilidad de viajar y de conocer científicos de todo el mundo. Ambos fueron mi guía durante toda esta etapa y siempre los recordaré por todo lo que me dieron.

También quiero agradecer al Dr. Augusto Alcalde y al Dr. Gilmar Marques, a quienes conocí personalmente y tuve la posibilidad de trabajar con ellos.

Finalmente quiero agradecer a mis familiares, amigos y colegas que me ayudaron, ya sea en la corrección - Lucila - y en la parte estética - Karin - como así también en todos los aspectos que conllevó este trabajo. Gracias a todos ellos finalmente llegué a concretar mi sueño.

GRACIAS A TODOS!

Lic. Carla L. Romano

LISTA DE TRABAJOS PUBLICADOS

Trabajos publicados durante el período de doctorado:

- *Level structure and spin-orbit effects in quasi-one-dimensional semiconductor nanostructures.* C. L. Romano, S. E. Ulloa, y P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **71**, 035336 (2005). Seleccionado para la revista *Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology*, February 7, 2005
- *Spin relaxation rates in quasi-one-dimensional coupled quantum dots.* C. L. Romano, P. I. Tamborenea, y S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **74**, 155433 (2006). Seleccionado para la revista *Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology*, Noviembre 13, 2006.
- *Phonon modulation of the spin-orbit interaction as a spin relaxation mechanism in quantum dots.* C. L. Romano, G. E. Marques, L. Sanz y A. M. Alcalde, Phys. Rev. B **77**, 033301 (2008). Seleccionado para la revista *Virtual Journal of Nanoscale Science and Technology*, Enero 14, 2008.
- *Spin relaxation rates in quantum dots: Role of the phonon modulated spin-orbit interaction.* A. M. Alcalde, C. L. Romano, y G. E. Marques, Solid State Communications 148, 255-258 (2008).
- *Spin-orbit effects on two-electron states in nanowhisker double quantum dots.* C. L. Romano, P. I. Tamborenea, S. E. Ulloa, cond-mat: arXiv:0801.1808v1, fue enviado a Phys. Rev. B, fue revisado y reenviado con las correcciones solicitadas para su publicación.

Bibliografía

- [1] F. Žutić y Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 346-368 (2004).
- [2] J. J. Krich y B. I. Halperin, *Phys. Rev. B* **78**, 035338 (2008).
- [3] T. P. Pareek y A. M. Jayannavar, *Phys. Rev. B* **77**, 153307 (2008).
- [4] P. Stefanski, *Phys. Rev. B* **77**, 125331 (2008).
- [5] J. C. Egues, G. Burkard, D. S. Saraga, J. Schliemann, y D. Loss, *Phys. Rev. B* **72**, 235326 (2005).
- [6] S. Datta y B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1989).
- [7] F. de Pasquale, G. L. Giorgi y S. Paganelli, *Phys. Rev. A* **71**, 042304 (2005).
- [8] R. Feynmann, *Feynman Lectures on Computation*, (edited by Tonny Hey y Robin W. Allen, 1996).
- [9] P. Benioff, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1581 (1982), P. Benioff, *J. Stat. Phys.* **29**, 515 (1982).
- [10] D. Deutsch, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 286 (1982).
- [11] C. H. Bennett, G. Brassard, S. Breidbart y S. Wiesner, *Quantum Cryptography, or Unforgeable Subway Tokens Advances in Cryptography*, Proceedings of Crypto 82, 267 (Plenum, New York, 1983). C. H. Bennett, *Science* **257**, 752 (1992). C. H. Bennett, *Physics Today* **48**, 24 (1995).

-
- [12] Lov K. Groves, Phys. Rev. Lett. **79**, 325 (1997).
- [13] R. M. Lutchyn, L. Cywinski, C. P. Nave y S. Das Sarma, Phys. Rev. B **78**, 024508 (2008).
- [14] D. Mozyrsky, Sh. Kogan, V. N. Gorshkov y G. P. Berman, Phys. Rev. B **65**, 245213 (2002).
- [15] J. P. Paz, S. Habib y W. H. Zurek, Phys. Rev. D **47**, 488 (1993).
- [16] O. Oreshkov y T. A. Brun, Phys. Rev. A **76**, 022318 (2007).
- [17] G. D. Sanders, K. W. Kim y W. C. Holton, Phys. Rev. B **61**, 7526 (2000).
- [18] D. D. Awschalom, D. Loss y N. Samarth, *Spins for quantum information processing*, D. Divincenzo in *Semiconductor spintronic and quantum computation*, (Springer-Verlag, Berlin, 2002). D. Divincenzo, Science 270, 5234, 255 (1995).
- [19] T. R. Beals, J. Vala y K. B. Whaley, Phys. Rev. A **77**, 052309 (2008).
- [20] T. Nakaoka, S. Tarucha y Y. Arakawa, Phys. Rev. B **76**, 041301 (2007). I. E. Itskevich, M. S. Skolnick, D. J. Mowbray, I. A. Trojan, S. G. Lyapin, L. R. Wilson, M. J. Steer, M. Hopkinson, L. Eaves y P. C. Main, Phys. Rev. B **60**, R2185 (1999).
- [21] D. Loss y D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
- [22] S. Bellucci y P. Onorato, Phys. Rev. B **68**, 245322 (2003). Y. Tokura y S. Tarucha, Phys. Rev. B **53**, 16403 (1996).
- [23] T. Kubo, Y. Tokura, T. Hatano y S. Tarucha, Phys. Rev. B **74**, 205310 (2006). H. Westfahl, A. O. Caldeira, G. Medeiros-Ribeiro y M. Cerro, Phys. Rev. B **70**, 195320 (2004). S. Tarucha y Y. Hirayama, Phys. Rev. B **43**, 9373 (1991).
- [24] X. F. Wang, Phys. Rev. B **69**, 035302 (2004).

-
- [25] F. Mireles y G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **64**, 024426 (2001).
- [26] E. A. de Andrada e Silva y G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **67**, 165318 (2003).
- [27] A. M. Alcalde y O. O. Diniz Neto, y G. E. Marques, *Microelectronic Journal* **36**, 1034 (2005).
- [28] O. Voskoboynikov, C. P. Lee y O. Tretyak, *Phys. Rev. B* **63**, 165306 (2001).
- [29] C. E. Pryor y M. E. Flatté, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 026804 (2006).
- [30] G. Lommer, F. Malcher y U. Rössler, *Phys. Rev. B* **32**(R), 6965 (1985).
- [31] T. P. Alegre, F. G. Hernández, A. L. Pereira y G. Medeiros-Ribeiro, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 236402 (2006).
- [32] A. V. Moroz y C. H. W. Barnes, *Phys. Rev. B* **60**, 14272 (1999).
- [33] Jai-Lin Zhu y Z. Dai, *Phys. Rev. B* **68**, 045324 (2003).
- [34] O. Entin-Wohlman, A. Aharony y Y. Levinson, *Phys. Rev. B* **64**, 085332 (2001).
- [35] A. Alavi, *J. of Chem. Phys.* **113**, 7735 (2000).
- [36] R. Hanson, B. Witkamp, L. M. K. Vandersypen, L. H. Willems van Beveren, J. M. Elzerman y L. P. Kouwenhoven, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 196802 (2003). N. J. Carig, J. M. Taylor, E. A. Lester, C. M. Marcus, M. P. Hanson y A. C. Gossard, *Science* **304**, 565 (2004).
- [37] M. Kroutvar, Y. Ducommun, D. Heiss, M. Bichler, D. Schuh, G. Abstreiter, y J. J. Finley, *Nature* **432**, 81 (2004).
- [38] S. M. Reimann y M. Manninen, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 1283 (2002).
- [39] L. Jacak, P. Hawrylak y A. Wójs, *Quantum Dots* (Springer-Verlag, Berlin, 1998).

-
- [40] K. Brunner, U. Bockelmann, G. Abstreiter, M. Walther, G. Böhm, G. Trökle y G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **69**, 3216 (1992). S. Tarucha, D. G. Austing y T. Honda, Phys. Rev. Lett. **77**, 3613 (1996). M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore y A. E. Wetsel, Phys. Rev. Lett. **60**, 535 (1988). P. M. Petroff, A. Lorke y A. Imamoglu, Phys. Today **54**, 46 (2001).
- [41] W. Dybalski y P. Hawrylak, Phys. Rev. B **72**, 205432 (2005).
- [42] L. A. Pozhar, A. T. Yeates, F. Szmulowicz y W. C. Mitchel, Phys. Rev. B **74**, 085306 (2006).
- [43] A. De y C. E. Pryor, Phys. Rev. B **76**, 155321 (2007).
- [44] C. Fastch, A. Fuhrer, L. Samuelson, V. N. Golovach y D. Loss, Phys. Rev. Lett. **98**, 266801 (2007). M. T. Björk, A. Fuhrer, A. E. Hansen, M. W. Larson, L. E. Froöberg y L. Samuelson, Phys. Rev. B **72** 201307(R) (2005).
- [45] K. Hiruma, M. Yazawa, T. Katsuyama, K. Haraguchi y M. Koguchi, Jpn. J. Appl. Phys. Part 1 **77**, 851 (2000). V. G. Dubrovskii, G. E. Cirlin, I. P. Soshnikov, A. A. Tonkikh, N. V. Sibirev, Yu B. Samsonenko y V. M. Ustinov, Phys. Rev. B **71**, 205325 (2005).
- [46] Y. Cui y C. M. Lieber, Science **91**, 851 (2000).
- [47] J. H. Davies, *The Physics of low-dimensional semiconductors, An introduction*, (Cambridge University Press 1998).
- [48] V. G. Dubrovskii, G. E. Cirlin, I. P. Soshnikov, A. A. Tonkikh, N. V. Sibirev, Yu. B. Samsonenko y V. M. Ustinov, Phys. Rev. B **71**, 205325 (2005).
- [49] R. C. Miller, W. T. Tsang y W. A. Nordland, Phys. Rev. B **21**, 1569 (1980).
- [50] M. T. Björk, A. E. Hansen, M. W. Larsson, L. E. Fröberg y L. Samuelson, Phys. Rev. B **72**, 201307(R) (2005).

-
- [51] A. E. Hansen, M. T. Björk, C. Fasth, C. Thelander y L. Samuelson, Phys. Rev. B **71**, 205328 (2005).
- [52] A. Baumgartner, T. Ihn, K. Ensslin, K. Maranowski y A. C. Gossard, Phys. Rev. B **76**, 085316 (2007), W. Pan, J. S. Xia, H. L. Stormer, D. C. Tsui, C. Vicente, E. D. Adams, N. S. Sullivan, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin y K. W. West, Phys. Rev. B **77**, 075307 (2008).
- [53] S. Ihn, J. Song, Y. Kim y J. Yong Lee, IEEE-NANO 2006. Sixth IEEE Conference on Volume 1, 113 (2006). Y. Hsu, W. I. Wang y T. S. Kuan, Phys. Rev. B **50**, 4973 (1994). G. E. Franklin, D. H. Rich, Hawoong Hong, T. Miller y T. C. Chiang, Phys. Rev. B **45**, 3426 (1992).
- [54] A. De, y C. Pryor, Phys. Rev. B **76**, 155321 (2007). M. Hanke, C. Eisenschmidt, P. Werner, N. D. Zakharov, F. Syrowatka, F. Heyroth, P. Schafer y O. Konovalov, Phys. Rev. B **75**, 161303 (2007).
- [55] V. N. Golovach, A. Khaetskii y D. Loss, Phys. Rev. Lett. **93**, 016601 (2004).
- [56] S. Adachi, J. Appl. Phys. **58** (3) (1985).
- [57] F. Iikawa, M. P. F. Godoy, M. K. K. Nakaema, M. J. S. P. Brasil, M. Z. Maialle, M. A. Degani, E. Ribeiro, G. Medeiros-Ribeiro, W. Carvalho Jr. y J. A. Brum, Brazilian Journal of Phys. **67**, 555 (2004).
- [58] P. Y. Yu y M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors, Physics and material properties*, (3 edition, Springer, 2003).
- [59] K. Gnanasekar y K. Navaneethakrishnan, Physica E **28**, 328 (2005).
- [60] A. C. Bleszynski-Jayich, L. E. Fröberg, M. T. Björk, H. J. Trodahl, L. Samuelson, y R. M. Westervelt, Phys. Rev. B **77**, 245327, (2008).

-
- [61] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, y L. R. Ram-Mohan, *Journal of Applied Physics* **89**, number 11, p. 5816 (2001).
- [62] D. Oertel, D. Bimberg, R. K. Bauer y K. W. Carey, *Appl. Phys. Lett.* **55**, Issue 2, pp. 140-141 (1989).
- [63] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha y L. M. K. Vandersypen, *Rev. Mod. Phys.* **79**, 1217-1265 (2007). Spins in few-electron quantum dots.
- [64] R. Sousa y S. Das Sarma, *Phys. Rev. B* **68**, 155330 (2003).
- [65] L. W. Molenkamp, G. Schmid y G. E. W. Bauer, *Phys. Rev. B* **64**, 121202 (R) (2001).
- [66] M. Valín-Rodríguez, A. Puente y L. Serra, *Phys. Rev. B* **69**, 1533028, (2004).
- [67] J. Nitta, T. Akazaki y H. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78** 1335 (1997).
- [68] C. -M. Hu, J. Nitta, T. Akazaki, J. Osaka, P. Pfeffer y W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* **60**, 7736 (1999).
- [69] D. Grundler, *Phys. Rev. Lett.* **84** 6074 (2000).
- [70] R. H. Silsbee, *J. of Phys. : Condensed Matter* **16** R179-R207 (2004).
- [71] E. I. Rashba, *Fiz. Tverd. Tela (Leningrad)* **2**, 1224 (1960), *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
- [72] C. Tahan, y R. Joynt, *Phys. Rev. B* **71**, 075315 (2005).
- [73] J. H. Jiang, Y. Y. Wang y M. W. Wu, *Phys. Rev. B* **77**, 035323 (2008).
- [74] M. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 206802 (2002).
- [75] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano y A. O. Gogolin, *Phys. Rev. B* **70**, 115316 (2004).
- [76] C. F. Destefani, S. E. Ulloa y G. E. Marques, *Phys. Rev. B* **69**, 125302 (2004).

-
- [77] E. I. Rashba y Al. L. Efros, Appl. Phys. Lett. **83**, 5295, (2003). Phys. Rev. Lett. **91**, 126405, (2003).
- [78] C. M. Lieber, Nano Lett **2**, 81 (2002).
- [79] A. M. Morales y C. M. Lieber, Science **279**, 208 (1998).
- [80] M. T. Björk, C. Thelander, A. E. Hansen, L. E. Jensen, M. W. Larsson, L. R. Wallenberg y L. Samuelson, Nano Lett. **4**, 1621 (2004).
- [81] P. I. Tamborenea y H. Metiu, Phys. Rev. Lett. **83**, 3912 (1999); Europhys. Lett. **53**, 776 (2001).
- [82] P. Zhang y X. G. Zhao, Phys. Lett. A **271**, 419 (2000).
- [83] L. Meza-Montes, S. E. Ulloa y D. Pfannkuche, Physica E (Amsterdam) **1**, 274 (1998).
- [84] C. E. Creffield y G. Platero, Phys. Rev. B **69**, 165312 (2004); **65**, 113304 (2002).
- [85] G. Dresselhaus, A. F. Kip y C. Kittel, Phys. Rev. **92**, 827 (1953).
- [86] G. Dresselhaus, A. F. Kip, y C. Kittel, Phys. Rev. **95**, 568 (1954).
- [87] R. N. Dexter, Benjamin Lax, A. F. Kip y G. Dresselhaus, Phys. Rev. **96**, 222 (1954).
- [88] G. Dresselhaus, A. F. Kip, C. Kittel y G. Wagoner, Phys. Rev. **98**, 556 (1955).
- [89] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
- [90] A. Messiah, *Mecánica cuántica*, (Ed. Tecnos, Tomo II, 1975).
- [91] F. G. Pikus y G. E. Pikus, Phys. Rev. B **51**, 16928 (1995).
- [92] M. Florescu, S. Dickman, M. Ciorga, A. Sachrajda y P. Hawrylak, Physica E **22**, 414 (2004).
- [93] Many Particle physics, Mahan, p. 32.

-
- [94] A. V. Khaetskii y Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **61**, 12639 (1999).
- [95] A. V. Khaetskii y Y. V. Nazarov, Phys. Rev. B **64**, 125316 (2001).
- [96] L. M. Woods, T. Reinecke y Y. Lyanda-Geller, Phys. Rev. B **66**, 161318 (R) (2002op).
- [97] M. Florescu y P. Hawrylak, Phys. Rev. B **73**, 045304 (2006).
- [98] C. L. Romano, S. E. Ulloa y P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **71**, 035336 (2005).
- [99] V. I. Perel', S. A. Tarasenko, I. N. Yassievich, S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov y W. Prettl, Phys. Rev. B **67**, 201304 (2003).
- [100] S. D. Ganichev, V. V. Belkov, L. E. Golub, E. L. Ivechenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss y W. Prettl, Phys. Rev. Lett. **92**, 256601 (2004).
- [101] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics*, 2nd. Edition (Plenum, New York), 1987.
- [102] D. V. Bulaev y D. Loss, Phys. Rev. B **71**, 205324 (2005).
- [103] A. Bertoni, M. Rontani, G. Goldoni, F. Troiani y E. Molinari, Appl. Phys. Lett. **85**, 4729 (2004).
- [104] C. L. Romano, P. I. Tamborenea y S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **74**, 155433 (2006).
- [105] V. N. Golovach y M. E. Portnoi Phys. Rev. B **74**, 085321 (2006).
- [106] W. Dybalski y P. Hawrylak, Phys. Rev. B **72**, 205432 (2005).
- [107] W. Zhu y S. B. Trickey, Phys. Rev. B **72**, 022501 (2005).
- [108] J. T. Lin y T. F. Jiang, Phys. Rev. B **64**, 195323 (2001).
- [109] D. Xu y J. Zhu, Phys. Rev. B **72**, 075326 (2005).

[110] J. H. Jefferson, M. Fearn y D. L. J. Tipton, *Phys. Rev. B* **66**, 042328 (2002).

[111] M. Dineykhan y R. G. Nazmitdinov, *Phys. Rev. B* *55*, 13707 (1997).