



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Departamento de Física

**Interacción de electrones e impurezas magnéticas en  
anillos semiconductores delgados con interacción  
espín-órbita**

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

**Lic. José Miguel Lia**

Director de tesis: Prof. Dr. Pablo Ignacio Tamborenea  
Consejero de estudios: Prof. Dr. Rodolfo Sassot

Buenos Aires, 2024



# Interacción de electrones e impurezas magnéticas en anillos semiconductores delgados con interacción espín-órbita

## Resumen

Estudiaremos la dinámica cuántica del momento angular generada por las interacciones espín-órbita (SOI) de Rashba y Dresselhaus, y de intercambio (*exchange*) entre un electrón de conducción y un conjunto de impurezas magnéticas, en un anillo cuántico semiconductor delgado. Nuestro objetivo es comprender la conversión de impulso angular orbital (OAM) en impulso angular de espín (SAM) electrónico, y la reconversión de éste al SAM de los electrones en la capa exterior de las impurezas mediante la interacción de intercambio. Buscamos contribuir a la búsqueda de mecanismos de magnetización efectiva del sistema de impurezas mediante portadores de carga y sin la utilización de campos magnéticos externos.

Comenzamos resolviendo el problema de autovalores para el electrón en el anillo sin impurezas y bajo la acción de ambas SOI. Luego, estudiaremos la dinámica de conversión de OAM a SAM electrónico generada por las SOI. Incluiremos luego las impurezas pero omitiremos las SOI, a fin de estudiar la conversión de SAM electrónico en SAM de cada impureza individual y la relevancia de la mediación electrónica en la magnetización del sistema total de impurezas. Finalmente, tomaremos un semiconductor II-VI típico y estudiaremos cómo la interacción de Dresselhaus afecta la magnetización de las impurezas.

Palabras clave: anillos cuánticos, semiconductores magnéticos diluidos, interacción espín-órbita, Rashba, Dresselhaus

# Interaction between electrons and magnetic impurities in semiconductor Quantum Rings with spin-orbit interaction

## Abstract

We study the quantum dynamics of the orbital and spin angular momenta (OAM and SAM, respectively) of a conduction electron subject to the Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings (SOI) in a narrow quantum ring doped with few magnetic impurities. We aim to analyze the conversion of OAM into electronic SAM and its subsequent conversion into SAM of the electrons in the outer  $d$  shell of the impurities through the  $sd$ -exchange interaction. We seek to contribute to the search for mechanisms to magnetize the impurities using only the electron's OAM, without recourse to external magnetic fields.

We begin by solving the time-independent Schrödinger equation for the electron subject to the SOI only. We then study the OAM-to-SAM conversion dynamics induced by both interactions. We then add the impurities but neglect the SOI altogether, so as to study the relevance of the electron in the conversion of electronic to impurity SAM and to the magnetization of the system as a whole. We assume the impurity density to be small so that the system can be studied without resorting to mean-field theories. Finally, we pick a typical II-VI semiconductor and study how the Dresselhaus interaction affects the magnetization of the impurities.

Keywords: quantum rings, dilute magnetic semiconductors, spin-orbit interaction, Rashba, Dresselhaus.

# Agradecimientos

A mi director, Pablo I. Tamborenea, y a mi consejero de estudios, Dr. Rodolfo Sassot.



# Índice general

Resumen	III
Abstract	IV
Agradecimientos	V
Índice general	VII
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Objetivos y motivación . . . . .	1
1.2. Marco teórico . . . . .	4
1.2.1. Aproximación de función envolvente . . . . .	4
1.2.2. Interacción espín-órbita en estructuras bidimensionales . . . .	6
1.2.3. Semiconductores magnéticos diluidos . . . . .	11
<b>2 Anillo delgado</b>	<b>17</b>
2.1. Presentación . . . . .	17
2.2. Aproximación de anillo delgado . . . . .	18
2.3. Ecuación de Schrödinger . . . . .	21
2.4. Diagonalización del Hamiltoniano efectivo . . . . .	23

2.4.1.	Factor espinor $\chi(\varphi)$ . . . . .	23
2.4.2.	Factor escalar $f(\varphi)$ . . . . .	26
2.4.3.	Construcción y propiedades de $\Phi(\varphi)$ . . . . .	28
2.5.	Tratamiento perturbativo de las soluciones . . . . .	31
2.6.	Extensión del Hamiltoniano efectivo . . . . .	38
2.7.	Ruptura de la simetría de inversión temporal . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Dinámica en el anillo sin impurezas y con SOI</b>	<b>45</b>
3.1.	Presentación . . . . .	45
3.2.	Dinámica individual de las SOI de Rashba y Dresselhaus . . . . .	46
3.3.	Dinámica conjunta de las SOI de Rashba y Dresselhaus . . . . .	53
3.4.	Inclusión del primer nivel radial excitado . . . . .	58
<b>4</b>	<b>Interacción entre electrones e impurezas en el anillo sin SOI</b>	<b>65</b>
4.1.	Presentación . . . . .	65
4.2.	Modelo efectivo en una dimensión . . . . .	67
4.3.	Dinámica aproximada de un único electrón y pocas impurezas . . . .	70
4.4.	Estudio numérico del truncamiento . . . . .	75
<b>5</b>	<b>Dinámica del intercambio de SAM en presencia de SOI</b>	<b>83</b>
5.1.	Presentación . . . . .	83
5.2.	Dinámica en ausencia de SOI . . . . .	86
5.3.	Dinámica en presencia de SOI . . . . .	93
<b>6</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>99</b>
	<b>Lista de trabajos publicados</b>	<b>107</b>



A Anillo delgado	109
B Dinámica en el anillo	115
C Interacción entre electrones e impurezas sin SOI	119
Bibliografía	123



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Objetivos y motivación

El propósito de este trabajo es estudiar la dinámica de la transferencia de impulso angular entre un electrón de conducción sujeto a la interacción espín-órbita (SOI), y un conjunto de impurezas magnéticas en semiconductores nanoscópicos de geometría anular (*quantum rings* o QR). Estos sistemas son un caso especial de los conocidos como *semiconductores magnéticos diluidos* o DMS por sus siglas en inglés.

La motivación principal tiene su origen en la posibilidad de generar electrones de conducción con impulso angular orbital (OAM) definido a través de la interacción con vórtices ópticos [1], esto es, pulsos de luz que portan impulso angular orbital definido [2], especialmente en geometrías apropiadas como *dots* cilíndricos [3, 4], y las que nos ocupan en este trabajo [5, 6].

La generación de vórtices ópticos de distintos perfiles es realizable en la práctica [7-11], y la observación teórica de que estos podrían utilizarse para excitar electro-

nes en un estado de OAM deseado es de interés en espintrónica. El interrogante fundamental es: si se dopa un semiconductor (por ejemplo, el ZnSe) con impurezas magnéticas (usualmente átomos de manganeso), ¿puede el impulso angular electrónico convertirse, mediante algún mecanismo, en magnetización efectiva del conjunto de impurezas?

Desde la perspectiva teórica, la interacción de intercambio entre el espín de los electrones localizados de las capas externas de las impurezas magnéticas (en el caso de Mn, la capa  $d$  externa), y el propio de los de conducción ha sido extensamente estudiada [12-14]. Veremos en la §1.2.3 que el modelo usualmente adoptado supone que esta interacción es de «contacto», es decir, que ocurre en la vecindad de cada impureza individual [12, 13, 15, 16]. Si bien este modelo acopla la densidad electrónica al intercambio de espín entre el electrón y las impurezas (gracias al potencial de contacto —cuya forma funcional es del tipo delta de Dirac— que decae rápidamente fuera de la vecindad de cada una de ellas), la forma en que lo hace conserva el impulso angular de espín (SAM) total y no produce necesariamente un efecto neto de transferencia entre el OAM electrónico y el SAM de las impurezas en casos de interés, como se verá en los Caps. 4 y 5.

En este trabajo exploraremos uno de los posibles mecanismos para vincular el OAM electrónico al SAM de las impurezas, que consiste en estudiar la acción conjunta de las interacciones de intercambio y espín-órbita. En estructuras de una o dos dimensiones como las que consideraremos, la interacción espín-órbita puede ser intrínseca al material, como sucede, por ejemplo, en los semiconductores de estructura zincblenda en los que nos concentraremos; o puede producirse por la presencia de un campo eléctrico macro o mesoscópico externo. En el primer caso, la interacción espín-órbita da origen al término de Dresselhaus [16, 17], y, en el segundo,

al término de Rashba [16, 18]. Como se verá en la §1.2.2, el término de Dresselhaus en estructuras bidimensionales depende exclusivamente del semiconductor y del confinamiento en la dirección de crecimiento del material, por lo que no puede omitirse y puede ser de importancia en estructuras muy confinadas; mientras que el término de Rashba, al menos en los casos considerados aquí, es, hasta cierto punto, controlable externamente

Tomaremos, entonces, al espín del electrón como intermediario entre el OAM del mismo y el SAM de las impurezas, y estudiaremos cómo la SOI afecta esta transferencia y si la ayuda u obstaculiza.

Seguiremos a este efecto un esquema constructivo, por lo que estudiaremos cada aspecto del problema de forma separada. Estudiaremos primero el anillo delgado sin impurezas pero con ambos tipos de SOI. En el Cap. 2 resolveremos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón en el anillo y estudiaremos las características principales de los autoestados y autoenergías. Dedicaremos el Cap. 3 a la dinámica del electrón bajo estas interacciones. Posteriormente, en el Cap. 4, analizaremos la dinámica de intercambio de SAM entre el electrón y las impurezas en el QR, suponiendo las SOI ausentes. Finalmente, incluiremos la interacción de intercambio y la SOI de Dresselhaus para estudiar en el Cap. 5 en qué medida el espín del electrón puede actuar como mediador. Puesto que nuestro objetivo es comprender cada aspecto en detalle, simplificaremos nuestro análisis suponiendo en todo momento un único electrón de conducción. Esta suposición simplifica notablemente el problema, pues permite ignorar la interacción de Coulomb entre electrones, sin por ello afectar el objetivo central de este trabajo.

A continuación ampliaremos breve pero detalladamente el marco teórico y experimental en que se encuadra este trabajo.

## 1.2. Marco teórico

### 1.2.1. Aproximación de función envolvente

Una hipótesis central de la descripción de un sólido cristalino es la periodicidad espacial ilimitada. Esta periodicidad requiere no sólo que el material sea homogéneo en su composición, sino también que el mismo carezca de bordes o limitación alguna. Por ello, al considerar apartamientos tanto en la pureza del semiconductor (por ejemplo, mediante la inclusión de impurezas sustitutivas [19]) o en su geometría (por ejemplo, suponiéndola limitada en el espacio), esta periodicidad absoluta se pierde [19]. Usualmente, estos apartamientos del cristal ideal se realizan a través de la inclusión de un potencial  $V(\mathbf{r})$  que modifica o rompe la simetría de traslación original. Es importante mencionar que  $V(\mathbf{r})$  no necesariamente es un potencial externo al cristal, puede bien ser interno: por ejemplo, el coulombiano proveniente de una impureza iónica [19]. El Hamiltoniano total puede expresarse, así, como:

$$H = H_0 + V(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

donde  $H_0$  es el Hamiltoniano del cristal ideal. La ecuación de Schrödinger que determina los autoestados  $\Psi(\mathbf{r})$  de este Hamiltoniano es naturalmente más difícil de tratar. Sin embargo, cuando  $V(\mathbf{r})$  varía suavemente en el cristal, es posible aplicar el método que describiremos a continuación, que permite hallar, de forma indirecta, los  $\Psi(\mathbf{r})$  y sus energías asociadas.

Supongamos que el número de celdas primitivas  $N$  del cristal es tan grande que el conjunto de vectores de la red de Bravais  $\{\mathbf{R}_i\}_{1 \leq i \leq N}$  puede aproximarse como continuo, y expresemos los autoestados del Hamiltoniano (1.1) como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n,i} C_n(\mathbf{R}_i) W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i); \quad (1.2)$$

en términos de las funciones de Wannier [20, 21]

$$W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

con  $n$  el índice que numera las bandas  $E_n(\mathbf{k})$  y  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  la función de Bloch de la banda  $n$ . Los coeficientes  $C_n(\mathbf{R})$  son conocidos como *funciones envolventes* [19].

La utilidad de expandir los estados  $\Psi(\mathbf{r})$  de esta forma se verá en seguida, pero por el momento notemos que  $H_0$  satisface las relaciones:

$$(W_n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i), H_0 W_{n'}(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i)) = \delta_{ij} \delta_{nn'} E_n(\mathbf{k}) \leftrightarrow \delta_{ij} \delta_{nn'} E_n \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right), \quad (1.4)$$

donde  $(\cdot, \cdot)$  es el producto interno en el espacio de Hilbert. La identificación de  $\mathbf{k}$  con el operador  $-i \partial / \partial \mathbf{R}$  es posible siempre que  $\mathbf{R}$  (y, por tanto,  $\mathbf{k}$ ) sean supuestos como continuos. En este caso, es posible mostrar [19] que las variables  $\mathbf{R}$  y  $\mathbf{k}$  son asociables a operadores conjugados, que guardan entre sí relaciones de conmutación similares a las del impulso  $\mathbf{p}$  y el operador posición  $\mathbf{r}$  verdaderamente continuos. Esto es,

$$\mathbf{R} \leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \quad \text{y} \quad \mathbf{k} \leftrightarrow -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}. \quad (1.5)$$

Supongamos entonces que el potencial  $V(\mathbf{r})$  varía suavemente y expandámoslo en serie de Taylor alrededor del vector  $\mathbf{R}_i$  de una celda en particular:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{R}_i) + (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \cdot \nabla V(\mathbf{R}_i) + O(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|^2) \approx V(\mathbf{R}_i); \quad (1.6)$$

Si las variaciones de este potencial son muy pequeñas dentro de cada celda, es razonable aproximararlo por el término de orden cero en cada una de ellas. Así, si  $a_0$  es una longitud característica de la celda (por ejemplo, la longitud del vector primitivo más largo), y suponemos que

$$a_0 |\nabla V(\mathbf{r})| \ll V(\mathbf{r}) \quad (1.7)$$

Podemos considerar que  $V(\mathbf{r}) \approx V(\mathbf{R})$ , interpretando ya  $\mathbf{R}$  como una variable continua.

Juntemos ahora esta aproximación para  $V(\mathbf{r})$  con las relaciones de la ec. 1.4, y notemos que podemos convertir la ecuación de Schrödinger para los  $\Psi(\mathbf{r})$ , en una ecuación de Schrödinger sobre las funciones envolventes (los coeficientes  $C_n(\mathbf{R})$ ):

$$[E_n(\mathbf{k}) + V(\mathbf{R})] C_n(\mathbf{R}) = E C_n(\mathbf{R}). \quad (1.8)$$

Si consideramos únicamente los estados de Bloch  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  próximos a un extremo de la banda de conducción, (digamos, el punto  $\Gamma$ , o  $\mathbf{k} = 0$ , en algunos semiconductores), y suponemos, además, que la banda alrededor de este punto es isótropa y homogénea, podemos expandir  $E_n(\mathbf{k})$  en serie de Taylor como sigue:

$$E_n(\mathbf{k}) \approx E_n(\mathbf{k} = 0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^*} \rightarrow E_n(\mathbf{k} = 0) + \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right)^2; \quad (1.9)$$

donde  $m_n^*$  es la *masa efectiva* de la banda  $n$  [19]. Reemplazando esta expresión en la ec. (1.8), obtenemos, finalmente:

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2m_n^*} \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right)^2 + V(\mathbf{R}) \right] C_n(\mathbf{R}) = (E - E_n(\mathbf{k} = 0)) C_n(\mathbf{R}) \quad (1.10)$$

Es importante mencionar aquí que el mismo argumento puede utilizarse para obtener una ecuación equivalente para la banda de valencia.

### 1.2.2. Interacción espín-órbita en estructuras bidimensionales

El Hamiltoniano de interacción espín-órbita (SO) para un electrón en un átomo proviene originalmente de la ecuación de Pauli y toma la forma:

$$H_{\text{SO}} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\nabla V_0(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \vec{\sigma} \quad (1.11)$$



donde  $m_0$  es la masa del electrón libre,  $c$  la velocidad de la luz en vacío,  $\vec{\sigma}$  es el vector de matrices de Pauli, y  $V_0(\mathbf{r})$  el potencial del núcleo [16, 19].

La interacción espín-órbita se tiene en cuenta, en el estudio de sólidos cristalinos, a través de este Hamiltoniano [16] o bien expresado en una forma general como un término de la forma  $H_{\text{SO}} \propto \mathbf{L} \cdot \vec{\sigma}$  [19]. En el primer caso,  $V_0(\mathbf{r})$  es reinterpretado como el potencial microscópico de la red cristalina.

Sea cual fuere la forma en que se modela la interacción, la adición de  $H_{\text{SO}}$  modifica tanto los estados de Bloch de electrones y huecos como en la estructura de bandas, particularmente en el centro de la primera zona de Brillouin (PZB) [19]. Si  $H_{\text{SO}}$  modifica la estructura de bandas, la forma en que lo hace es naturalmente distinta para cada sólido en particular, pues depende de las propiedades de su red cristalina. Esta cuestión es de importancia al momento de obtener modelos aproximados para el Hamiltoniano del cristal, en especial alrededor de puntos de la PZB de alta simetría como, por ejemplo, el punto  $\Gamma$ . En semiconductores de estructura zincblenda, por ejemplo,  $H_{\text{SO}}$  da cuenta de la dependencia de las bandas de valencia respecto del impulso angular total de los portadores de carga, por lo que la interacción espín-órbita no puede despreciarse totalmente en el cálculo de estructura de bandas [16].

Los modelos reducidos para este y otro tipo de cálculos parten usualmente de la ecuación de autovalores de Schrödinger:

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + H_{\text{SO}} \right] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (1.12)$$

donde  $\mathbf{k}$  es un vector de la red recíproca. La acción de  $p^2$  sobre el factor  $e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  produce términos adicionales a los tres dentro del corchete que permiten llevar esta ecuación a una que solo involucra a  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  y  $E_{\nu}(\mathbf{k})$ ; es decir, a la parte periódica

de las funciones de Bloch y las bandas [16]:

$$\left[ \frac{p^2}{2m_0} + V_0(\mathbf{r}) + H_{\text{SO}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} \right] u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\nu}(\mathbf{k}) u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (1.13)$$

De esta ecuación (con o sin el término  $H_{\text{SO}}$ ) se derivan los métodos conocidos como  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  [19, 22].

En ausencia de interacción espín-órbita, las funciones periódicas de Bloch, que llamamos  $u'_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , forman un conjunto completo para cualquier  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$  fijo [16]. Esto permite tomarlas como base en la cual expandir las funciones  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  desconocidas. Si se reemplaza  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  por su expansión en la ec. (1.13), es posible convertir esta última en un conjunto de ecuaciones acopladas que involucran los coeficientes de la expansión de  $u_{\nu\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  y los elementos de matriz del operador entre corchetes en la ec. (1.13), tomados todos ellos sobre funciones del conjunto  $\{u'_{\nu\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})\}$ , es decir, sobre funciones correspondientes a distintas bandas  $\nu$ . Este procedimiento permite, por una parte, sacar a la luz el acoplamiento generado por  $H_{\text{SO}}$  entre las distintas bandas; y, por otra, obtener formas aproximadas al problema de autovalores a través de la reducción del sistema de ecuaciones acoplado a otros que tengan en cuenta los acoplamientos entre bandas más importantes. Estas reducciones del problema dan lugar a los modelos de Kane [16, 22].

Al tratar semiconductores de estructura zincblenda, es usual realizar una aproximación adicional para reducir todavía más este sistema de ecuaciones acopladas. Esta consiste en considerar sólo los valores de  $\mathbf{k}$  alrededor de algún punto de importancia de la PZB, por ejemplo, el punto  $\Gamma$  en el que usualmente se ubica el *gap* fundamental. En este caso, los valores de  $\mathbf{k}$  satisfacen  $|\mathbf{k}| \ll 2\pi/a$ , con  $a$  la longitud característica de la red (la constante de red, por ejemplo) [16]. Bajo estas

hipótesis, es válido suponer:

$$E_\nu(\mathbf{k}) \approx E_\nu(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_\nu^*}. \quad (1.14)$$

El valor de la masa efectiva de la banda  $\nu$ ,  $m_\nu^*$ , puede obtenerse en términos de las constantes del problema y los elementos de matriz del operador (1.13), tomados, como mencionamos, sobre la base de funciones de Bloch para  $\mathbf{k}_0 = 0$  y en ausencia de  $H_{\text{SO}}$ ,  $\{u'_{\nu 0}(\mathbf{r})\}$ . La contribución más importante a  $m_\nu^*$  proviene del acoplamiento entre las bandas más próximas y, por tanto, en el caso propuesto, de la amplitud del *gap* [16]. Es importante mencionar aquí que tanto el valor del *gap* como el de los elementos de matriz de los operadores en la ec. (1.13) se obtienen buscando el mejor acuerdo entre el modelo y los datos experimentales, siempre que no sea posible inferirlos por medio de argumentos de simetría [16].

Uno de los modelos aproximados más simples, que captura la física fundamental [16], considera únicamente el acoplamiento entre la banda de conducción y las bandas de valencia más próximas a esta, conocidas como de *heavy-hole*, *light-hole* y *split-off*. La denominación de las dos primeras proviene de la magnitud del valor de la masa efectiva correspondiente a los estados cerca de sus respectivos máximos; mientras que el nombre de la segunda es debido a su menor energía respecto de las otras dos. Estas tres bandas de valencia surgen de la separación de las bandas de valencia originales (de tipo *p*) que provoca la interacción espín-órbita al acoplar el impulso angular orbital al espín de los portadores de carga. El Hamiltoniano resultante de este modelo de Kane particular puede expresarse en términos del impulso  $\mathbf{k}$  como una matriz de dimensión  $8 \times 8$  [16, 23].

Este modelo captura dos de las formas en que la interacción espín-órbita rompe la degeneración de espín de los estados de conducción en semiconductores de estructura

zincblenda, tanto en volumen (*bulk*) como en estructuras cuasibidimensionales. Estas dos formas son las conocidas como *interacción de Dresselhaus* [17] e *interacción de Rashba* [18]. La primera tiene su origen en la ausencia de un centro de inversión espacial en el potencial del cristal, es decir, en la asimetría de inversión en volumen (o BIA, por *bulk inversion asymmetry*), y siempre está presente en este tipo de semiconductores [16]. La segunda depende, en cambio, de la existencia de un campo eléctrico macro o mesoscópico efectivo, provisto externamente o generado por el potencial de confinamiento o por el potencial efectivo en las interfaces de heteroestructuras [16, 24]. La asimetría generada por este campo eléctrico macro o nanoscópico sugiere el nombre de *structural inversion asymmetry* (SIA) a esta particular ruptura de la degeneración de espín.

Los argumentos de simetría mencionados anteriormente son de capital importancia para el cálculo de los elementos de matriz del modelo que indican cómo la interacción espín-órbita rompe esta degeneración en cada caso. Utilizando teoría de grupos y la teoría de invariantes (ver ref. [25]) es posible obtener, para la banda de conducción, los Hamiltonianos de BIA (Dresselhaus) y SIA (Rashba) en sistemas cuasibidimensionales (cuya dirección de crecimiento se supone la [001]):

$$H_{\text{BIA}} = \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y) \quad (1.15)$$

$$H_{\text{SIA}} = \alpha(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) \quad (1.16)$$

donde  $\sigma_{x,y}$  son las conocidas matrices de Pauli. El término de Dresselhaus que surge del modelo de Kane contiene términos cúbicos en el impulso  $\mathbf{k}$ . A fin de obtener un Hamiltoniano lineal en  $\mathbf{k}$ , los factores de órdenes superiores en  $k_z$  suelen extraerse del Hamiltoniano como valores de expectación tomados sobre estados en la dirección de crecimiento y confinamiento (supuesta aquí la [001]) de la estructura

bidimensional [16, 26, 27]. El factor  $\beta$  resultante depende así del confinamiento en esta dirección, pero por lo demás es independiente de factores externos y queda determinado por las propiedades del semiconductor que conforma la estructura. El parámetro  $\alpha$ , en cambio, depende del campo eléctrico efectivo [16] y podría, hasta cierto punto, ser controlable externamente.

Los Hamiltonianos  $H_{\text{BIA}}$  y  $H_{\text{SIA}}$  especializados para anillos cuánticos serán los que utilizaremos en este trabajo.

### 1.2.3. Semiconductores magnéticos diluidos

Los semiconductores magnéticos diluidos (DMS) son aleaciones de elementos semiconductores de los grupos II-VI (por ejemplo, CdTe [28]), III-V (por ejemplo, GaAs [29]) u otros [13, 30], en las que se incluyen impurezas de un metal de transición en bajas densidades. Típicamente, estos metales pertenecen al cuarto periodo del grupo  $d$  (capa  $3d$  incompleta) y presentan propiedades magnéticas. El más ampliamente considerado, tanto en estudios teóricos como experimentales, es el Mn [15, 30], aunque otros como el Cr [30] o el Co [14] son también utilizados. La predominancia del Mn se debe a la ausencia de impulso orbital total en la  $3d$ , y al hecho de que su configuración de espín es un singlete en el *ground state* [31].

El interés en los DMS durante las últimas décadas tiene su origen en el descubrimiento de ordenamiento ferromagnético a temperaturas críticas elevadas en compuestos dopados con impurezas sustitutivas de Mn [31] (por ejemplo, el (In, Mn)As, cuyo ferromagnetismo fue descubierto por Munekata et. al. [32, 33]). La posibilidad de acercar esta temperatura a la ambiente permitiría obtener un material que combine propiedades de semiconductor y ferromagneto al mismo

tiempo [30]. La expectativa de que esto podría ser posible ha provocado un gran número de investigaciones sobre los DMS en los últimos años dada la aplicación tecnológica inmediata que estos materiales tendrían, especialmente en el área de espintrónica [14, 31].

Como área de investigación, la espintrónica es joven. Su origen se remonta al descubrimiento en la década del 80 de la interacción de intercambio en estructuras metálicas multicapa y del fenómeno conocido como *magnetoresistencia gigante*, en el que la conductividad eléctrica de las mismas está fuertemente ligada al estado de espín de los portadores de carga. [14, 34-36].

La posibilidad de controlar el espín de los electrones en un semiconductor que sea asimismo ferromagnético a temperatura ambiente, o en estructuras multicapa de este tipo, daría lugar, por tanto, a desarrollos de nuevos dispositivos: desde nuevas memorias no volátiles hasta mayor capacidad de procesamiento de datos con menor consumo energético [14]. La investigación en estos materiales, especialmente cuando el dopante es el Mn han ya generado contribuciones considerables en el área de espintrónica [13].

No obstante, la inclusión de impurezas magnéticas en las muestras no es aún totalmente controlable. Las complejidades en las etapas de crecimiento y preparación de las muestras [13] o en su manipulación posterior [14] redundan en resultados experimentales que muchas veces son controvertidos [13], y hasta en algunos casos contradictorios, como, por ejemplo, la observación de ferromagnetismo de altas temperatura crítica en algunos casos y su total ausencia en otros [14]. Estas complejidades inciden naturalmente no sólo en las propiedades magnéticas de las muestras resultantes, sino también en la comprensión teórica de las mismas [14]. Un problema de importancia en este sentido es la imposibilidad de predecir o

controlar la posición que adoptan las impurezas, tanto a nivel macroscópico (por ejemplo, es sabido que las impurezas pueden formar agrupamientos o *clusters* [14]), como a nivel de la celda unidad de la estructura cristalina del semiconductor de base. Es sabido que a nivel estructural las impurezas pueden adoptar posiciones intersticiales, pero también sustitutivas. Por ejemplo, en semiconductores II-VI, de estructura zincblenda, los Mn pueden sustituir los elementos del grupo II, o ubicarse entre ellos y los del grupo VI [13]. En estos materiales, la concentración de impurezas sustitutivas puede ser hasta cuatro veces más elevada que, por ejemplo, en los III-V [14] y normalmente constituyen centros neutros respecto de la red de base [31]. La sustitución de elementos del grupo II por Mn es posible debido a la contribución de la capa  $4s$  a la hibridización  $sp^3$  que forma los enlaces entre los elementos II-VI [12]. En algunos casos, la estructura del semiconductor  $A^{II}B^{VI}$  se mantiene en compuestos ternarios de la forma  $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$  en un amplio rango de concentraciones (por ejemplo,  $x \lesssim 0.77$  para el  $Zn_{1-x}Mn_xTe$ ), aunque la estructura teórica del compuesto binario formado únicamente por Mn y elementos del grupo VI pueda ser distinta [12]. No obstante, y en términos generales, la inclusión de impurezas en la celda modifica la estructura de bandas del semiconductor de base añadiendo estados debajo, en, o sobre el *gap* (directo en los II-VI) en el límite de alta dilución [12, 13]. Son estos DMS basados en semiconductores II-VI los más comprendidos y estudiados históricamente [12, 14], aunque algunos III-V como el (Ga, Mn)As han recibido mucha atención en los últimos años [13]. Por ello, en este trabajo optaremos por DMS ternarios de la forma  $A^{II}_{1-x}Mn_xB^{VI}$  cuando sea necesario.

Las importantes propiedades magnéticas de los DMS, que los diferencian de otros compuestos ternarios no magnéticos, es principalmente debida a la interacción

de intercambio entre portadores no localizados de conducción o valencia (tipo  $s$  o  $p$ , respectivamente [37]) y sus contrapartes localizadas en la capa  $d$  externa de la impureza [15]. En el modelo más simple posible, aplicable especialmente a los DMS II-VI con impurezas de manganeso, la interacción entre estos subsistemas de portadores localizados y no localizados es relativamente débil [15]. Esto permite considerarlos separadamente (es decir, portadores tipo  $s$  y  $p$ , y tipo  $d$ ) [12, 15], y modelar la interacción de los no localizados con los de la capa  $d$  como dependiente fundamentalmente del espín [15]. Esta interacción de intercambio  $s$ - $d$  o  $p$ - $d$  se suele escribir en la literatura partiendo de un Hamiltoniano de tipo Heisenberg [15]:

$$H = \sum_i J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}, \quad (1.17)$$

donde el índice  $i$  recorre las impurezas, ubicadas en  $\mathbf{R}_i$ , y  $J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  es un operador efectivo que depende de tanto de la posición de la impureza, supuesta fija, como del operador posición  $\mathbf{r}$  del portador de carga no localizado [12, 15].

El Hamiltoniano (1.17) suele simplificarse y llevarse a uno similar al de la interacción de Kondo [38]. Para ello, es usual tomar como hipótesis que las interacciones  $s$ - $d$  y  $p$ - $d$  actúan en escalas espaciales del orden de la celda unidad (debido a la localización de las impurezas y de los electrones en las capas  $d$ ), que son mucho menores que la longitud de onda característica del portador no localizado [12, 37]. A los fines prácticos, por tanto, la función de onda envolvente (ver §1.2.1) de este último puede suponerse constante en estas escalas. Es posible, por tanto, aproximar el operador  $J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  por un producto entre una constante efectiva  $J$  y un potencial de contacto  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i)$  [37]. De esta forma se obtiene el Hamiltoniano utilizado normalmente en la literatura:

$$H = J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i). \quad (1.18)$$



En DMS del tipo  $A^{\text{II}}_{1-x}\text{Mn}_x\text{B}^{\text{VI}}$  que consideraremos, el valor de la constante  $J$  es en gran medida independiente de la densidad de impurezas [12], y su valor está dado esencialmente por la competencia entre dos mecanismos que se observan en estos materiales. Estos dos mecanismos son conocidos como *potencial* y *cinético* [37]. El primero de ellos se halla siempre presente y decae con la distancia como el potencial coulombiano usual. El segundo, en cambio, proviene de la hibridización de los niveles  $3d^5$  con los portadores tipo  $s$  o  $p$  [12, 37]. En particular, para electrones cerca del mínimo de la banda de conducción, el mecanismo *potencial* predomina sobre el *cinético* en estructuras zincblenda [12].

En este trabajo utilizaremos el Hamiltoniano (1.18) para incluir la interacción de intercambio entre electrones de conducción e impurezas magnéticas en el anillo.



# Capítulo 2

## Anillo delgado

### 2.1. Presentación

Dedicaremos este capítulo a tratar en detalle la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para un electrón de conducción sujeto a las interacciones espín-órbita (SO) de Rashba y Dresselhaus bajo la aproximación de anillo delgado desarrollada por Meijer *et al.* [39].

Transitaremos la discusión en orden y comenzaremos por deducir un Hamiltoniano efectivo unidimensional en la §2.2. Posteriormente, plantearemos en §2.3 la ecuación de autovalores que le corresponde, y propondremos y desarrollaremos en §2.4 un procedimiento para obtener sus autoestados y autoenergías. Estudiaremos las propiedades generales de estos estados y observaremos cómo influye la presencia de las interacciones SO sobre los estados de conducción del electrón en muestras accesibles experimentalmente. Deduciremos formas aproximadas para estos estados y sus energías en estos casos en §2.5 y, finalmente, extenderemos en §2.6 el procedimiento propuesto a Hamiltonianos efectivos con interacciones SO lineales en el

impulso pero más generales.

### 2.2. Aproximación de anillo delgado

La aproximación de anillo delgado desarrollada por Meijer *et al.* [39] permite deducir un Hamiltoniano efectivo de una dimensión que describa la dinámica de baja energía de un electrón de conducción cuando la sección transversal del anillo es muy delgada respecto de su radio. El potencial que confina al electrón a la geometría anular determina la longitud característica de esta sección, y transforma al anillo en un pozo cuántico de gran profundidad en la dirección transversal [19]. En esta aproximación las energías asociadas al confinamiento se suponen mucho mayores que las asociadas al movimiento longitudinal; especialmente a las componentes acimutales de las interacciones espín-órbita lineales en  $\mathbf{k}$ ,  $H_{\text{BIA}}$  y  $H_{\text{SIA}}$ , dados respectivamente en las ecs. 1.15 y 1.16. Si a esta aproximación se añade el hecho de que el electrón se halla asimismo confinado en la dirección vertical, es posible reducir el Hamiltoniano total a sus componentes longitudinales y estudiar, así, la dinámica a lo largo del anillo separadamente. En otras palabras, es posible aproximar la función envolvente de ground state del electrón como un producto de «modos» verticales, transversales y longitudinales, y suponer que las interacciones (por ejemplo, las SO) sólo excitan modos longitudinales, pero no tienen energía suficiente para producir transiciones entre estados verticales o transversales. El Hamiltoniano en una dimensión resulta de tomar el valor de expectación sobre estos modos «fijos», y no depende, en el límite de alto confinamiento (límite unidimensional) de la forma funcional del potencial confinante. El detalle de la derivación de esta aproximación y los argumentos que la justifican se dan en el

artículo citado arriba.

La dinámica longitudinal efectiva es entonces descripta por el Hamiltoniano siguiente, que contiene solamente la energía cinética en esta dirección y las interacciones SO lineales en  $\mathbf{p} \doteq \hbar \mathbf{k}$ ,

$$H_\varphi = \left\langle \frac{p_\varphi^2}{2m^*} + H_{\text{SO}} \right\rangle_{R_0}. \quad (2.1)$$

Aquí,  $R_0(r)$  es el modo transversal de menor energía y  $p_\varphi$  es el impulso longitudinal, ambos expresados en un sistema de coordenadas cilíndricas  $(r, \varphi, z)$  centrado en el eje del anillo. El Hamiltoniano de SO consta de los términos de Rashba,  $\alpha(p_x\sigma_y - p_y\sigma_x)$ , y Dresselhaus,  $\beta(p_x\sigma_x - p_y\sigma_y)$ , y puede reescribirse convenientemente agrupando términos respecto de las coordenadas del impulso, como sigue

$$H_{\text{SO}} = \frac{p_x}{\hbar} (\alpha\sigma_y + \beta\sigma_x) + \frac{p_y}{\hbar} (-\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y) = \frac{p_x}{\hbar} \Sigma_x + \frac{p_y}{\hbar} \Sigma_y; \quad (2.2)$$

de forma que la acción conjunta de ambas interacciones quede expresada como una interacción SO más general y también lineal en el impulso. Este arreglo de términos será útil en la extensión a los resultados de esta sección que presentaremos en §2.6. En la última igualdad en la ec. (2.2) hemos definido implícitamente las matrices  $\Sigma_x \doteq \alpha\sigma_y + \beta\sigma_x$  y  $\Sigma_y \doteq -\alpha\sigma_x - \beta\sigma_y$ . Para expresar el Hamiltoniano  $H_{\text{SO}}$  en coordenadas cilíndricas, utilizamos el siguiente par de operadores  $p_\pm$ , que definimos en términos de los impulsos cartesianos como

$$p_\pm \doteq p_x \pm ip_y = e^{\pm i\varphi} (p_r \pm ip_\varphi). \quad (2.3)$$

Estas combinaciones particulares actúan sobre los autoestados de impulso angular orbital (OAM) axial  $L_z \doteq -i\hbar\partial_\varphi = rp_\varphi$  de forma similar a como lo hacen los operadores escalera  $L_\pm$ . Los autoestados de  $L_z$  que respetan la simetría del anillo

son las conocidas exponenciales trigonométricas  $e^{im\varphi}$  de frecuencia  $m$  entera. Así, a partir de (2.3) y reordenando términos nuevamente a fin de compactar la expresión,  $H_{\text{SO}}$  resulta

$$H_{\text{SO}} = \frac{p_+}{2\hbar}(\Sigma_x - i\Sigma_y) + \frac{p_-}{2\hbar}(\Sigma_x + i\Sigma_y). \quad (2.4)$$

Es importante notar que este operador es hermitiano, pues las matrices de Pauli lo son, y  $p_+ = p_-^\dagger$ . El valor de expectación (2.1) queda entonces determinado por las cantidades  $\langle p_r \rangle_{R_0}$ ,  $\langle p_\varphi \rangle_{R_0}$  y  $\langle p_\varphi^2 \rangle_{R_0}$ . Como mencionamos anteriormente, estos operadores no dependen de la forma funcional de  $R_0(r)$  y, por tanto, siempre toman los mismos valores, que son los siguientes

$$\begin{aligned} \langle p_r \rangle_{R_0} &= \frac{i\hbar}{2a}, \\ \langle p_\varphi \rangle_{R_0} &= -\frac{i\hbar}{a}\partial_\varphi = \frac{L_z}{a}, \\ \langle p_\varphi^2 \rangle_{R_0} &= -\frac{\hbar^2}{a^2}\partial_\varphi^2 = \frac{L_z^2}{a^2}. \end{aligned} \quad (2.5)$$

El Hamiltoniano efectivo se calcula entonces reemplazando cada operador por su valor de expectación donde corresponda en la expresión (2.1). No obstante, la forma resultante puede simplificarse todavía más si se expanden los factores  $e^{\pm i\varphi}$  provenientes de  $\langle p_\pm \rangle_{R_0}$  en funciones trigonométricas, y se reagrupan convenientemente algunos términos en un nuevo operador  $F(\varphi)$ , que definimos aquí como

$$F(\varphi) \doteq \frac{i}{a}(\Sigma_x \sin \varphi - \Sigma_y \cos \varphi). \quad (2.6)$$

Este operador es antihermitiano  $F(\varphi) = -F(\varphi)^\dagger$ , periódico en el anillo  $F(\varphi + 2\pi) = F(\varphi)$  y su cuadrado  $F^2(\varphi)$  es una función escalar (es decir, es proporcional al operador identidad en el espacio de espín). Esta última propiedad deriva de las relaciones de anticonmutación de las matrices de Pauli  $\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2\delta_{ij}$ . Las tres propiedades son fundamentales para sostener los argumentos que desarrollaremos

en las próximas secciones. Finalmente, la expresión del Hamiltoniano efectivo con la que trabajaremos es

$$H_\varphi = \frac{E_0}{\hbar^2} L_z^2 + \frac{i}{\hbar} F(\varphi) L_z + \frac{i}{2\hbar} (L_z F(\varphi)); \quad (2.7)$$

donde  $E_0 \doteq \hbar^2/2m^*a^2$  es una escala de energía cinética longitudinal, y  $(L_z F(\varphi))$  es una forma compacta de escribir  $-i\hbar \partial F(\varphi)/\partial \varphi$ . Así escrito, el Hamiltoniano explicita el acoplamiento efectivo entre el OAM axial y el de espín del electrón, ya que  $F(\varphi)$  depende de las constantes de Rashba y Dresselhaus únicamente.

## 2.3. Ecuación de Schrödinger

De acuerdo con las deducciones de la sección anterior, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo que determina los autoestados y las autoenergías del electrón en la aproximación de anillo delgado es

$$(H_\varphi - E)\Phi(\varphi) = 0. \quad (2.8)$$

El autoestado  $\Phi(\varphi)$  tiene estructura de espinor, es decir, puede escribirse como una combinación lineal de estados ortogonales de espín 1/2 cuyos coeficientes son funciones dependientes de la coordenada  $\varphi$ . Las formas funcionales de estas últimas no están restringidas más que por la condición necesaria de que sean univalueadas en el anillo (es decir, periódicas en  $2\pi$ ). Esta es la condición de contorno de la ecuación de autovalores (2.8).

Nuestro objetivo es resolver la ec. (2.8). Para ello, supondremos que el autoestado  $\Phi(\varphi)$  es separable en dos factores: uno común y escalar  $f(\varphi)$ , y otro  $\chi(\varphi)$  que le da su estructura de espinor. Tanto el primer factor como las componentes del

segundo toman valores en los complejos. Por el momento, no imponemos condiciones adicionales sobre cada factor individualmente, por lo que no perdemos generalidad al hacer esta factorización. Insertando la propuesta en la ecuación de autovalores y reordenando términos, obtenemos, finalmente

$$\left\{ \frac{E_0}{\hbar^2} L_z^2 f + \left( \frac{1}{\hbar} L_z f \right) \left[ \frac{2E_0}{\hbar} L_z + iF \right] + f \left[ \frac{E_0}{\hbar^2} L_z^2 + \frac{i}{\hbar} F L_z + \frac{i}{2\hbar} (L_z F) - E \right] \right\} \chi = 0. \quad (2.9)$$

Supondremos razonablemente que el espinor  $\chi(\varphi)$  no es idénticamente nulo, pues de lo contrario el autoestado propuesto sería la solución trivial. Buscamos desacoplar este sistema y tomaremos para ello  $\chi(\varphi)$  de entre las soluciones a la ecuación

$$\left[ \frac{2E_0}{\hbar} L_z + iF(\varphi) \right] \chi(\varphi) = 0. \quad (2.10)$$

Esta elección es en principio efectiva, pues anula el término proporcional a  $L_z f$  en la ec. (2.9) y transforma el corchete que multiplica a  $f(\varphi)$  en un operador proporcional a  $F^2(\varphi)$ , es decir,

$$\left[ \frac{E_0}{\hbar^2} L_z^2 + \frac{i}{\hbar} F L_z + \frac{i}{2\hbar} (L_z F) - E \right] \chi(\varphi) = \left[ \frac{1}{4E_0} F^2(\varphi) - E \right] \chi(\varphi). \quad (2.11)$$

El corchete entonces actúa sobre  $\chi(\varphi)$  multiplicándolo por una función escalar que no mezcla sus componentes, pues  $F^2(\varphi)$  es proporcional al operador identidad de espín. La ec. (2.9) toma entonces la forma

$$\left\{ \frac{E_0}{\hbar^2} (L_z^2 f) + f(\varphi) \left[ \frac{1}{4E_0} F^2(\varphi) - E \right] \right\} \chi(\varphi) = 0. \quad (2.12)$$

Puesto que  $\chi(\varphi)$  por hipótesis es no nulo, esta ecuación se satisface para todo punto  $\varphi$  en el anillo si la expresión entre llaves se anula idénticamente. Es aquí donde se evidencia la importancia de que  $F^2(\varphi)$  sea esencialmente una función



escalar, pues entonces el único factor matricial que aparece en (2.12) es el operador identidad, que es común a todos sus términos. Por esto, la condición de nulidad de la expresión entre llaves define la siguiente ecuación, que involucra solamente a la función  $f(\varphi)$  y desacopla finalmente el sistema:

$$E_0 \frac{\partial^2 f(\varphi)}{\partial \varphi^2} + f(\varphi) \left\{ \frac{1}{4E_0 a^2} [\alpha^2 + \beta^2 + 2\alpha\beta \sin(2\varphi)] + E \right\} = 0. \quad (2.13)$$

## 2.4. Diagonalización del Hamiltoniano efectivo

Si bien la elección (2.10) permite obtener dos ecuaciones independientes para cada factor de  $\Phi(\varphi)$ , no cualquier producto de soluciones  $f(\varphi)\chi(\varphi)$  será univariado en el anillo y conformará por tanto un autoestado. Es necesario entonces elegir soluciones a las ecs. (2.10) y (2.13) que permitan satisfacer esta condición. Para ordenar la discusión que sigue, trataremos cada una por separado y comenzaremos por la primera de ellas.

### 2.4.1. Factor espinor $\chi(\varphi)$

La ec. (2.10) puede reescribirse como sigue, si se reordenan las constantes multiplicativas apropiadamente:

$$i \frac{\partial \chi(\varphi)}{\partial \varphi} = \frac{i}{2E_0} F(\varphi) \chi(\varphi). \quad (2.14)$$

Escrita así, la ec. (2.10) se emparenta con la forma usual de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE) [40]. En efecto, el operador  $F(\varphi)$  es antihermitiano, por lo que el producto  $iF(\varphi)$  es hermitiano y puede entonces interpretarse como un Hamiltoniano. La analogía con la TDSE requiere interpretar adicionalmente la variable angular  $\varphi$  como un «tiempo». Esto es factible pues el intervalo de

definición de la ec. (2.10) es el de  $F(\varphi)$ , que no sólo cubre naturalmente el anillo, sino que también se extiende por periodicidad a toda la recta real. Por esto, es posible suponer que el espinor  $\chi(\varphi)$  está definido para todo valor de  $\varphi$  real, aun cuando baste con que esté definido en algún intervalo natural de la variable angular, como  $0 \leq \varphi < 2\pi$ , por ejemplo.

La ec. (2.10) puede tratarse entonces aplicando todo el bagaje teórico y práctico utilizado para tratar la TDSE. La forma general de las soluciones pueden construirse, por tanto, a partir de un operador unitario  $U(\varphi, 0)$ , análogo al operador de «evolución temporal» de la TDSE:

$$\chi(\varphi) = U(\varphi, 0)\chi(0). \quad (2.15)$$

El «Hamiltoniano» que genera la «evolución» en nuestro caso es  $iF(\varphi)/2E_0$ , y presenta dos propiedades importantes: por un lado, hereda la periodicidad de  $F(\varphi)$  y, por otro, satisface la relación de conmutación

$$[F(\varphi), F(\varphi')] = \frac{1}{a^2}(\alpha^2 - \beta^2) \sin(\varphi - \varphi'). \quad (2.16)$$

Esta última tiene como consecuencia la extrema dificultad (o llana imposibilidad) de hallar expresiones cerradas para el espinor  $\chi(\varphi)$  o el operador  $U(\varphi, 0)$  cuando  $|\alpha| \neq |\beta|$ . No obstante, existen al menos dos casos en los que el conmutador (2.16) no se anula idénticamente y aún así es posible hallar formas cerradas tanto para  $U(\varphi, 0)$  como para  $\chi(\varphi)$ . Estos son los casos puros de Rashba ( $\beta = 0$ ) y Dresselhaus ( $\alpha = 0$ ), en los que la aparición de una magnitud conservada (el impulso angular total  $J_z \doteq L_z + s_z$  en el primero, y  $L_z - s_z$  en el segundo) permite diagonalizar el Hamiltoniano efectivo  $H_\varphi$  por bloques de dimensión finita ( $2 \times 2$ ) [41, 42].

La periodicidad de  $F(\varphi)$  en el anillo convierte la ec. (2.14) en un problema de Floquet [43]. Como tal, esta ecuación admite un tipo particular de soluciones,

conocidas generalmente como *pseudoperiódicas*, que están definidas en el anillo (por ejemplo, en el intervalo  $0 \leq \varphi < 2\pi$ ) y se extienden a la recta real a través de la relación:

$$\chi(\varphi + 2\pi) = e^{2\pi i\mu} \chi(\varphi). \quad (2.17)$$

El factor  $e^{2\pi i\mu}$  y su exponente asociado  $i\mu$  son conocidos como *multiplicador* y *exponente de Floquet*, respectivamente. El valor de este último depende únicamente de las constantes físicas que determinan el «Hamiltoniano»  $iF(\varphi)/2E_0$  [43]. El operador  $U(\varphi, 0)$  también satisface una relación del tipo (2.17), pues el mismo constituye la solución fundamental a la ec. (2.14) [43]. Esta relación se expresa como:

$$U(\varphi + 2\pi, 0) = U(\varphi, 0)U(2\pi, 0). \quad (2.18)$$

Los espinores  $\chi(\varphi)$  que satisfacen (2.17) se construyen a partir de esta igualdad, diagonalizando el operador de un periodo  $U(2\pi, 0)$  y tomando sus autovectores como condiciones iniciales  $\chi(0)$  en la ec. (2.15) [43, 44]. En nuestro caso, esto puede hacerse independientemente de las constantes involucradas en el «Hamiltoniano», pues el operador  $U(2\pi, 0)$  es unitario y por tanto diagonalizable, por analogía con el operador de evolución temporal de la TDSE [40]. Los espinores  $\chi(\varphi)$  así contruidos son ortogonales en cada punto del anillo. Más aún, es posible mostrar que  $U(\varphi, 0)$  es un elemento del grupo  $SU(2)$  en todo el anillo, por lo que su acción punto a punto se corresponde físicamente con una rotación del espín del electrón (ver Apéndice A). La dirección que adopta el espín en cada punto del anillo es, en cierto modo, una dirección «de equilibrio» en relación a la acción simultánea de las interacciones de Rashba y Dresselhaus, que tienden a alienarlo en distintas direcciones cuando actúan individualmente. Esto puede intuirse de la relación que

guarda el espín del electrón con la magnitud conservada en cada caso: el impulso angular total  $L_z + s_z$  y la cantidad  $L_z - s_z$ , respectivamente.

Los autovectores de  $U(2\pi, 0)$  forman una base ortonormal de dimensión dos, pues representan estados de espín  $1/2$ , y sus autovalores, a los que llamaremos  $\rho_{\pm}$ , son todos de módulo unitario, es decir,  $|\rho_{\pm}| = 1$ . Estos últimos son los multiplicadores de Floquet de la ec. (2.14). Es posible mostrar que los autovalores  $\rho_{\pm}$  satisfacen además la relación  $\rho_+\rho_- = 1$ , es decir,  $\rho_+ = \rho_-^*$  (ver Apéndice A). Los exponentes de Floquet asociados son, por tanto, imaginarios puros. Sin perder generalidad, podemos entonces suponer que  $i\mu_+ = -i\mu_-$ , y definir, por comodidad,  $\mu \doteq \mu_+ \geq 0$ . La ec. (2.14) admite entonces soluciones periódicas en el anillo solamente si  $\mu$  es entero.

Utilizaremos el par de espinores pseudoperiódicos (2.17) para construir los autoestados  $\Phi(\varphi)$ , y los notaremos  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$ , explicitando su exponente de Floquet asociado.

### 2.4.2. Factor escalar $f(\varphi)$

La ec. (2.13) es un caso particular de la conocida y extensamente estudiada *Ecuación de Mathieu*. La forma canónica de esta ecuación es

$$\frac{\partial^2 f(\varphi)}{\partial \varphi^2} + [p - 2q \cos(2\varphi)]f(\varphi) = 0; \quad (2.19)$$

y se escribe en términos de dos parámetros adimensionales,  $p$  y  $q$ , cuyos valores pueden ser complejos en general [45-47]. En nuestro caso, estos son siempre reales pues provienen de efectuar las siguientes identificaciones:

$$p \doteq \frac{\alpha^2 + \beta^2}{4a^2 E_0^2} + \frac{E}{E_0}, \quad q \doteq \frac{\alpha\beta}{4a^2 E_0^2}. \quad (2.20)$$

El parámetro  $p$  es conocido como *autovalor* de la ecuación de Mathieu [45] y no está determinado *a priori*, pues depende explícitamente de la energía  $E$  asociada al autoestado  $\Phi(\varphi)$ . El valor de  $q$ , en cambio, queda completamente determinado por las constantes físicas del problema. Para valores reales de estos parámetros, la ecuación de Mathieu admite soluciones pseudoperiódicas [45], usualmente denominadas  $\text{me}_\nu(\varphi)$ , que se definen en el intervalo  $0 \leq \varphi \leq \pi$  y se extienden a la recta real a través de la relación

$$\text{me}_\nu(\varphi + \pi) = e^{i\nu\pi} \text{me}_\nu(\varphi). \quad (2.21)$$

El exponente de Floquet  $i\nu$  depende solamente de los parámetros  $p$  y  $q$ . Sin embargo, como  $p$  no está determinado aún, es posible suponer que es este último el que depende de  $\nu$  y  $q$ , es decir, que  $p \doteq p(\nu, q)$ . Esta forma de relacionar los tres parámetros será sumamente útil cuando busquemos satisfacer la condición de periodicidad de  $\Phi(\varphi)$  en el anillo. Es posible demostrar que dos soluciones del tipo (2.21), asociadas a distintos valores de  $p$ , son ortogonales en el intervalo  $0 \leq \varphi \leq \pi$  (y, por tanto, en el anillo) si sus valores de  $\nu$  asociados difieren en un número par. En otras palabras, dos soluciones (2.21) de distinta energía son ortogonales en el anillo. El conjunto formado por estas soluciones,  $\{\text{me}_{\nu+2m}(\varphi) : m \in \mathbb{Z}\}$ , constituye una base sobre la cual puede expandirse cualquier función suave que satisfaga (2.21) [45]. Adicionalmente, si se extiende el intervalo a uno que abarque todo el anillo, es posible extender asimismo las relaciones de ortogonalidad e incluir en el conjunto de funciones ortogonales a las  $\text{me}_{\nu+2m+1}(\varphi)$ , cuyos valores de  $\nu$  asociados difieren en un entero impar (ver Apéndice A).

Tomaremos, pues, la familia  $\{\text{me}_{\nu+m}(\varphi) : m \in \mathbb{Z}\}$  de soluciones a la ec. (2.13), extendidas al intervalo  $0 \leq \varphi < 2\pi$ , y las utilizaremos para construir los autoestados

$\Phi(\varphi)$ . Notaremos cada una de ellas como sigue, explicitando su normalización y exponente asociado:

$$f_{\nu+m}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{me}_{\nu+m} \left( \varphi + \frac{\pi}{4} \right). \quad (2.22)$$

El desplazamiento del argumento en  $\pi/4$  proviene de efectuar el cambio de variable que lleva el término proporcional a  $q$  en la ec. (2.13) a su forma canónica (2.19).

### 2.4.3. Construcción y propiedades de $\Phi(\varphi)$

A partir de las soluciones de Floquet para cada factor, es posible construir los autoestados  $\Phi(\varphi)$  y obtener sus autoenergías asociadas, traduciendo la condición de periodicidad a una condición sobre el exponente de Floquet del factor escalar. En términos precisos, la condición de contorno sobre un  $\Phi(\varphi)$  particular se escribe como

$$\begin{aligned} \Phi(\varphi + 2\pi) &= f_{\nu+m}(\varphi + 2\pi) \chi_{\pm\mu}(\varphi + 2\pi) \\ &= \left[ e^{2\pi i(\nu+m)} f_{\nu+m}(\varphi) \right] \left[ e^{\pm 2\pi i\mu} \chi_{\pm\mu}(\varphi) \right] \\ &= e^{2\pi i(\nu+m\pm\mu)} f_{\nu+m}(\varphi) \chi_{\pm\mu}(\varphi) = \Phi(\varphi); \end{aligned} \quad (2.23)$$

y se satisface si  $\nu \pm \mu$  es entero. Esta condición determina la parte fraccionaria de  $\nu$  en términos de las constantes físicas del problema, y permite obtener, junto con el valor de  $q$ , la autoenergía de  $\Phi(\varphi)$  a través la relación  $p \doteq p(\nu, q)$ . Escribimos, finalmente, estas autoenergías como los autovalores de la ecuación de Mathieu,  $E_{\mp\mu+m} = p(\mp\mu + m, q)$ , con  $m \in \mathbb{Z}$ , y los autoestados  $\Phi(\varphi)$  como

$$\Phi_{\pm\mu m}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{me}_{\mp\mu+m} \left( \varphi + \frac{\pi}{4} \right) \chi_{\pm\mu}(\varphi). \quad (2.24)$$

Los autoestados  $\Phi_{\pm\mu m}(\varphi)$  presentan dos propiedades importantes. Por una parte son, al menos, doblemente degenerados. Cuando  $\mu \neq 0$ , esta degeneración se ve a

partir de la igualdad  $p(\nu, q) = p(-\nu, q)$ , que satisfacen los autovalores de la ecuación de Mathieu [45]; mientras que, cuando  $\mu = 0$ , la existencia de degeneración se deduce del hecho de que cualquier combinación de espinores periódicos es otro espinor periódico, por lo que es posible construir dos autoestados ortogonales con el mismo factor escalar  $f_{\mp\mu+m}(\varphi)$  y, por tanto, con la misma energía. Podemos escribir estos pares de autoestados degenerados como

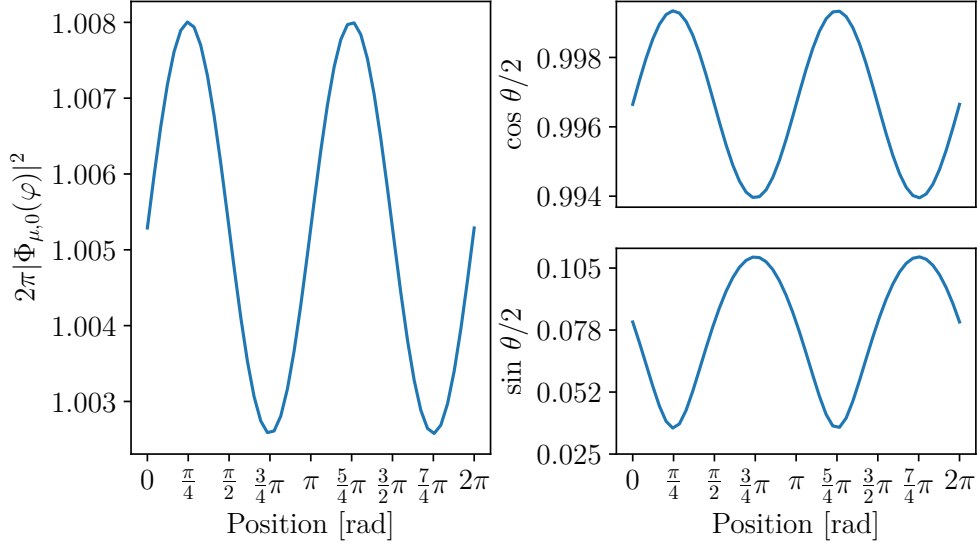
$$\begin{aligned} \mu = 0 : \quad & \{f_m(\varphi)\chi_+(\varphi), f_m(\varphi)\chi_-(\varphi)\} \\ \mu \neq 0 : \quad & \{f_{-(\mu+m)}(\varphi)\chi_{+\mu}(\varphi), f_{\mu+m}(\varphi)\chi_{-\mu}(\varphi)\}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

En ambos casos, esta doble degeneración es la conocida *degeneración de Kramers*, y su razón física es la invariancia del Hamiltoniano efectivo  $H_\varphi$  ante la operación de *inversión temporal* [42], que invierte simultáneamente la dirección del impulso lineal y la orientación del espín del electrón [40], es decir,  $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$  y  $\mathbf{s} \mapsto -\mathbf{s}$ . La inversión del impulso lineal se traduce en la inversión del impulso angular orbital,  $\mathbf{L}$ , pero no afecta en modo alguno a la energía cinética, que es cuadrática en  $\mathbf{p}$ . En consecuencia, todos los términos de  $H_\varphi$  permanecen invariantes al aplicar estas operaciones (ver Apéndice A). Los estados agrupados en un mismo par (2.25) están por tanto vinculados entre sí a través de la operación de inversión temporal, es decir, uno de ellos puede obtenerse invirtiendo el otro, a menos de un factor constante y global de fase. Ambas orientaciones  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  son, por tanto, equivalentes para la dinámica generada por  $H_\varphi$ .

Por otra parte, los autoestados  $\Phi_{\pm\mu m}(\varphi)$  dan origen a una densidad de probabilidad en el espacio que depende exclusivamente del factor escalar, ya que los espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  son ortonormales punto a punto; es decir,

$$\Phi_{\pm\mu m}^\dagger(\varphi) \cdot \Phi_{\pm\mu m}(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \left| \text{me}_{\mp\mu+m} \left( \varphi + \frac{\pi}{4} \right) \right|^2 \quad (2.26)$$

Sin embargo, estos últimos intervienen en la densidad a través de su exponente de Floquet característico  $\mu$ . Finalmente, puesto que el factor escalar  $\text{me}_{\mp\mu+m}(\varphi)$  satisface una relación del tipo (2.21), la densidad de probabilidad es periódica en  $\pi$  y por tanto en el anillo, independientemente del valor de  $\mu$ .



**Figura 2.1:** Izquierda: densidad de probabilidad relativa a la uniforme para el *ground state*  $\Phi_{\mu 0}(\varphi)$  de un anillo delgado de InSb y radio característico  $a = 20$  nm. Derecha: componentes en cada punto del anillo del espín  $\chi_{\mu}(\varphi)$  en la base de autoestados de  $s_z$ , expresados en términos del ángulo cenital de Bloch  $\theta$ . Aquí,  $\alpha = 2\beta = 20$  meV nm. Notemos que la densidad no se aparta notoriamente de  $1/2\pi$ , y que la inclinación del espín respecto del eje del anillo es pequeña.

A modo de ejemplo, consideremos un anillo delgado de InSb ( $m^* = 0.014 m_e$  [48]) y radio característico  $a = 20$  nm. Supongamos asimismo que el electrón está confinado por un potencial radial parabólico de intensidad  $\hbar\omega = 30$  meV, cuyo modo radial de menor energía presenta un perfil gaussiano [39, 49].

Para uno de los autoestados de menor energía,  $\Phi_{\mu 0}(\varphi)$ , graficamos en la Fig. 2.1 las componentes del espín  $\chi_{\mu}(\varphi)$  en la base de autoestados de  $s_z$  y en función del



ángulo cenital de Bloch [40]; y la densidad de probabilidad relativa a la uniforme en cada punto del anillo. Como vemos, la densidad de probabilidad es prácticamente constante a lo largo del anillo, y no se aparta significativamente de la uniforme  $1/2\pi$ ; y el espín del electrón en este estado parece estar orientado casi sobre el eje del anillo. Para parámetros alcanzables experimentalmente, este ejemplo parece indicar que las interacciones espín-órbita no modifican sustancialmente los autoestados de la banda de conducción sin ellas. En otras palabras, los autoestados  $\Phi_{\pm\mu 0}(\varphi)$  no se apartan demasiado de un autoestado de  $L_z$  y  $s_z$ . Veremos en la sección que sigue que esta observación es válida con cierta generalidad, y no sólo para los autoestados de baja energía. Siendo entonces característico de las configuraciones experimentales del problema, este aspecto permite calcular algunas magnitudes físicas de interés (como la energía y los valores de expectación impulsos angulares de orbital y de espín) en función de las constantes de acoplamiento, a través de aproximaciones sobre las funciones de Mathieu y los espinores  $\chi_{\pm\mu}(0)$ . Describiremos dos de estas aproximaciones en la sección siguiente.

## 2.5. Tratamiento perturbativo de las soluciones

Dividiremos la discusión en dos partes, a fin de centrarnos, como antes, en cada factor separadamente.

Comenzamos por los espinores  $\chi_{\pm\mu}(0)$  pues, como vimos,  $\mu$  es el parámetro que determina las energías del sistema. Cuando dedujimos las propiedades de estas soluciones en la §2.4, observamos la dificultad que presentaba el cálculo de las mismas en algunos casos y notamos que esto derivaba de la analogía establecida entre la ec. (2.14) y la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo y de la

relación de conmutación (2.16). Uno de los métodos existentes para lidiar con esta dificultad de la TDSE es la propuesta de Magnus [50], que consiste en suponer la existencia de un operador  $\Omega(\varphi)$  cuya exponencial es el operador  $U(\varphi, 0)$ ; esto es,

$$U(\varphi, 0) = \exp \Omega(\varphi). \quad (2.27)$$

El operador  $\Omega(\varphi)$  se expresa usualmente como una serie de términos cuyos órdenes son dados por un parámetro de control apropiadamente definido. Esta expansión es útil en casos como el nuestro, en los que, como veremos, es posible hallar un parámetro de este tipo, pero impone una condición de convergencia adicional que debe cumplirse para garantizar su validez [50, 51]. En nuestro caso, dos parámetros de control naturales son las constantes adimensionales que sugiere la ecuación (también adimensional) (2.14):

$$\bar{\alpha} \doteq \frac{\alpha}{2aE_0}, \quad \bar{\beta} \doteq \frac{\beta}{2aE_0}. \quad (2.28)$$

Para valores experimentales de las constantes físicas, estos cocientes entre las escalas de energía de las interacciones espín-órbita,  $\alpha/a$  y  $\beta/a$ , y de la banda libre,  $E_0$ , son pequeños. La tabla 2.1 muestra algunos valores para semiconductores típicamente utilizados en geometrías de una y dos dimensiones como la nuestra. Para estos valores de  $\bar{\alpha}$  y  $\bar{\beta}$  es posible mostrar que la expansión de Magnus es convergente (ver Apéndice A).

Consideramos entonces la propuesta de Magnus y, siguiendo el procedimiento de Blanes *et al.* [50], expandimos el operador  $\Omega(\varphi)$  a tercer orden en  $\bar{\alpha}$  y  $\bar{\beta}$  como sigue:

$$\Omega(\varphi) \approx -i\mathbf{n}(\varphi) \cdot \boldsymbol{\sigma} + i\Omega_0\varphi. \quad (2.29)$$

En esta expresión,  $\mathbf{n}(\varphi)$  es un vector periódico en  $2\pi$  de componentes  $n_x = \bar{\beta}(\cos \varphi - 1) - \bar{\alpha} \sin \varphi$ ,  $n_y = \bar{\alpha}(\cos \varphi - 1) - \bar{\beta} \sin \varphi$ , y  $n_z = (\bar{\alpha}^2 - \bar{\beta}^2) \sin \varphi$ ; y  $\Omega_0$  es

Material	$m^*/m_e$	Acop. [meV nm]	Acop. adim.	Refs.
GaAs	0.067	3	0.053	[52, 53]
InSb	0.014	20	0.073	[48, 54, 55]
InAs	0.023	30	0.181	[52, 56]
GaN	0.130	1	0.034	[57]
ZnO	0.186	0.115	0.056	[58]

**Tabla 2.1:** Intensidades de acoplamiento espín-órbita lineales en el impulso alcanzables experimentalmente para algunos semiconductores de estructura ZincBlenda y Wurtzita en geometrías de una (*Quantum Wires*) y dos (*Quantum Rings*) dimensiones [59]. En esta tabla no distinguimos el tipo de acoplamiento, si de Rashba o de Dresselhaus, ya que nos interesa mostrar valores realistas para las constantes de acoplamiento espín-órbita. Mostramos estos valores en la columna Acop., y los adimensionalizamos en Acop. adim. siguiendo la forma en la ec. (2.28). El lector interesado puede consultar las referencias citadas para cada material.

un operador independiente de  $\varphi$ , definido como

$$\Omega_0 \doteq (\bar{\alpha}^2 - \bar{\beta}^2)(2\bar{\alpha}\sigma_x - 2\bar{\beta}\sigma_y + \sigma_z). \quad (2.30)$$

La aproximación (2.29) satisface las dos propiedades principales requeridas por  $U(\varphi, 0)$ : es antihermitiana, pues sus términos lo son; y cumple  $\Omega(0) = 0$ . Su exponencial es entonces unitaria en todo punto, e igual a la identidad en el origen. Los dos términos de (2.29) no conmutan entre sí, por lo que la exponencial de  $\Omega(\varphi)$  no es factorizable como producto de las exponenciales de cada uno de ellos [60]. Sin embargo, este conmutador es de cuarto orden en los parámetros de control  $\bar{\alpha}$  y  $\bar{\beta}$ , pues es expresable como suma de conmutadores entre matrices de Pauli de los cuales estos parámetros se extraen como factores comunes. Supondremos que estos conmutadores (y cualquier otro de mayor orden) sólo introducen correcciones pequeñas a la factorización de  $\exp \Omega(\varphi)$ , y aproximaremos este operador como

$$U(\varphi, 0) \approx \exp(-i\mathbf{n}(\varphi) \cdot \boldsymbol{\sigma}) \exp(i\Omega_0\varphi). \quad (2.31)$$

Aquí se evidencia la utilidad de agrupar los términos periódicos en  $2\pi$  en un vector  $\mathbf{n}(\varphi)$  y separarlos de los lineales: al orden propuesto, el operador  $U(\varphi, 0)$  satisface la relación de pseudoperiodicidad (2.18). Los multiplicadores de Floquet de los espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  son entonces los autovalores de  $\exp(2\pi i\Omega_0)$ , y sus exponentes asociados son imaginarios puros, pues provienen del operador hermitiano  $\Omega_0$ .

Los autovalores y autovectores del operador  $\Omega_0$  permiten entonces obtener aproximaciones a los espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  y a  $\mu$  en términos de los parámetros de control. Al orden más bajo, la aproximación a  $\mu$  resulta:

$$\mu \approx \bar{\alpha}^2 - \bar{\beta}^2. \quad (2.32)$$

Notemos que la misma se anula únicamente si  $|\alpha| = |\beta|$ , por lo que sólo en este caso se tendrán espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  periódicos en el anillo. Notablemente, cuando se da esta igualdad, se anula el conmutador (2.16). La ecuación (2.14) es integrable manualmente en este caso, y los espinores pueden calcularse exactamente. La razón física detrás de esta particularidad es la aparición de una magnitud conservada que determina una orientación de equilibrio que el espín mantiene a lo largo del anillo [61]. En todos los demás casos, como mencionamos anteriormente, el espín adopta distintas orientaciones en cada punto del anillo [62].

Por otra parte, la forma aproximada de los espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$  se construye aplicando el operador (2.31) a los autovectores de  $\Omega_0$ , que son estos espinores evaluados en el origen, es decir,  $\chi_{\pm\mu}(0)$ . Como cualquier espinor de espín 1/2, estos últimos pueden describirse geométricamente sobre la esfera de Bloch a través de un ángulo cenital  $\theta_{\pm}$ , que describe la inclinación del espinor respecto de la proyección pura  $+1/2$  de  $s_z$ , y otro acimutal  $\phi_{\pm}$ , que describe la fase relativa entre las componentes del espinor [60]. Estos ángulos, al orden más bajo, dependen de

los parámetros de control como sigue

$$\tan \frac{\theta_{\pm}}{2} = \left( \bar{\alpha}^2 + \bar{\beta}^2 \right)^{\pm 1/2}, \quad \tan \phi_{\pm} = -\frac{\bar{\beta}}{\bar{\alpha}}. \quad (2.33)$$

De aquí se deduce de inmediato que los espinores ortonormales de la banda libre ( $\bar{\alpha} = \bar{\beta} = 0$ ) son los mismos autoestados de  $s_z$ , como sugiere el término de orden cuadrático en  $\Omega_0$ . La fase relativa  $\phi_{\pm}$ , por su parte, es la misma para ambos espinores  $\chi_{\pm\mu}(\varphi)$ , y tiende a valores consistentes con los esperados en los límites de Rashba puro ( $\bar{\beta} = 0$ ) y Dresselhaus puro ( $\bar{\alpha} = 0$ ) [41, 42].

Seguimos con el factor escalar. Aquí la discusión se bifurca y se presentan dos tratamientos independientes, uno para las funciones de Mathieu periódicas ( $\mu = 0$ ) y otro para las pseudoperiódicas ( $\mu \neq 0$ ) [45]. Puesto que, como vimos arriba, los espinores en el caso periódico pueden calcularse manualmente, nos dedicaremos aquí a tratar solamente los casos no periódicos.

Las funciones de Mathieu de orden no entero (esto es, no periódicas) que intervienen en nuestro problema pueden expandirse en serie de Fourier como sigue

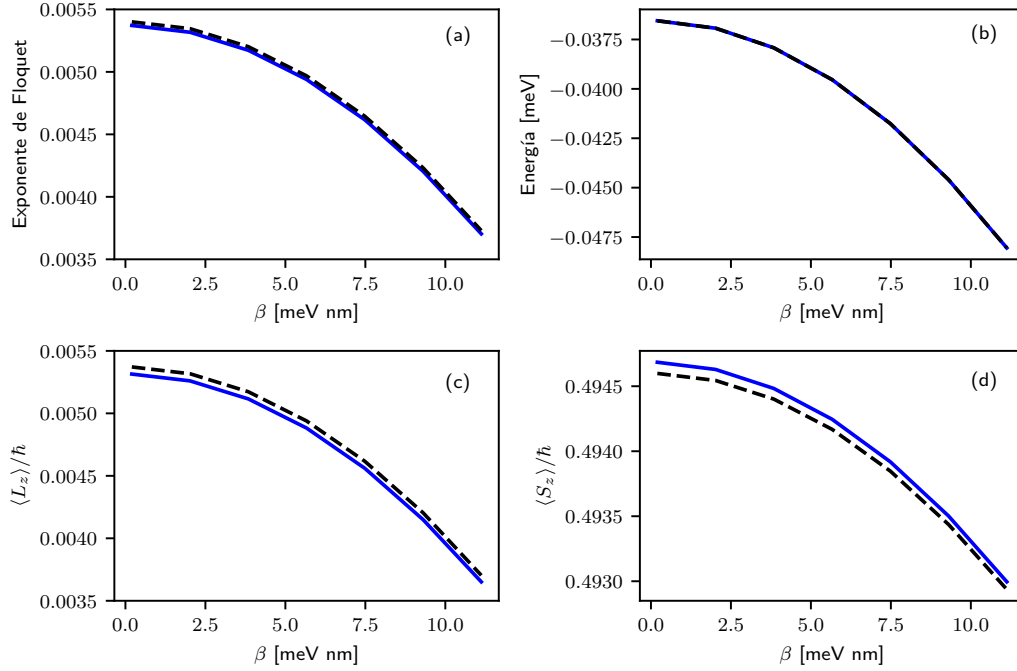
$$\text{me}_{\mp\mu+m} \left( \varphi + \frac{\pi}{4} \right) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_{2n} e^{i(\mp\mu+m+2n)(\varphi+\pi/4)}. \quad (2.34)$$

Los coeficientes  $c_{2n}$  pueden definirse en relación con  $c_0$ , y tanto este último como los primeros quedan finalmente determinados por la condición de normalización. Cuando  $\mu$  y el parámetro  $q$  de la función de Mathieu toman valores pequeños, el comportamiento asintótico hacia valores pequeños de los cocientes  $c_{2n}/c_0$  es describable en términos de estos dos parámetros y del entero  $m$  [45]. Esta relación puede expresarse de forma reducida, explicitando el factor que contribuye mayormente a la misma, como

$$\frac{c_{2n}}{c_0} \sim \frac{q^{|n|}}{\mu + m + n}, \quad (n \neq 0). \quad (2.35)$$

Notemos que  $q \rightarrow 0$  en nuestro caso, pues, de acuerdo a la definición que adoptamos en (2.20), este parámetro es exactamente el producto de los parámetros de control, es decir,  $q = \bar{\alpha}\bar{\beta}$ . Al depender de  $m$ , el miembro derecho de la relación (2.35) depende del estado considerado. Por ejemplo, de si se trata del *ground state* o de un estado excitado, que en general corresponden a  $m = 0$  y  $m \neq 0$ , respectivamente. Cuando se trata de  $m = 0$ , todos los coeficientes son pequeños pues el miembro derecho va como  $q^n/n$ , y, por esto, considerar solamente el término de frecuencia nula (proporcional a  $c_0$ ) de la serie de Fourier es suficiente para obtener una buena aproximación al factor escalar. La situación es distinta para  $m \neq 0$  (en general, los excitados en este límite), pues el coeficiente  $c_{-2m}$ , correspondiente a  $n = -m$ , se comporta como  $q^m/\mu$  y bien puede no ser pequeño. Sin embargo, un estudio numérico permite mostrar que, cuando los parámetros de control toman los valores experimentales dados en la tabla 2.1 y si se supone que  $|q| < |\mu|$ , basta con considerar los primeros tres términos de menor frecuencia para obtener buenas aproximaciones a cualquier estado excitado. Entendemos que una aproximación es buena si es útil para calcular otras que aproximen con más o menos buena precisión la dependencia respecto de los parámetros de control de cantidades físicas de interés como la energía y las proyecciones  $L_z$  y  $s_z$  de los impulsos angulares.

Por todo lo anterior, consideramos estas aproximaciones para cada factor del autoestado  $\Phi_{\pm\mu m}(\varphi)$  y calculamos sobre el mismo los valores de expectación de su energía asociada y de los operadores  $L_z$  y  $s_z$ . Suponiendo  $|q| < |\mu|$ , obtenemos, al



**Figura 2.2:** Exponente  $\mu$ , energía y valores de expectación de las proyecciones  $L_z$  y  $s_z$  de los impulsos angulares orbital y de espín, en función del acoplamiento de Dresselhaus ( $\beta$ ) para el *ground state*  $\Phi_{+\mu 0}(\varphi)$  del electrón en un anillo delgado de InSb y radio característico  $a = 20$  nm. La intensidad del acoplamiento de Rashba está fijado en  $\alpha = 20$  meV nm. Las líneas continuas corresponden a los datos obtenidos numéricamente, y las de guiones a los computados a través de las fórmulas (2.32) y (2.36—2.38). En todos los casos, el rango de  $\bar{\beta}$  garantiza el cumplimiento de la condición  $\bar{\alpha}\bar{\beta} < |\bar{\alpha}^2 - \bar{\beta}^2|$ .

orden más bajo en  $\bar{\alpha}$  y  $\bar{\beta}$ ,

$$E_{\pm\mu m} = E_0 \left[ (m \mp \mu)^2 - (\bar{\alpha}^2 + \bar{\beta}^2) + \frac{(\bar{\alpha}\bar{\beta})^2}{2[(m \mp \mu)^2 - 1]} \right], \quad (2.36)$$

$$\langle L_z \rangle_{\pm\mu m} = \pm \hbar \left[ \mu \pm m \mp \frac{(m \mp \mu)(\bar{\alpha}\bar{\beta})^2}{2[1 - (m \mp \mu)^2]^2} \right], \quad (2.37)$$

$$\langle s_z \rangle_{\pm\mu m} = \pm \hbar \left[ \frac{1}{2} - (\bar{\alpha}^2 + \bar{\beta}^2) + \frac{(\bar{\alpha}\bar{\beta})^2}{1 - (m \mp \mu)^2} \right]. \quad (2.38)$$

Notemos que las aproximaciones a  $L_z$  y  $s_z$  respetan las conservaciones del impulso angular total  $J_z = L_z + s_z$  y de la cantidad  $L_z - s_z$  en los casos de Rashba ( $\beta = 0$ )

y Dresselhaus ( $\alpha = 0$ ), respectivamente. En otras palabras, cuando  $\bar{\beta} = 0$ , el valor de expectación  $\langle J_z \rangle_{\pm\mu m}$  no depende de  $\bar{\alpha}$ , y, de forma similar, cuando  $\bar{\alpha} = 0$ , la cantidad  $\langle L_z - s_z \rangle_{\pm\mu m}$  no depende de  $\bar{\beta}$ .

Finalmente, aplicamos estas aproximaciones al caso realista mencionado en §2.4.3 y consideramos el electrón en el *ground state*  $\Phi_{+\mu 0}(\varphi)$  de un anillo delgado de InSb y radio característico  $a = 20$  nm. Fijamos la intensidad de la interacción de Rashba en  $\alpha = 20$  meV nm y consideramos un rango de valores de  $\beta$ , para los cuales calculamos numéricamente los valores de expectación mencionados y los comparamos con nuestras aproximaciones (2.36), (2.37) y (2.38). Presentamos estos resultados en la Fig. 2.2.

## 2.6. Extensión del Hamiltoniano efectivo

En la §2.3 propusimos la factorización del autoestado  $\Phi$  en un factor escalar y otro espinor. La viabilidad de esta separación estaba fundada esencialmente en el hecho de que el cuadrado del operador  $F(\varphi)$ ,  $F^2(\varphi)$ , resultaba proporcional al operador identidad en el espacio de espín. Esta propiedad permitía desvincular la ec. (2.12) del factor espinor y llevarla a un caso particular de la ecuación de Mathieu. Veremos en esta sección que esta propiedad no se modifica si se extiende el Hamiltoniano de espín-órbita (2.2) a una forma más general.

El operador  $F(\varphi)$  está definido a partir de las matrices  $\Sigma_x$  y  $\Sigma_y$ , que son combinaciones lineales de las matrices de Pauli  $\sigma_i$  cuyos coeficientes reales corresponden a los acoplamientos espín-órbita introducidos por  $H_{\text{SO}}$ . Las propiedades de  $F(\varphi)$  que observamos oportunamente no dependen de la forma particular de estas combinaciones, siempre que los coeficientes que intervienen en ellas sean reales. En otras



palabras,  $\Sigma_x$  y  $\Sigma_y$  bien podrían ser combinaciones lineales arbitrarias sin que por ello sea necesario modificar los argumentos esgrimidos para desacoplar la ecuación de Schrödinger (2.8) como hicimos en §2.3.

A partir de esta observación, podemos suponer que el Hamiltoniano  $H_{\text{SO}}$  es más general y consta de términos de la forma  $\alpha_{ij}p_i\sigma_j$ , con  $\alpha_{ij}$  constante y real, indexados por  $i = x, y$  y  $j = x, y, z$ . Un Hamiltoniano de este tipo aparece al considerar, por ejemplo, la influencia de esfuerzos de corte (*strain*) en el cristal [63, 64]. Es importante notar que esta generalización desestima explícitamente términos proporcionales a  $p_z$ , por lo que, en principio, la misma no invalida las hipótesis consideradas sobre la geometría del anillo. La forma final de  $H_{\text{SO}}$  es reducible a la ya deducida (2.2), pero con las definiciones

$$\begin{aligned}\Sigma_x &\doteq \alpha_{xx}\sigma_x + \alpha_{xy}\sigma_y + \alpha_{xz}\sigma_z, \\ \Sigma_y &\doteq \alpha_{yx}\sigma_x + \alpha_{yy}\sigma_y + \alpha_{yz}\sigma_z.\end{aligned}\tag{2.39}$$

Puesto que, como observamos, los valores particulares de las constantes  $\alpha_{ij}$  no intervienen en las propiedades de  $F(\varphi)$ , la ecuación (2.14) que rige el factor espinor y las propiedades de sus soluciones no se ven alteradas, pero sí se modifica la ecuación para el factor escalar para hacer lugar a estos cambios en  $\Sigma_x$  y  $\Sigma_y$ . Esta última resulta ahora:

$$E_0 \frac{\partial^2 f(\varphi)}{\partial \varphi^2} + \left( \frac{1}{8a^2 E_0} [\Sigma_x^2 + \Sigma_y^2 - |Q| \cos(2\varphi + \varphi_Q + \pi)] + E \right) f(\varphi) = 0. \tag{2.40}$$

Aquí,  $Q \doteq (i\Sigma_x + \Sigma_y)^2$  y es proporcional al operador identidad,  $|Q|$  es el módulo y  $\varphi_Q = \text{Arg } Q$  el argumento principal del factor escalar que multiplica a este operador. Los autoestados del Hamiltoniano efectivo  $H_\varphi$  son similares, en su estructura, a los deducidos en la §2.4, y se escriben como

$$\Phi_{\pm\mu m}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \text{me}_{\mp\mu+m} \left( \varphi + \frac{\varphi_Q}{2} + \frac{\pi}{2} \right) \chi_{\pm\mu}(\varphi). \tag{2.41}$$

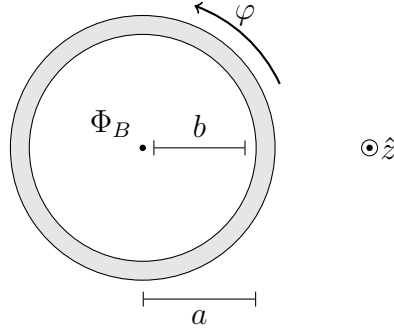
Finalmente, el exponente  $\mu$  depende ahora de todas las  $\alpha_{ij}$  de forma no trivial. Es probable, por tanto, que existan interacciones de tipo espín-órbita que, aun siendo físicamente diferentes, conduzcan a autoestados similares.

## 2.7. Ruptura de la simetría de inversión temporal

La presencia de un campo magnético (externo) en la región interior al anillo rompe la simetría de inversión temporal y la degeneración asociada a la misma. Esta ruptura se manifiesta en la forma funcional de los autoestados a través de la modificación que el flujo magnético introduce en los exponentes de Floquet de los factores  $\chi(\varphi)$ . Este efecto de origen topológico es conocido como *efecto Aharonov-Bohm* [65], y surge, en geometrías como la nuestra, por la sola presencia de flujo magnético en la región interna delimitada por el anillo. La ruptura de esta degeneración es, entonces, cualitativamente distinta a la que podría surgir por interacción dipolar directa entre el espín del electrón y un campo magnético externo (por ejemplo, de tipo Zeeman). En lo que sigue, analizaremos este efecto para una configuración tratable manualmente y comenzaremos desde un Hamiltoniano total y similar al propuesto en [39]:

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(r) + \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\Sigma}, \quad (2.42)$$

donde  $V(r)$  es el potencial de confinamiento del anillo y  $\vec{\Sigma}$  es un «vector» general de combinaciones lineales de matrices de Pauli, cuyas componentes son de la forma (2.39).



**Figura 2.3:** Esquema del anillo delgado y de la zona donde existe flujo magnético.

Incluimos el efecto del campo magnético al Hamiltoniano del anillo suponiendo que el mismo es nulo sobre el semiconductor (esto es, en la región  $|\mathbf{r}| > b$ ; ver Fig. 2.3) y constante y axial sobre la región complementaria. Adoptamos, además, el *gauge* de Coulomb para el potencial vector asociado  $\mathbf{A}$ ,  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , y lo escribimos en términos del flujo magnético  $\Phi_B$  sobre la región interna  $|\mathbf{r}| \leq b$ , como

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_\varphi(r)\hat{\varphi} = \frac{\Phi_B}{2\pi r}\hat{\varphi} \begin{cases} \left(\frac{r}{b}\right)^2 & r \leq b \\ 1 & r > b. \end{cases} \quad (2.43)$$

Notemos que el campo magnético es nulo sobre el anillo, pues  $\nabla \times \mathbf{A} = 0$  en la región  $r > b$ .

Para deducir el nuevo Hamiltoniano efectivo en presencia del campo  $\mathbf{A}$ , basta con expandir el Hamiltoniano original completo y observar qué términos están presentes en este nuevo caso y ausentes en el anterior. Puesto que la inclusión de  $\mathbf{A}$  en el Hamiltoniano se realiza a través del cambio  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}$ , las partes cinética y

potencial,  $H_0$ , y de espín-órbita,  $H_{SO}$ , resultan, respectivamente:

$$H_0 = \frac{1}{2m^*}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(r) \quad (2.44)$$

$$= \left[ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_r^2 + V(r) \right] + \frac{1}{2m^*} p_\varphi^2 + \frac{1}{2m^*} [e\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} - 2e\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + e^2 A^2]$$

$$H_{SO} = \frac{1}{\hbar}(\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot \vec{\Sigma} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{\Sigma} - \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \vec{\Sigma} \quad (2.45)$$

El Hamiltoniano total en presencia de campo se construye, entonces, añadiendo al original un Hamiltoniano dependiente del potencial vector. Los términos de este último introducen nuevas dependencias con las coordenadas, que, naturalmente, vendrán dadas por la estructura de  $\mathbf{A}$ . En el caso analizado aquí, estas dependencias son sólo radiales y los términos añadidos se comportan sobre el anillo de forma similar a la componente  $p_\varphi$  del impulso. Es razonable suponer que aún en este caso se sostiene la hipótesis de Meijer *et al.* que permite separar la función de onda total en modos radiales y acimutales. Finalmente, el nuevo Hamiltoniano efectivo resulta de añadir al Hamiltoniano original los valores de expectación de los términos nuevos, dependientes todos ellos de  $\mathbf{A}$ , tomados sobre el modo radial de menor energía. Así, obtenemos:

$$\tilde{H}_\varphi = -E_0 \partial_\varphi^2 + \left[ F(\varphi) + i \frac{\Phi_B}{\Phi_0} E_0 \right] \partial_\varphi + \frac{1}{2} (\partial_\varphi F) - i \frac{\Phi_B}{2\Phi_0} F(\varphi) + E_0 \left( \frac{\Phi_B}{2\Phi_0} \right)^2, \quad (2.46)$$

donde llamamos  $\Phi_0 \doteq h/2e$  al cuanto de flujo magnético.

El tratamiento de la ecuación de autovalores de Schrödinger para este nuevo Hamiltoniano sigue los pasos ya utilizados en el caso sin campo. En efecto, podemos suponer, como antes, que cada nuevo autoestado puede expresarse como el producto entre una amplitud global y un espinor  $\tilde{\chi}(\varphi)$ , y elegir este último de entre las soluciones de la ecuación

$$\frac{\partial \tilde{\chi}(\varphi)}{\partial \varphi} = \frac{1}{2E_0} \left[ F(\varphi) + i \frac{\Phi_B}{\Phi_0} E_0 \right] \tilde{\chi}(\varphi) \doteq \frac{1}{2E_0} \tilde{F}(\varphi) \tilde{\chi}(\varphi); \quad (2.47)$$

en donde hemos definido, en la última igualdad, un nuevo operador

$$\tilde{F}(\varphi) \doteq F(\varphi) + i \frac{\Phi_B}{\Phi_0} E_0. \quad (2.48)$$

Esta elección de  $\tilde{\chi}(\varphi)$  es efectiva para reducir la ecuación de Schrödinger a una ecuación escalar (de Mathieu) para la amplitud, pues permite anular la contribución del término proporcional a  $F(\varphi)$  en  $\tilde{H}_\varphi$ , que es explícitamente no diagonal. Notemos que es efectivamente en este término donde radica la diferencia sustancial entre los casos con y sin campo, pues los otros términos, en su conjunto, pueden llevarse a la forma conocida (2.7) si se desplaza espectro de energías en la cantidad  $-E_0(\Phi_B/2\Phi_0)^2$  y se sustituye el operador  $(\partial_\varphi F)$  por  $(\partial_\varphi \tilde{F})$ . Esta sustitución es factible ya que  $F(\varphi)$  y  $\tilde{F}(\varphi)$  difieren únicamente en una constante aditiva.

El operador  $\tilde{F}(\varphi)$  comparte con  $F(\varphi)$  la propiedad de periodicidad en el anillo y el carácter de operador antihermitiano, pues la constante que los diferencia es puramente imaginaria y, por tanto, antihermitiana. Estas son dos de las tres propiedades que en el caso sin campo nos permitieron construir formalmente un par de soluciones pseudoperiódicas y ortogonales punto a punto en el anillo. La ec. (2.47) se asemeja, entonces, a la ec. (2.14) del caso sin campo. Los resultados generales respecto de la construcción de estas soluciones, expuestos en la §2.4, pueden utilizarse sin modificaciones para hallar los nuevos espinores. Sin embargo, no es necesario rehacer todas las operaciones, pues estos nuevos espinores son los del caso sin campo, pero desfasados por un factor dependiente del flujo magnético; esto es,

$$\tilde{\chi}_{\tilde{\mu}\pm}(\varphi) = e^{i \frac{\Phi_B}{2\Phi_0} \varphi} \chi_{\pm\mu}(\varphi). \quad (2.49)$$

El factor de fase introduce un desplazamiento constante,  $\mu_0 \doteq \Phi_B/2\Phi_0$ , en los exponentes de Floquet de los espinores originales, que se traslada directamente

al espectro de energías a través de la condición de periodicidad en el anillo que debe satisfacer el nuevo modo acimutal  $\tilde{\Phi}(\varphi)$ . El hecho de que este desplazamiento sea constante (o, más precisamente, que tenga su signo determinado) muestra que, en presencia de campo, no es equivalente para el electrón recorrer el anillo en un sentido o en otro. Es por esto que la degeneración que observamos en la ec. (2.25) se rompe en general, pues esta depende no sólo del intercambio de la orientación del espín, sino también de la del impulso. Esta ruptura puede deducirse en términos precisos como sigue. Por un lado, notemos que la amplitud de cada modo  $\tilde{\Phi}(\varphi)$  es una función de Mathieu de orden  $\nu$ , por lo que su autoenergía asociada dependerá del módulo de este orden,  $|\nu|$ , y no de su signo. A su vez, la condición de contorno (2.23) vincula el orden  $\nu$  con los exponentes  $\tilde{\mu}_{\pm}$ , de modo que, como antes, cada espinor  $\tilde{\chi}(\varphi)$  tiene asociada una función de Mathieu distinta. Si separamos la condición sobre  $\nu$  en dos, una para cada  $\tilde{\mu}_{\pm}$ , podemos escribir

$$\begin{cases} \nu_+ + \mu + \mu_0 = m_+, \\ \nu_- - \mu + \mu_0 = m_- \end{cases} \quad (2.50)$$

donde, como antes,  $m_{\pm}$  son números enteros. De estas relaciones se ve que no es posible, para cualquier  $\mu_0$  en general, hallar una relación entre los  $m_{\pm}$  tal que  $\nu_+ = -\nu_-$ . En efecto, notemos que la suma de las ecs. (2.50) establece que esto sólo es posible si  $2\mu_0$  es entero, es decir, si el flujo magnético  $\Phi_B$  en el interior del anillo es un múltiplo entero del cuanto de flujo  $\Phi_0$ .

# Capítulo 3

## Dinámica en el anillo sin impurezas y con SOI

### 3.1. Presentación

En este capítulo comenzaremos el estudio de la dinámica de un electrón confinado en un anillo cuántico, delgado y carente de impurezas magnéticas, bajo la acción de las interacciones de espín-órbita de Rashba y Dresselhaus. Este es el siguiente paso en dirección al problema más general de varios electrones sujetos a las interacciones SO e interactuando con las impurezas magnéticas.

El Hamiltoniano por el que comenzaremos será el que hemos deducido en §2.2. Analizaremos primero, en la §3.2, la dinámica de un electrón bajo la acción individual de una de las dos interacciones SO. Posteriormente, en la §3.4, relajaremos la restricción de anillo cuasi-1D y supondremos que existen transiciones entre el estado radial de menor energía y el primer excitado. Utilizaremos en este caso el Hamiltoniano deducido por Shakouri *et al.* [49]. Compararemos ambos modelos y

decidiremos sobre la prevalencia de uno sobre otro para nuestro objetivo.

## 3.2. Dinámica individual de las SOI de Rashba y Dresselhaus

El Hamiltoniano de un electrón de conducción, confinado y sujeto a las interacciones de Rashba y Dresselhaus, que mostramos en la ec. 2.4 de la §2.2, puede llevarse a la siguiente forma que explicita y distingue las contribuciones de ambas interacciones:

$$H = \frac{E_0}{\hbar^2} L_z^2 + i \frac{\alpha}{\hbar} (p_- \sigma_+ - p_+ \sigma_-) + \frac{\beta}{\hbar} (p_+ \sigma_+ + p_- \sigma_-). \quad (3.1)$$

El primer término en esta expresión es el Hamiltoniano de banda libre,  $H_0$ , mientras que el segundo y el tercero son, respectivamente, los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus:

$$\begin{aligned} H_R &= i \frac{\alpha}{\hbar} (p_- \sigma_+ - p_+ \sigma_-), \\ H_D &= \frac{\beta}{\hbar} (p_+ \sigma_+ + p_- \sigma_-) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Por último, los operadores  $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$  son los conocidos de subida y bajada de espín  $1/2$ .

Consideremos ahora el espacio de Hilbert generado por los autoestados de  $L_z$ :  $\{|\ell\rangle : \ell \in \mathbb{Z}\}$  y observemos que los operadores  $p_{\pm}$  actúan sobre estos estados de forma similar a como los  $\sigma_{\pm}$  actúan sobre los autoestados de  $s_z$ ; es decir:

$$p_{\pm} |\ell\rangle = \frac{\hbar}{a} \left( \pm \ell + \frac{1}{2} \right) |\ell \pm 1\rangle. \quad (3.3)$$

Debido a que el Hamiltoniano de la ec. 3.1 involucra, como vemos, operadores que actúan de forma simple sobre autoestados de  $L_z$  y  $s_z$ , es natural tomar el conjunto



$\mathcal{B} = \{|\ell, \sigma\rangle : \ell \in \mathbb{Z}, \sigma = \pm 1/2\}$  como base del espacio de Hilbert total del sistema. La acción individual de  $H_R$  y  $H_D$  sobre estos estados puede calcularse directamente, y permite observar más claramente cómo ambos vinculan de forma estrecha los impulsos angulares orbital y de espín del electrón:

$$\begin{aligned} H_R |\ell, \sigma\rangle &= \hbar\omega_R(\ell + \sigma) |\ell + 2\sigma, \bar{\sigma}\rangle, \\ H_D |\ell, \sigma\rangle &= 2\sigma i\hbar\omega_D(\sigma - \ell) |\ell - 2\sigma, \bar{\sigma}\rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

En esta expresión hemos definido las frecuencias  $\omega_R \doteq \alpha/\hbar a$  y  $\omega_D \doteq \beta/\hbar a$ , y hemos llamado  $\bar{\sigma} \doteq -\sigma$ . De estas expresiones se observa claramente que, de forma individual, la conversión de OAM en SAM electrónico es exactamente reversible, y oscilatoria con una frecuencia que depende del acoplamiento ( $\alpha/a$  o  $\beta/a$ ) y de ambos impulsos. Notemos que la acción de  $H_{R,D}$  es cíclica, esto es, los estados de  $\mathcal{B}$  son autoestados de  $H_{R,D}^2$ . Por tanto, la acción conjunta de  $H_0 + H_{R,D}$  sobre un estado  $|\ell, \sigma\rangle$  de  $\mathcal{B}$  solamente da como resultado una combinación lineal de dicho estado y de aquél con el que comparte el mismo autovalor de  $L_z + s_z$ , en el caso de  $H_R$ , o de  $L_z - s_z$ , en el caso de  $H_D$ .

En otras palabras, cuando solo una de las dos interacciones está presente, el Hamiltoniano total en la base  $\mathcal{B}$  se desacopla en bloques de autovalor constante de  $L_z + s_z$  o  $L_z - s_z$ . Puesto que las posibles proyecciones del espín del electrón son  $\pm 1/2$ , no es difícil ver que cada uno de estos bloques es de dimensión dos y es generado por el par de estados  $B_R = \{|\ell, \sigma\rangle, |\ell + 2\sigma, \bar{\sigma}\rangle\}$  en el caso de Rashba, y  $B_D = \{|\ell, \sigma\rangle, |\ell - 2\sigma, \bar{\sigma}\rangle\}$  en el caso de Dresselhaus. Cuando solamente una de las dos interacciones está presente, el Hamiltoniano total es diagonalizable por bloques y el operador de evolución temporal, restringido a un bloque particular, puede calcularse exactamente. Para ver esto último, tomemos un bloque particular de cada caso, digamos  $B_R$  y  $B_D$ , y reescribamos el Hamiltoniano restringido a cada

uno de ellos en términos de las matrices de Pauli  $\sigma_{x,y,z}$  y del operador identidad, como sigue:

$$H_0 + H_R = E_0 \left[ \frac{1}{4} + (\ell + \sigma)^2 \right] + \hbar\omega_R(\ell + \sigma)\sigma_x - 2\sigma E_0(\ell + \sigma)\sigma_z; \quad (3.5)$$

$$H_0 + H_D = E_0 \left[ \frac{1}{4} + (\ell - \sigma)^2 \right] - 2\sigma\hbar\omega_D(\ell - \sigma)\sigma_y - E_0(\ell - \sigma)\sigma_z. \quad (3.6)$$

Estos Hamiltonianos restringidos tienen una forma funcional similar a la de los generadores de rotación de espín 1/2 [40, 66]. Podemos, entonces, calcular el operador de evolución temporal utilizando resultados ya conocidos, si identificamos los coeficientes que multiplican a las matrices de Pauli en cada caso como componentes de un «vector» cartesiano:

$$\mathbf{n}_R = (\ell + \sigma) [\hbar\omega_R\hat{x} - 2\sigma E_0\hat{z}], \quad (3.7)$$

$$\mathbf{n}_D = -(\ell - \sigma) [\hbar\omega_D\hat{y} + 2\sigma E_0\hat{z}] \quad (3.8)$$

Si tenemos en cuenta la forma funcional del operador de rotación,  $e^{i\varphi\mathbf{n}\cdot\vec{\sigma}/2\hbar}$ , observamos que la norma de estos vectores determina la frecuencia de transición entre los dos estados de la base, y por tanto la frecuencia de conversión de OAM electrónico en SAM. Llamaremos a estas frecuencias  $\hbar\Omega_{R,D} \doteq |\ell + \epsilon_{R,D}\sigma|\sqrt{\omega_{R,D}^2 + \omega_0^2}$ , con  $\epsilon_R = -\epsilon_D = 1$  y  $E_0 = \hbar\omega_0$ . Es importante observar, por un lado, que  $\Omega_R$  es proporcional al impulso angular total,  $\ell + \sigma$ , mientras que  $\Omega_D$  lo es a la cantidad  $\ell - \sigma$ , conservada por la interacción SO de Dresselhaus. Por otro lado, ambas son invariantes ante la inversión simultánea del espín del electrón y del sentido de su impulso angular orbital; es decir, ante un cambio  $(\ell, \sigma) \rightarrow (-\ell, -\sigma)$ . Esta última propiedad está relacionada con la invariancia ante inversión temporal del Hamiltoniano total en cada caso.

A partir de estas definiciones obtenemos, finalmente:

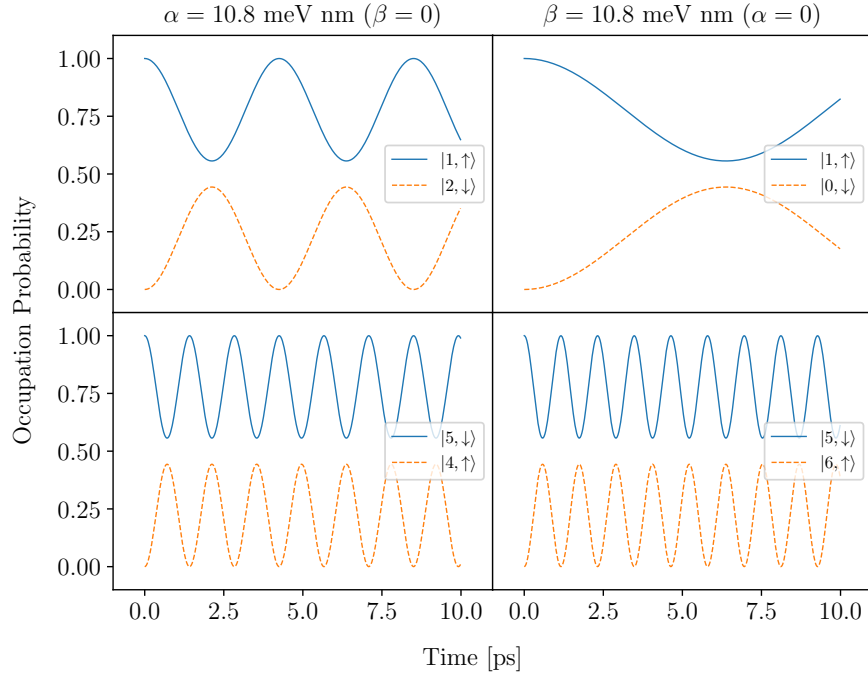
$$U_{R,D}(t, t_0) = \exp \left\{ -i \left[ (\ell + \epsilon_{R,D}\sigma)^2 + \frac{1}{4} \right] \omega_0(t - t_0) \right\} \left[ \cos(\Omega_{R,D}(t - t_0)) + i\Omega_{R,D}^{-1} \mathbf{n}_{R,D} \cdot \vec{\sigma} \sin(\Omega_{R,D}(t - t_0)) \right]. \quad (3.9)$$

Un resultado importante que se desprende de estos operadores es que la amplitud de transición entre los dos estados del sistema no depende de  $\ell$  ni de  $\sigma$ , y por tanto de la energía del electrón de conducción:

$$| \langle \ell + 2\epsilon_{R,D}\sigma, \vec{\sigma} | \Omega_{R,D}^{-1} \mathbf{n}_{R,D} \cdot \vec{\sigma} | \ell, \sigma \rangle | = \frac{\omega_{R,D}}{\sqrt{\omega_{R,D}^2 + \omega_0^2}} \quad (3.10)$$

De aquí es posible deducir que el máximo impulso angular intercambiado por un electrón inicialmente en alguno de ellos es  $\hbar\omega_{R,D}^2/(\omega_{R,D}^2 + \omega_0^2)$ . Si consideramos valores realistas para las constantes de acoplamiento, notamos que esta cantidad es suficiente para observar cambios macroscópicos en la orientación de espín del electrón. Tomemos, a modo de ejemplo, un QR de GaAs ( $m^* = 0.063m_e$ ) y radio  $a = 50$  nm, con acoplamiento de Rashba de constante  $\alpha = 10.8$  meV nm [49]. La dinámica de la ocupación de ambos estados para un electrón inicialmente en uno de ellos puede verse en la Fig. 3.1. Para estos valores,  $\hbar\omega_{R,D}^2/(\omega_{R,D}^2 + \omega_0^2) \approx 0.44\hbar$ . Lo que favorece este cambio significativo es precisamente el confinamiento del electrón a esta estructura cuasi-unidimensional, lo que limita efectivamente el impulso en el plano a su componente  $k_{\parallel} = k_{\varphi} = L_z/\hbar$ . Transicionar entre un nivel y el otro implica, pues, ganar o perder una unidad de  $\hbar$ , y constituye un cambio al que el espín debe adaptarse debido a la conservación de  $L_z + s_z$  o  $L_z - s_z$ .

El intercambio significativo entre ambos impulsos angulares es, por tanto, factible en estas estructuras, e independiente del tipo de interacción SO que se halle presente. Que no prevalezca una interacción sobre otra es relevante en la búsqueda



**Figura 3.1:** Variación temporal de la probabilidad de ocupación de los estados en cuatro bloques distintos, para un electrón inicialmente en un autoestado de  $H_0$  y sujeto a las interacciones de Rashba (columna izquierda) y Dresselhaus (columna derecha). Para este cálculo, consideramos un QR de GaAs y radio efectivo  $a = 50 \text{ nm}$ . Se observa que, para valores típicos de  $\alpha$  y  $\beta$ , el OAM convertido a SAM en un ciclo es significativo ( $\approx \hbar/2$ ) e independiente de la energía inicial del electrón (en esencia, su OAM inicial,  $\hbar\ell$ ).

de un método de control coherente de la transferencia de OAM al SAM electrónico y de éste al SAM de las impurezas en los DMS, pues la interacción de Rashba es, en algunos casos y hasta cierto punto, controlable externamente, a diferencia de la de Dresselhaus, que depende fundamentalmente de la estructura cristalina del semiconductor y del confinamiento del anillo [16]. Igualmente importante para esta búsqueda es el hecho de que la frecuencia de transición, y no la amplitud, dependa del OAM del electrón. Esta cantidad se convierte, entonces, en un parámetro de control que puede ajustarse convenientemente, según el caso. Por ejemplo, en el

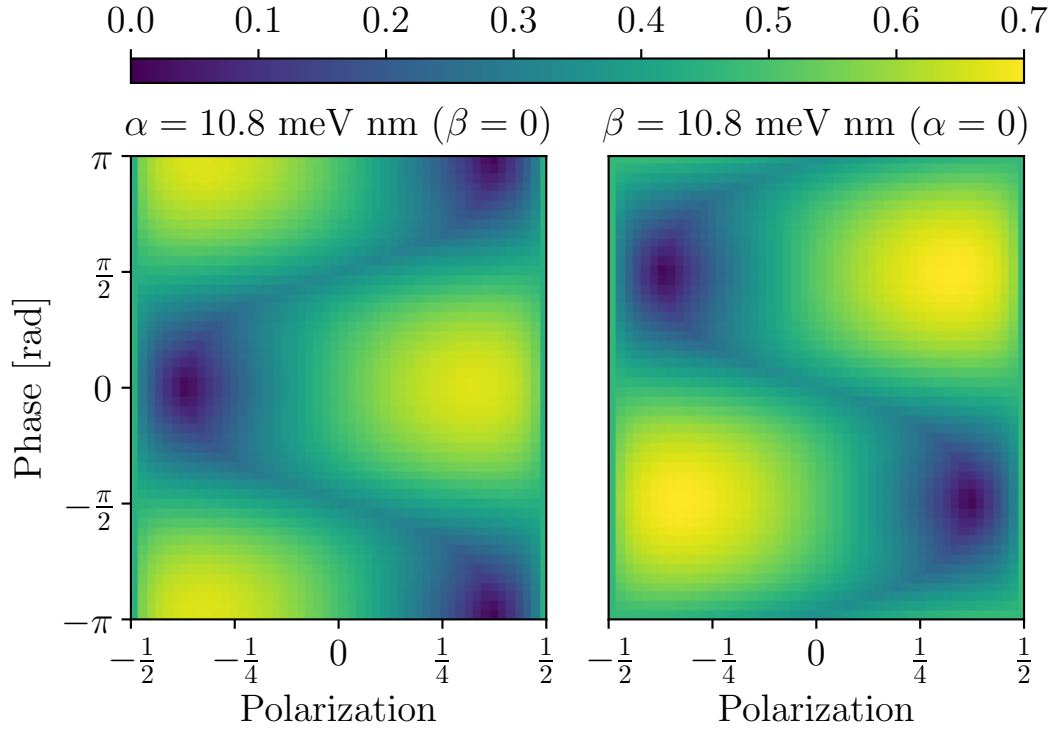
caso de Rashba, valores bajos de  $|\ell|$  facilitarían el control, por ejemplo, a través de un campo eléctrico dependiente del tiempo, dado que el factor de frecuencia  $(2\pi)^{-1}\sqrt{\omega_R^2 + \omega_0^2}$  puede alcanzar valores del orden de las decenas de GHz y ser, por tanto, prohibitivamente alto. Valores más altos de  $|\ell|$  pueden en cambio ser útiles para acelerar el intercambio y adelantarse a efectos de relajación [67, 68] y decoherencia [69-72] en nanoestructuras.

Hasta aquí hemos discutido las generalidades de la dinámica de un electrón, sin hacer suposiciones sobre su estado inicial. En lo que sigue, supondremos que el mismo ha sido previamente excitado a un estado de polarización  $|p| \leq 1/2$  e impulso orbital inicial  $\hbar^{-1}\langle L_z \rangle = \ell + \epsilon_{R,D}(1/2 - p)$ , de la forma:

$$|\psi\rangle = \sqrt{\frac{1}{2} + p} |\ell, \uparrow\rangle + e^{i\phi} \sqrt{\frac{1}{2} - p} |\ell + 2\epsilon_{R,D}, \downarrow\rangle. \quad (3.11)$$

Una discusión detallada sobre las estrategias para preparar estos estados sería, en el caso general, demasiado extensa para tratarla aquí. El lector interesado puede consultar la Ref. [73] y otras allí incluidas. No obstante, los estados en los que estaremos mayormente interesados, que corresponden a  $|p| = 1/2$ , pueden obtenerse experimentalmente mediante el uso de haces de *twisted-light* [1-3, 5].

En la Fig. 3.2 variamos la fase relativa  $e^{i\phi}$  y la polarización  $p$ , a fin de observar cómo se modifica la transferencia de impulso angular con el estado inicial. Para ello, dejamos evolucionar el sistema y calculamos la máxima desviación de  $\langle s_z \rangle$  con respecto a  $\hbar p$  que, como se desprende de la forma de los operadores de evolución de la ec. (3.9), se alcanza durante un ciclo para algún  $0 \leq t < 2\pi/\Omega_{R,D}$ . De este estudio se desprende, como esperaríamos, que la transferencia de OAM a SAM puede aumentarse hasta alcanzar casi la inversión de espín (aproximadamente  $0.7\hbar$ ) si se logra preparar el estado del electrón en una combinación simétrica o



**Figura 3.2:** Máxima desviación de la polarización del espín del electrón respecto de la inicial  $\hbar p$  en un ciclo para distintos estados iniciales de la forma dada en la ec. (3.11). Los parámetros del anillo son los mismos de la Fig. 3.1. Observamos que las desviaciones decrecen cuando el estado inicial es próximo a un autoestado del Hamiltoniano total en cada caso, y se anula en el mismo; mientras que las desviaciones más largas son del orden de  $0.7\hbar > \hbar/2$ , y corresponden a las combinaciones simétricas y antisimétricas de estos autoestados, como esperábamos. Para estos estados, los cambios son aún más significativos que los hallados en el ejemplo de la Fig. 3.1.

antisimétrica de los autoestados [41, 42]. Destacamos aquí que, incluso en estos casos más generales, esta transferencia máxima no depende del valor de  $|\ell|$  (ver Apéndice B).

### 3.3. Dinámica conjunta de las SOI de Rashba y Dresselhaus

En la sección anterior estudiamos la dinámica del electrón sujeto a sólo una de las dos interacciones SO. Ahora supondremos que ambas están presentes, y no haremos suposiciones sobre la intensidad de los respectivos acoplamientos.

$$\begin{aligned}
 \text{A:} \quad & \cdots \xleftrightarrow{\alpha/a} (\ell - 2\sigma, \bar{\sigma}) \xleftrightarrow{\beta/a} (\ell, \sigma) \xleftrightarrow{\alpha/a} (\ell + 2\sigma, \bar{\sigma}) \xleftrightarrow{\beta/a} \cdots \\
 \text{B:} \quad & \cdots \xleftrightarrow{\alpha/a} (\ell - 2\bar{\sigma}, \sigma) \xleftrightarrow{\beta/a} (\ell, \bar{\sigma}) \xleftrightarrow{\alpha/a} (\ell + 2\bar{\sigma}, \sigma) \xleftrightarrow{\beta/a} \cdots
 \end{aligned}$$

**Figura 3.3:** Diagrama que esquematiza la forma en que las interacciones SOI de Rashba y Dresselhaus acoplan los estados del espacio de Hilbert total o, equivalentemente, los subsistemas de dos niveles de autovalor  $\ell + \sigma$  o  $\ell - \sigma$  constante. Estas cadenas de estados pueden generarse manualmente operando alternadamente con  $H_R$  y  $H_D$  sobre un estado cualquiera del espacio de Hilbert. Notemos que ambas cadenas permanecen disjuntas aún durante la evolución temporal debido a la simetría del Hamiltoniano total respecto de operaciones del grupo doble  $C_2$ .

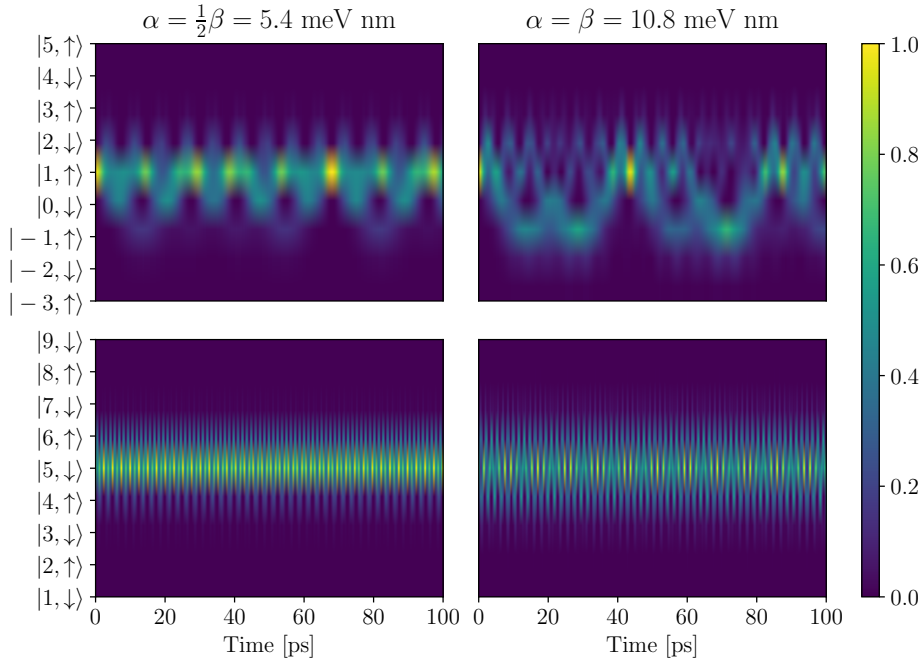
La separación del Hamiltoniano total en una colección de subsistemas de dos niveles, que observamos en la sección anterior, deja de valer cuando ambas interacciones actúan simultáneamente. Si partimos de esta separación, digamos, para el caso de Rashba, no es difícil ver que la inclusión de la SOI de Dresselhaus

conectará entre sí cualquier par de subsistemas adyacentes, es decir, cualquier par de subsistemas cuyo impulso angular total,  $\ell + \sigma$ , difiera en una unidad de  $\hbar$ . Por supuesto, lo mismo vale si se parte del caso de Dresselhaus y luego se añade la SOI de Rashba. Presentamos un esquema de esta vinculación entre subsistemas en la Fig. 3.3.

Este esquema revela una propiedad interesante del Hamiltoniano, y es que un electrón que ocupa inicialmente un estado en una cadena puede, en principio, visitar cualquier otro estado de la misma cadena, pero nunca transicionar hacia estados de la cadena complementaria. En otras palabras, en la misma base  $\mathcal{B}$  de la §3.2, el Hamiltoniano se separa ahora en dos bloques infinitos pero inconexos. La razón detrás de esta separación es la pervivencia de una simetría de rotación en  $\pi$  alrededor del eje del anillo, que deja invariante tanto  $H_0$  como  $H_R$  y  $H_D$ . En otras palabras, si  $R = e^{-iJ_z\pi/\hbar}$ , se verifica que  $RHR^\dagger = H$ . Cuando esta rotación opera sobre un autoestado de  $J_z$  (como son todos los estados en  $\mathcal{B}$ ) de autovalor  $j_z$ , modifica la fase global del mismo en  $\pm i$ , dependiendo de si  $j_z + 1/2$  es par o impar, respectivamente. La rotación  $R$  que se asocia con esta simetría es un elemento del grupo doble y cíclico  $C_2$  [66], y las fases  $\pm i$  globales son las representaciones unidimensionales  $\Gamma_3$  y  $\Gamma_4$  [74, 75]. Los estados de las cadenas **A** y **B** en la Fig. 3.3 pertenecen, así, a distintas representaciones irreducibles del grupo de simetría del Hamiltoniano, y, por tanto, los elementos de matriz de este último que conectan tales estados son nulos [66].

A pesar de que todos los estados en una misma cadena están conectados entre sí, la probabilidad que un electrón tiene de visitar un estado energéticamente alejado de su estado inicial decrece rápidamente. Esto se observa en la Fig. 3.4, en la que hemos tomado valores experimentalmente factibles para los parámetros del sistema





**Figura 3.4:** Probabilidad de ocupación de los estados adyacentes al estado electrónico inicial (arriba:  $|1, \uparrow\rangle$ ; abajo:  $|5, \downarrow\rangle$ ), para distintas constantes de acoplamiento e impulso angular orbital del electrón. Observemos que, incluso para electrones de alta energía (esto es, inicialmente en  $|5, \downarrow\rangle$ ) y acoplamientos SOI fuertes (columna derecha), esta probabilidad decrece notablemente a partir del tercer estado adyacente. Los parámetros del anillo son los ya mencionados en la Fig. 3.1.

y hemos graficado estas probabilidades para los primeros estados adyacentes al estado inicial del electrón, que se supone polarizado en espín y de impulso angular definido. Recordemos que estos estados pueden generarse a través de haces de *twisted-light*.

La función onda inicial del electrón no se «expande» más allá de los primeros estados adyacentes al inicial. Podemos comprender esto si observamos que los elementos de matriz del Hamiltoniano, que conectan estos estados, son proporcionales pero sistemáticamente menores a la diferencia de energía entre ellos. La conservación de la energía impide que se ocupen los estados de energía mucho

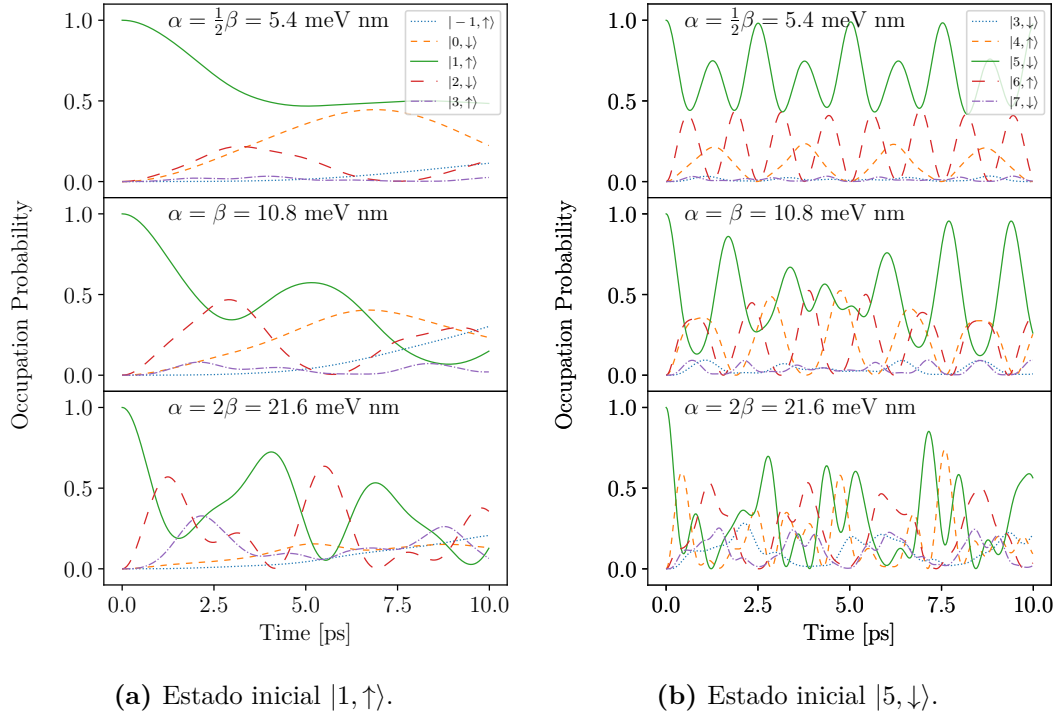
mayor o mucho menor de la inicial.

Podemos estimar cuánto se «expande» la función de onda inicial a partir del término dominante (primer término no nulo) de la probabilidad de transición entre dos estados de la misma cadena. Para ello, supongamos un electrón inicialmente en el estado  $|\ell, \sigma\rangle$  y tomemos un estado de la misma cadena  $|\ell + 2k\sigma, (-1)^k\sigma\rangle$ , con  $k \in \mathbb{Z}$  y  $k \neq 0$ . Para simplificar la discusión, supondremos, además, que la transición no invierte el sentido del OAM, es decir, que  $\ell(\ell + 2k\sigma) \geq 0$ . Los estados en  $\mathcal{B}$  que difieren en el signo del OAM tienen energías similares (o son degenerados en ausencia de SOI) y superiores a la del estado (perturbado) de OAM nulo. Partiendo de estas hipótesis, obtenemos:

$$\left| \langle \ell + 2k\sigma, (-1)^k\sigma | U(t, 0) | \ell, \sigma \rangle \right| \approx 2(\bar{\alpha}\bar{\beta})^{|n|} [\delta_{m,0} + \bar{\alpha}\delta_{m,1} + \bar{\beta}\delta_{m,-1}]. \quad (3.12)$$

En esta expresión,  $U(t, 0)$  es el operador de evolución temporal,  $k = 2n + m$ , con  $n \in \mathbb{Z}$ ,  $m \in \{-1, 0, 1\}$ , y  $nm \geq 0$ ; y las constantes  $\bar{\alpha}$  y  $\bar{\beta}$  son aquellas definidas en la ec. (2.28). Si consideramos nuevamente valores realistas para los parámetros del anillo,  $a = 50$  nm y  $m^* = 0.063m_e$ , y para las constantes de acoplamiento,  $\alpha = \beta = 10.8$  meV nm, ( $\alpha/a = \beta/a = 0.216$  meV), obtenemos de esta expresión que sólo los  $|k| < 3$  tienen una probabilidad significativa de ser ocupados. Una consecuencia práctica de este resultado es que el cambio en el impulso angular de un electrón está limitado, pues:  $|\Delta\langle J_z \rangle| = 2\hbar|n - \delta_{m,-1}|$ . Una consecuencia teórica es que, en estos casos, el Hamiltoniano (infinito) correspondiente a la cadena del estado  $|\ell, \sigma\rangle$  puede ser aproximado por un Hamiltoniano de dimensión finita que considere sólo los primeros  $|k|$  estados adyacentes al inicial.

Para estudiar más en detalle estos resultados, consideramos los mismos estados iniciales de la Fig. 3.4,  $|1, \uparrow\rangle$  y  $|5, \downarrow\rangle$ , y graficamos en las Figs. 3.5a-b la probabilidad



**Figura 3.5:** Probabilidad de ocupación del estado inicial mencionado y sus dos primeros vecinos, para distintas intensidades del acoplamiento de Rashba. Observemos que los segundos estados llegan a probabilidades de alrededor del 30 %, incluso para acoplamientos muy superiores a los hallados experimentalmente. Los parámetros del anillo son los ya mencionados en la Fig. 3.1.

de ocupación para los primeros dos estados adyacentes a cada uno de ellos. Lo hacemos para tres valores distintos de  $\alpha$ :  $\beta/2$ ,  $\beta$  y  $2\beta$ , con  $\beta = 10.8$  meV nm en todos los casos. Como vemos, el incremento del OAM inicial naturalmente influye en la frecuencia con que se pueblan y despueblan estos estados, pero no influye significativamente en la máxima población que alcanzan, en el rango estudiado, los segundos estados adyacentes. Para los parámetros elegidos, las poblaciones de los cinco estados (cuatro adyacentes y el inicial) alcanzan, para ambos OAM iniciales, valores similares en la ventana temporal elegida. Esto último se ve más claramente

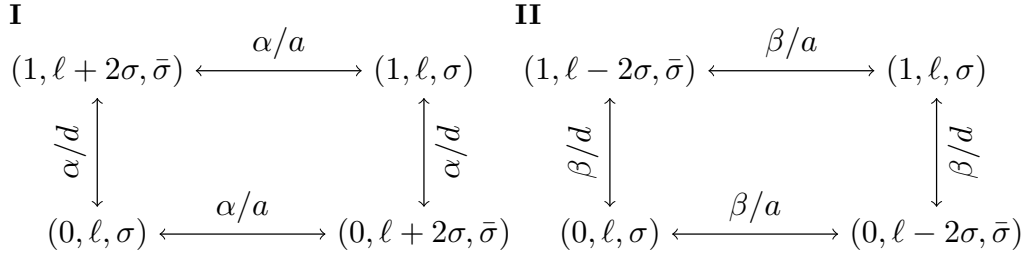
en la Fig. 3.4, en la que pueden observarse la dinámica de las poblaciones a tiempos relativamente mayores. Recordemos que la diferencia de energía entre ambos estados iniciales es notoria: el estado  $|1, \uparrow\rangle$  tiene una energía del orden de  $E_0$ , mientras que ésta es del orden de  $25E_0$  para el estado  $|5, \downarrow\rangle$ . A tiempos menores, la transferencia de población del estado inicial se da mayormente a los primeros vecinos,  $|0, \downarrow\rangle$  y  $|2, \downarrow\rangle$ , y  $|4, \uparrow\rangle$  y  $|6, \uparrow\rangle$ , respectivamente. Pero, como vemos, en cualquier caso la dinámica queda mayormente confinada a estos pocos estados, incluso en el caso extremo en que  $\alpha = 2\beta$ .

#### 3.4. Inclusión del primer nivel radial excitado

Es posible relajar la hipótesis de anillo cuasi-unidimensional y permitir que el electrón transicione entre el estado radial de menor energía y el primero excitado. Utilizaremos a este fin el modelo de Shakouri *et al.* [49]. Hemos elegido este modelo en especial porque, por una parte, el mismo se reduce al de Meijer *et al.* en el límite de anillo delgado, y, por otra, porque de él se derivan los mismos Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus obtenidos en la ec. (3.2).

Los autores modelan la estructura anular a partir de un potencial de confinamiento armónico e isótropo (parabólico) de intensidad  $\hbar\omega$  en la dirección radial. Este potencial determina un ancho efectivo para el anillo, de magnitud  $d \doteq a\sqrt{2E_0/\hbar\omega}$ . Es importante destacar aquí que este modelo es típicamente utilizado en la literatura [76, 77].

Los estados de un electrón están ahora caracterizados por tres números cuánticos  $n, \ell$  y  $\sigma$ , siendo  $n = 0, 1$  el correspondiente al nivel radial que el electrón ocupa. Los elementos de matriz del Hamiltoniano que conectan estados dentro de un mismo

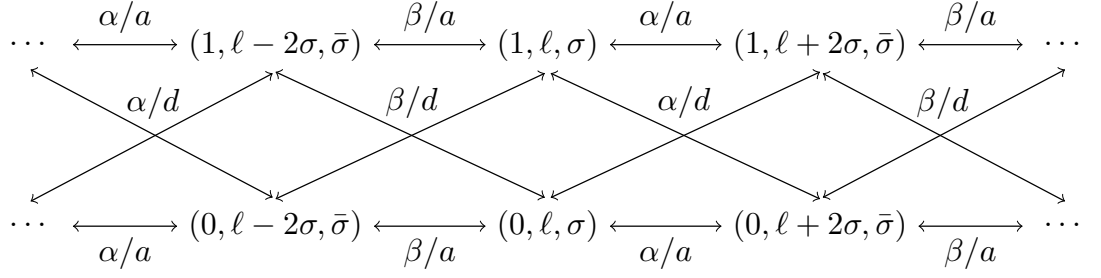


**Figura 3.6:** Esquema de un sistema de cuatro niveles de igual autovalor de  $L_z + s_z$  (I) y  $L_z - s_z$  (II), cuando sólo la interacción de Rashba o de Dresselhaus están presentes, respectivamente. Los elementos de matriz del Hamiltoniano que involucran un cambio en el modo radial dependen del ancho efectivo del anillo  $d$ , pero no de  $\ell$  o  $\sigma$ , a diferencia de los elementos de matriz que no cambian el modo radial, que son exactamente los deducidos en las ecs. (3.4).

nivel radial son, como mencionamos, exactamente los mismos que en el caso en el que se considera un único nivel radial, es decir, los deducidos en las ecs. (3.4). Los elementos que generan las transiciones entre distintos niveles radiales son, en cambio, proporcionales a  $\alpha/d$  y  $\beta/d$  e independientes tanto de  $\ell$  como de  $\sigma$ . De aquí se desprende que los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus en este modelo conservan, como antes, las cantidades  $L_z + s_z$  y  $L_z - s_z$ , respectivamente; incluso en transiciones entre modos radiales.

Los mismos argumentos utilizados en la §3.2 pueden utilizarse en este caso para mostrar que, en ausencia de una de las dos interacciones, el Hamiltoniano total se separa en bloques de cuatro estados que comparten el mismo autovalor de  $L_z + s_z$ , en el caso de Rashba, o de  $L_z - s_z$  en el de Dresselhaus. La estructura general de estos bloques queda resumida en el esquema de la Fig. 3.6.

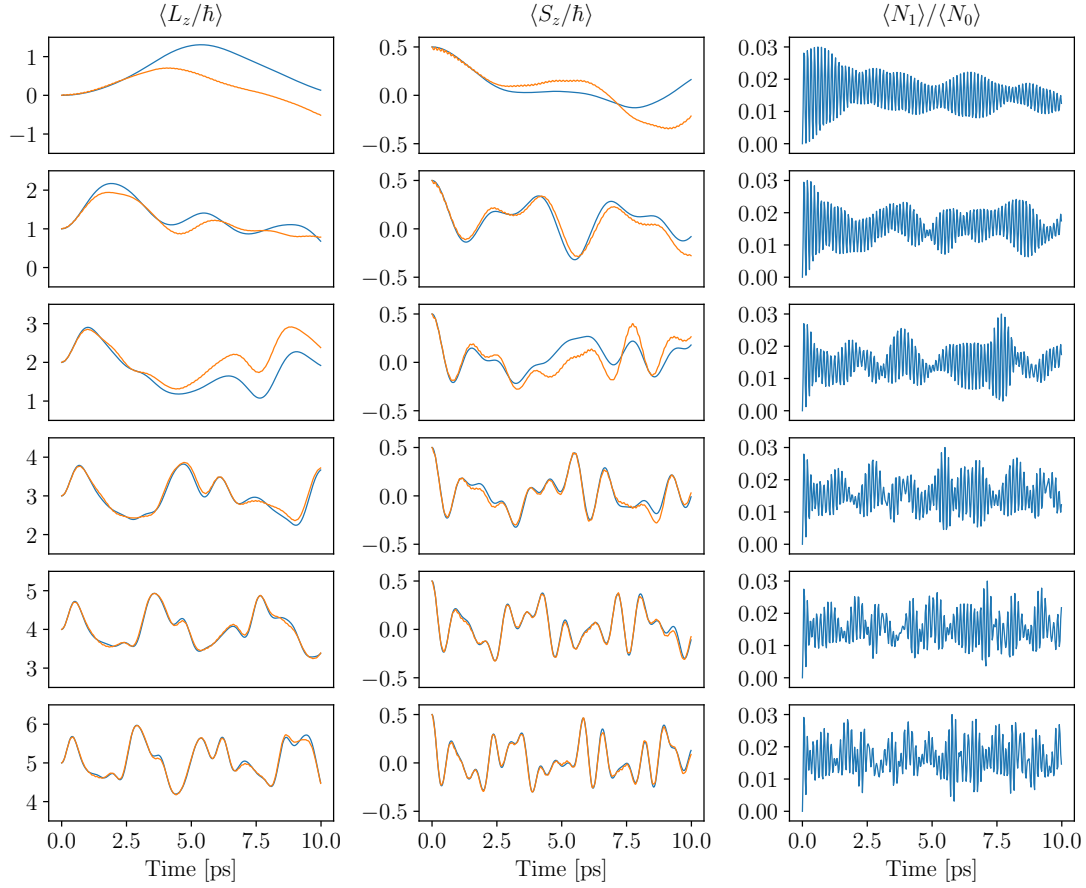
El Hamiltoniano total es también separable en dos bloques infinitos cuando ambas interacciones están presentes, al igual que en el modelo de un único modo



**Figura 3.7:** Esquema de la forma en que las interacciones de Rashba y Dresselhaus conectan los estados pertenecientes a uno de los, en principio, dos bloques infinitos en los que se separa el Hamiltoniano total. Cada estado en este bloque adquiere la misma fase global frente a la rotación  $R = e^{-i\pi J_z/\hbar}$ . El esquema corresponde a la extensión de la cadena **A** en la Fig. 3.3. Para anillos suficientemente delgados  $d/a \ll 1$  como el considerado en este caso (a partir de Shakouri *et al.* [49]), las transiciones dentro de un mismo modo radial son en general mucho más rápidas que aquellas entre modos.

radial. Los estados del espacio de Hilbert que conforman estos dos bloques pueden hallarse, tal como para el modelo anterior, observando que  $R = e^{-i\pi J_z/\hbar}$  continúa siendo una simetría del sistema, pues el potencial de confinamiento supuesto tiene simetría cilíndrica. Presentamos esquemáticamente la estructura del bloque que contiene los estados  $(0, \ell, \sigma)$  y  $(1, \ell, \sigma)$  en la Fig. 3.7. Esta estructura es la extensión de la cadena **A** en la Fig. 3.3. Por claridad, en la Fig. 3.7 omitimos el bloque complementario, que contiene los estados  $(0, \ell, \bar{\sigma})$  y  $(1, \ell, \bar{\sigma})$ .

A fin de estudiar la influencia del primer modo radial excitado en la dinámica del sistema, comparamos los valores de expectación  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle s_z \rangle$  en ambos modelos para seis estados iniciales distintos, que difieren entre sí únicamente por el OAM inicial. El electrón es, por tanto, inicialmente excitado en el modo radial de menor energía, y posee distintos valores de OAM ( $0 \leq \ell \leq 5$ ) pero igual polarización de espín. Los resultados para un QR de GaAs ( $m^* = 0.063m_e$ ),  $a = 50$  nm y



**Figura 3.8:** Evolución temporal de los valores de expectación  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle s_z \rangle$  para un electrón inicialmente en los estados  $(0, \ell, \uparrow)$ , con  $\ell$  creciente desde  $\ell = 0$  (primera fila) hasta  $\ell = 5$  (última fila). La curva azul corresponde al modelo de un único modo radial, mientras que la naranja corresponde al modelo de dos modos radiales. La tercera columna muestra la ocupación del primer modo radial excitado, relativa a la ocupación del modo radial de menor energía. Los parámetros del anillo son los ya mencionados en la Fig. 3.1, y  $\alpha = 2\beta = 21.6$  meV nm.

$\alpha = 2\beta = 21.6 \text{ meV nm}$  se muestran en la Fig. 3.8. Para un anillo de estas características,  $d \approx a/8$ . Tal y como hicimos en el análisis de la dinámica en el modelo anterior, elegimos estados iniciales de OAM y SAM definidos porque pueden generarse experimentalmente y simplifican enormemente el análisis.

Los valores de expectación del OAM y SAM del electrón (primera y segunda columna de la Fig. 3.8 desde la izquierda) muestran que las diferencias entre ambos modelos son más relevantes a bajas energías (bajo  $\ell$ ), y se hacen poco significativas a medida que la energía inicial del electrón aumenta. Observemos que, en todos los casos, la ocupación relativa del primer modo radial excitado es pequeña y no supera el 3 % en todo el rango temporal, incluso para electrones de baja energía. Esto es esperable, pues el primer modo excitado es de muy alta energía (al menos  $\hbar\omega$ ) y la interacción SOI no es lo suficientemente fuerte para permitir al electrón ocupar este modo, es decir,  $\hbar\omega \gg \alpha/d \gg \beta/d$ . Notemos, asimismo, que el comportamiento en el tiempo de la probabilidad de ocupación del modo de mayor energía cambia notoriamente con  $\ell$ . Este cambio parecer darse mayormente en la modulación, y no tanto en la frecuencia dominante. Nuevamente, esto es esperable, y podemos intuirlo si miramos las diferencias de energía entre los niveles involucrados. Para los valores de  $\ell$  considerados, es razonable que la frecuencia dominante sea prácticamente constante y del orden de  $\omega$ , mientras que la modulación dependa del  $\ell$  inicial. Para valores bajos de  $\ell$ , esta modulación es muy suave, y se hace más pronunciada a medida que  $\ell$  crece. Para valores altos de  $\ell$ , la modulación parece «comprimir» más las variaciones de amplitud y reducir los intervalos temporales en los que estas son más grandes. Vemos que aumentar  $\ell$  redundaría en una menor influencia de las transiciones entre modos radiales en los valores de expectación  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle s_z \rangle$ . En otras palabras, en términos relativos, las correcciones introducidas por la presencia



del modo excitado «pesan» menos para altos  $\ell$ , y las transiciones dentro de un mismo modo radial parecen dominar la dinámica. Si fijamos  $\hbar\omega$  y comparamos los elementos de matriz que corresponden a transiciones entre modos, con los elementos que corresponden a las transiciones dentro de un mismo modo, podemos esperar que la dominancia de estas últimas se mantenga para valores cada vez más altos de  $\ell$ . En cualquier caso, es notable que ya para  $\ell = 3$  las curvas obtenidas con uno y otro modelo se aproximen tanto. Es importante destacar aquí que estos análisis deben hacerse a  $\hbar\omega$  fijo. Tomar el límite de anillo cuasi-unidimensional debe hacerse con cuidado, ya que los elementos de matriz del Hamiltoniano proporcionales a  $1/d$  divergen al suponer  $E_0/\hbar\omega \rightarrow 0$ . La forma correcta de tomar este límite es descrita y discutida por Shakouri *et al.* en la Ref. [49].

Destacamos finalmente que observaríamos resultados similares si el electrón comenzara en el primer nivel radial excitado. Por conservación de la energía, el electrón en este caso no podría ceder una cantidad de energía del orden de  $\hbar\omega$  y, por tanto, no podría transicionar al estado radial de menor energía.

De estos resultados concluimos que la inclusión del primer modo radial excitado proporciona una descripción más precisa de la dinámica de electrones de muy baja energía. Concluimos que es más precisa, y no simplemente distinta, porque ambos modelos están sustentados sobre las mismas hipótesis fundamentales (por ejemplo, que los modos radiales y acimutales son separables). Sin embargo, observamos que esta mejora se obtiene a través de introducir mayor complejidad en el Hamiltoniano total, sin proporcionar una diferencia del todo significativa en los casos que pretendemos estudiar. Por tanto, consideramos que el modelo de un único modo es, a primer orden, una buena aproximación para continuar con nuestro estudio.



## Capítulo 4

# Interacción entre electrones e impurezas en el anillo sin SOI

### 4.1. Presentación

Nuestro objetivo ahora es comenzar el estudio de la dinámica entre electrones e impurezas magnéticas en el anillo. Modelaremos la interacción a través de un Hamiltoniano de contacto de tipo Kondo [38], como es usual en la literatura. Añadiremos esta interacción al Hamiltoniano de la banda libre, que será la parte cinética del deducido en la ec. (2.1) en el Cap. 2, en vista de los resultados obtenidos en la §3.4. Esta elección nos permitirá, por una parte, simplificar el problema tanto como sea posible, teniendo la confianza de que considerar un único modo radial es una buena aproximación; y, por otra, reducir el Hamiltoniano de Kondo a una aproximación cuasi-unidimensional aplicando las hipótesis de Meijer *et al.*, ya descritas en la §2.2. Finalmente, puesto que buscamos comprender esta dinámica en detalle, supondremos en todo nuestro análisis que ninguna de las interacciones

SO están presentes.

La dinámica de un sistema de muchos cuerpos como este queda totalmente determinada por las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para las matrices densidad de los electrones y de las impurezas. Sin embargo, como se verá, la complejidad de las ecuaciones resultantes es tal que las mismas forman un sistema acoplado e infinito. No es posible, por tanto, continuar el tratamiento del problema en el *picture* de Heisenberg sin antes truncar este sistema. Para hacer esto, seguiremos el esquema de Thurn y Axt [78], desarrollado para DMS en el *bulk*. Este esquema nos permite obtener un sistema de ecuaciones finito, cerrado y tratable numéricamente. La propuesta de los autores consiste en observar que las matrices densidad pueden expandirse exactamente en dos partes: una que proviene de aproximar las matrices densidad de varias partículas por sus formas factorizadas («campo medio»); y otras que provienen de las correlaciones inherentes a la interacción entre partículas. Estas últimas son irreducibles a formas factorizadas, y son las que generan la jerarquía. Ignorando juiciosa y apropiadamente ciertas correlaciones, es posible obtener una aproximación tratable al sistema de ecuaciones original.

Comenzaremos en la §4.2 expresando el Hamiltoniano unidimensional efectivo que contiene la interacción entre los electrones y las impurezas en términos de operadores de segunda cuantización. Posteriormente, en la §4.3 derivaremos las ecuaciones de Heisenberg y las expresaremos de modo que queden evidenciadas las correlaciones que luego ignoraremos. Habiendo obtenido el conjunto aproximado, estudiaremos, en la §4.4 sistemas sencillos, compuestos por un electrón y unas pocas impurezas inicialmente en estados puros, cuyas dinámicas puedan ser calculadas exactamente a través de la integración numérica de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para la función de onda total. Compararemos estas solucio-

nes con las obtenidas utilizando el sistema truncado. Este análisis nos servirá para estimar la fiabilidad del esquema de truncamiento y su aplicabilidad a este sistema en rangos temporales que son del orden de los hallados en la interacción entre electrones (particularmente los excitados ópticamente) y el sistema de impurezas en DMS [79-81].

## 4.2. Modelo efectivo en una dimensión

La interacción de intercambio entre electrones de conducción y el espín de los electrones en la capa  $d$  de los manganesos es descrita por el Hamiltoniano

$$H_{sd} = J \sum_{I=1}^{N_{\text{Mn}}} \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{S}_I \cdot \mathbf{s}_i \delta(\mathbf{r}_I - \mathbf{r}_i). \quad (4.1)$$

En esta expresión  $J$  es la constante volumétrica de acoplamiento, que depende mayormente del material y no de la cantidad de impurezas en él [12];  $N_{\text{Mn}}$  el número de impurezas en el sistema,  $N_e$  el número de electrones, y  $\mathbf{S}_I$  el espín total de la impureza  $I$ , ubicada en  $\mathbf{r}_I$ , que interactúa con el espín del electrón  $i$ , cuya posición viene dada por  $\mathbf{r}_i$ , sólo cuando entra en contacto con él, como muestra la delta de Dirac  $\delta(\mathbf{r}_I - \mathbf{r}_i)$ . Notemos que las impurezas en este modelo son distinguibles.

En la aproximación de anillo delgado, el confinamiento de los electrones reduce los grados de libertad esencialmente al movimiento a lo largo del anillo. Si seguimos el procedimiento expuesto en la §2.2 y tomamos el valor de expectación de  $H_{sd}$  sobre los modos axial (paralelos al eje del anillo) y radial de menor energía, obtenemos el siguiente Hamiltoniano efectivo:

$$\langle H_{sd} \rangle_{rz} = \frac{J}{V} \sum_{I=1}^{N_{\text{Mn}}} \sum_{i=1}^{N_e} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \delta(\varphi_I - \varphi_i). \quad (4.2)$$

En esta expresión,  $\langle \cdot \rangle_{rz}$  significa tomar el valor de expectación del operador entre corchetes sobre los estados radiales y axiales de menor energía. El efecto de confinamiento en las direcciones radial y axial queda, entonces, subsumido en la constante  $V$ , que es el volumen del sistema. Al conjunto de constantes  $\{\varphi_I\}$  que determinan las posiciones (la distribución) de las impurezas lo llamaremos *realización* de  $H_{sd}$ . Asimismo, al hacer la aproximación de anillo delgado, suponemos que cada impureza se halla aproximadamente centrada en las direcciones transversales. Podríamos introducir un factor escalar por cada impureza, que dé cuenta de variaciones en esta posición, dado que la ubicación de las impurezas es difícil de determinar durante el proceso de fabricación. Esto introduce una complejidad que no debería afectar notoriamente la dinámica en un anillo cuasi-unidimensional, por lo que supondremos que estas pequeñas desviaciones transversales no son significativas.

El Hamiltoniano efectivo total resulta, entonces, de sumar  $\langle H_{sd} \rangle_{rz}$  al Hamiltoniano efectivo de la banda libre, que consiste en la energía cinética de los electrones en la dirección longitudinal; esto es:

$$H = \sum_{i=0}^{N_e} \left\langle \frac{p_{i,\varphi}^2}{2m^*} \right\rangle_{rz} + \langle H_{sd} \rangle_{rz}. \quad (4.3)$$

A fin de simplificar la notación, en lo que sigue llamaremos simplemente  $H_{sd}$  a  $\langle H_{sd} \rangle_{rz}$ .

Introducimos ahora, siguiendo a Thurn y Axt [78], las matrices densidad de las impurezas a través de la igualdad:

$$\mathbf{S}_I \doteq \sum_{nn'} \langle I, n | \mathbf{S}_I | I, n' \rangle P_{nn'}^I. \quad (4.4)$$

Los estados  $|I, n\rangle$ , con  $n \in \{-5/2, -3/2, \dots, 3/2, 5/2\}$ , son autoestados del operador  $S_{I,z}$  de espín 5/2, es decir, del operador  $S_z$  de la impureza  $I$ . Esta definición

de las  $P^I$  permite subsumir en ellas toda dependencia temporal en el *picture* de Heisenberg, y considerar, por tanto, los elementos de matriz  $\langle I, n | \mathbf{S}_I | I, n' \rangle$  como constantes e independientes de  $I$  para todo tiempo. El valor de expectación de  $\mathbf{S}_I$  sobre cualquier estado inicial arbitrario queda, así, dado por:  $\langle \mathbf{S}_I \rangle(t) = \text{tr}[\mathbf{S} P^I(t)]$ , con  $\mathbf{S}$  el operador vector de espín 5/2.

Las matrices  $P^I$  son todas hermitianas y satisfacen las relaciones de conmutación  $[P^I, P^{I'}] = 0$  si  $I \neq I'$ , pues en este caso cada una actúa sobre una impureza distinta, y  $[P^I_{n_1 n_2}, P^I_{n_3 n_4}] = P^I_{n_1 n_4} \delta_{n_2 n_3} - P^I_{n_3 n_2} \delta_{n_1 n_4}$ . Estas propiedades pueden verificarse manualmente a partir de la definición de las  $P^I$ , esto es,  $P^I_{nn'} \doteq |I, n\rangle\langle I, n'|$ . Por ser matrices densidad, las  $P^I(t)$  deben ser asimismo semidefinidas positivas y satisfacer la condición  $\text{tr} P^I(t) = 1$  para todo tiempo.

La expresión del Hamiltoniano efectivo de la ec. 4.3 en segunda cuantización es:

$$H = E_0 \sum_{\ell\sigma} m^2 c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell\sigma} + \frac{J}{V} \sum_{\substack{I, n, n' \\ \ell\sigma \ell'\sigma'}} \mathbf{S}_{nn'} \cdot \mathbf{s}_{\sigma\sigma'} \rho_{\ell\ell'}^I c_{\ell'\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{nn'}^I. \quad (4.5)$$

En esta expresión  $E_0 \doteq \hbar^2/2m^*a^2$ , como en la ec. (2.7),  $c_{\ell\sigma}^\dagger$  es el operador que crea un electrón en el estado  $|\ell, \sigma\rangle$ ,  $\rho_{\ell\ell'}^I \doteq e^{-i(\ell-\ell')\varphi_I}$  son fases que dan cuenta de la transición del electrón entre estados de distinto OAM al interactuar con la impureza  $I$ ; y  $\mathbf{S}_{nn'}$  y  $\mathbf{s}_{\sigma\sigma'}$  son los elementos de matriz de los operadores  $\mathbf{S}$  y  $\mathbf{s}$ , de espín 5/2 y 1/2, respectivamente. Los elementos  $\mathbf{S}_{nn'}$  no refieren a ninguna impureza en especial, sino que son comunes a todas ellas. La distinción entre impurezas queda subsumida en el índice  $I$  de las fases  $\rho_{\ell\ell'}^I$  y los operadores de dos partículas  $c_{\ell'\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{nn'}^I$ .

### 4.3. Dinámica aproximada de un único electrón y pocas impurezas

Consideremos un único electrón de conducción interactuando con las impurezas, sobre cuya cantidad no haremos suposiciones por el momento, aunque recordamos que su número está acotado por la hipótesis de dilución. Las ecuaciones de Heisenberg para las matrices densidad de las impurezas,  $\langle P^I \rangle$ , y del electrón,  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle$ , tomando el valor de expectación sobre un estado inicial arbitrario, son:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{J}{V} \sum_{\substack{n\ell\sigma \\ \ell'\sigma'}} \rho_{\ell\ell'}^I \mathbf{s}_{\sigma\sigma'} \cdot (\mathbf{S}_{n_2 n} \langle c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell'\sigma'} P_{n_1 n}^I \rangle - \mathbf{S}_{nn_1} \langle c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell'\sigma'} P_{nn_2}^I \rangle) \quad (4.6)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle = E_0(\ell_2^2 - \ell_1^2) \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle + \frac{J}{V} \sum_{\substack{I_{nn'} \\ \ell\sigma}} \mathbf{S}_{nn'} \cdot (\rho_{\ell\ell_1}^I \mathbf{s}_{\sigma\sigma_1} \langle c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{nn'}^I \rangle - \rho_{\ell_2\ell}^I \mathbf{s}_{\sigma_2\sigma} \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{nn'}^I \rangle). \quad (4.7)$$

Observemos que la dinámica de estas matrices depende de ellas mismas y de la matriz densidad del operador de dos partículas  $\langle c_{\ell'\sigma'}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{nn'}^I \rangle$ . La jerarquía comienza a desarrollarse a partir de aquí, y, como veremos, la ecuación para esta última matriz dependerá de operadores de tres partículas: unos que vinculan un electrón con dos impurezas, y otros que vinculan dos electrones con una impureza. Puesto que, por hipótesis, hemos supuesto que sólo hay un electrón presente en el sistema, estos últimos términos no contribuirán a la jerarquía, a diferencia de los primeros, que deberemos aproximar para obtener un conjunto de ecuaciones cerrado. La



dinámica de la matriz  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I \rangle$  viene entonces dada por:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I \rangle = & E_0(\ell_2^2 - \ell_1^2) \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I \rangle \\ & + \frac{J}{V} \sum_{n\ell\sigma} \left( \mathbf{S}_{n_2n} \cdot \mathbf{s}_{\sigma_2\sigma} \rho_{\ell\ell_2}^I \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{n_1n}^I \rangle \right. \\ & \left. - \mathbf{S}_{nn_1} \cdot \mathbf{s}_{\sigma\sigma_1} \rho_{\ell\ell_2}^I \langle c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{nn_2}^I \rangle \right) + Q^I; \end{aligned} \quad (4.8)$$

El término  $Q^I$  condensa las contribuciones de los operadores de tres partículas, y resulta:

$$\begin{aligned} Q^I \doteq \frac{J}{V} \sum_{\substack{I \neq I' \\ nn'\ell\sigma}} \mathbf{S}_{nn'} \cdot (\mathbf{s}_{\sigma_2\sigma} \rho_{\ell\ell_2}^{I'} \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{n_1n_2}^I P_{nn'}^{I'} \rangle \\ - \mathbf{s}_{\sigma\sigma_1} \rho_{\ell\ell_2}^{I'} \langle c_{\ell\sigma}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I P_{nn'}^{I'} \rangle). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Notemos que este término es no nulo sólo cuando existe más de una impureza en el sistema. El índice  $I$  en el término  $Q^I$  refiere, como en todas las demás matrices en que aparece, a una impureza determinada del sistema. La restricción  $I \neq I'$  en la sumatoria del miembro derecho indica que  $Q^I$  contiene todas las contribuciones a la dinámica de  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I \rangle$  que provienen de la presencia de otras impurezas. Los operadores de la forma  $c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell\sigma} P_{n_1n_2}^I P_{nn'}^{I'}$ , en efecto, modifican como mucho el estado del electrón y de dos impurezas distintas. Esta interacción indirecta entre impurezas es mediada por el electrón y genera la jerarquía infinita y acoplada, aun cuando no haya más que un electrón de conducción. Resulta necesario, por tanto, aproximarla para poder continuar.

Hacemos esta aproximación en dos pasos. Primero, escribimos las matrices densidad de tres partículas en  $Q^I$  como suma de dos tipos de términos: los de tipo «campo medio», que provienen de factorizar el valor de expectación  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P_{n_1n_2}^I \rangle$  en productos de valores de expectación tomados sobre operadores de una y dos partículas; y los de tipo «correlación», que son irreducibles a términos totalmente

factorizados. Al hacer esta expansión, seguimos la propuesta de Thurn y Axt de utilizar la teoría de Kubo [82] para escribir el valor de expectación de productos de variables estocásticas en general. Así, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle = & \langle P^I \rangle \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^{I'} \rangle + \langle P^{I'} \rangle \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I \rangle \\
 & + \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle \delta \langle P^I P^{I'} \rangle - \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle \langle P^I \rangle \langle P^{I'} \rangle \\
 & + \delta \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle;
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

Por claridad, omitimos en esta expresión los subíndices de las matrices  $P^I$ . El segundo paso consiste en observar que los términos irreducibles  $\delta \langle P^I P^{I'} \rangle$  y  $\delta \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$  pueden ignorarse. En efecto, el primero de estos, definido como  $\delta \langle P^I P^{I'} \rangle \doteq \langle P^I P^{I'} \rangle - \langle P^I \rangle \langle P^{I'} \rangle$  cuando  $I \neq I'$ , proviene de la interacción directa entre impurezas. En un sistema diluido y en ausencia de *clusters*, es esperable que este término no sea significativo, debido a la gran distancia espacial que existe entre las impurezas. Un argumento similar sirve para suponer que, *a priori*, el segundo de estos términos,  $\delta \langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$ , tampoco será relevante frente a los de «campo medio». En el apéndice C mostramos que, para truncar la jerarquía, alcanza con despreciar este último término, sin que sea necesario despreciar también  $\delta \langle P^I P^{I'} \rangle$ .

El conjunto de ecuaciones de Heisenberg obtenido siguiendo este procedimiento queda, entonces, cerrado al nivel de operadores de tres partículas, e incluye las matrices densidad de las impurezas,  $\langle P^I \rangle$ , la electrónica,  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle$ , la y de interacción  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I \rangle$ . En lo que sigue, estudiaremos la precisión del esquema de truncamiento para reproducir la dinámica en sistemas de pocas impurezas cuyos estados iniciales factorizables en productos de un estado electrónico y  $N_{\text{Mn}}$  estados de impureza individuales. Estos casos simples nos permitirán estudiar la viabilidad del esquema de truncamiento, pues para ellos es posible resolver la ecuación

de Schrödinger dependiente del tiempo para el sistema total, sin recurrir a un tratamiento en términos de matrices densidad.

Supondremos un QR delgado de Zn, Mn<sub>x</sub>Te en el límite de alta dilución ( $x \ll 1$ ),  $N_{\text{Mn}}/V \approx 10^{-3} \text{ nm}^{-3}$ , con  $N_{\text{Mn}} = 2, 3$  y  $V \approx 777 \text{ nm}^3$ . Para calcular el volumen del anillo supondremos una altura efectiva de 1.5 nm [77], un radio efectivo de  $a = 14 \text{ nm}$  [76], y un ancho efectivo de aproximadamente 8.4 nm. Este último parámetro lo estimamos suponiendo, como es habitual en la literatura [49, 77, 83], un potencial de confinamiento radial y parabólico. En el límite de alta dilución, la constante de intercambio  $J$  para el (Zn, Mn)Te es  $J = 11 \text{ meV nm}^3$ , e independiente del número de impurezas [12], como mencionamos anteriormente. Obtenemos, así, el acoplamiento efectivo  $J/V \approx 0.0142 \text{ meV}$ . Supondremos, además, que la masa efectiva de la banda de conducción para el (Zn, Mn)Te es aproximadamente aquella del ZnTe en el límite de alta dilución, por lo que tomaremos  $m^* = 0.2m_e$ . Esta masa efectiva da una escala de energía  $E_0 \approx 0.972 \text{ meV}$ , que es mucho mayor que la del acoplamiento de intercambio  $J/V$ . Esta relación es importante puesto que, siendo  $E_0 \gg J/V$ , esperamos que el electrón ocupe mayormente el modo radial de más baja energía, y valga por tanto la aproximación fundamental de la que partimos, aunque el ancho efectivo del anillo sea aproximadamente la mitad del radio efectivo, y no mucho menor a este.

Integraremos el sistema de ecuaciones de Heisenberg truncado y la ecuación de Schrödinger exacta suponiendo una base suficientemente amplia de estados electrónicos que abarca energías hasta  $25E_0$ . Supondremos asimismo, a menos que indiquemos lo contrario, que el sistema comienza en un estado de la forma  $|\ell, \sigma\rangle |\text{Mn}_1\rangle \dots |\text{Mn}_{N_{\text{Mn}}}\rangle$ , donde  $|\ell, \sigma\rangle$  es un autoestado de electrón de OAM y SAM definidos; y  $|\text{Mn}_I\rangle$  es el estado inicial de la impureza  $I$ . Para estados de esta forma,

es posible ver que, inicialmente, las matrices densidad de dos y tres partículas,  $\langle P^I P^{I'} \rangle$  y  $\langle c_{\ell_1 \sigma_1}^\dagger c_{\ell_2 \sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$ , son iguales a sus formas factorizadas (esto es, a sus contribuciones de «campo medio»), y sus partes de correlación son nulas.

Las condiciones sobre el electrón, como se ha dicho anteriormente, pueden generarse en la práctica por excitación óptica a través del uso de haces de *twisted-light* [2, 3, 5, 84]. Las condiciones sobre las impurezas pueden, en cambio, ser más difíciles de reproducir. A fin de reducir juiciosamente el número de grados de libertad en estos estados, supondremos que las impurezas están inicialmente magnetizadas de forma que el espín de cada una se halla orientado sobre el plano  $xz$  y forma un ángulo  $0 \leq \beta < \pi$  con el eje del anillo. Esto es, supondremos, a menos que se indique lo contrario, que:

$$|\text{Mn}_I\rangle = d^{(5/2)}(\beta) |S_z; 5/2\rangle; \quad (4.11)$$

donde  $d^{(5/2)}(\beta)$  es la matriz  $d$  de Wigner de espín  $5/2$  [66], y  $|S_z; 5/2\rangle$  es el autoestado del operador  $S_z$  de espín  $5/2$  de autovalor  $5/2$ . Notemos que el Hamiltoniano efectivo de la ec. (4.2) es un operador escalar respecto de rotaciones sobre el espín total, por lo que obtendríamos la misma dinámica si, en lugar de elegir  $xz$ , eligiésemos cualquier otro plano que contuviera al eje del anillo. Es posible deducir que el truncamiento de la jerarquía no rompe esta simetría.

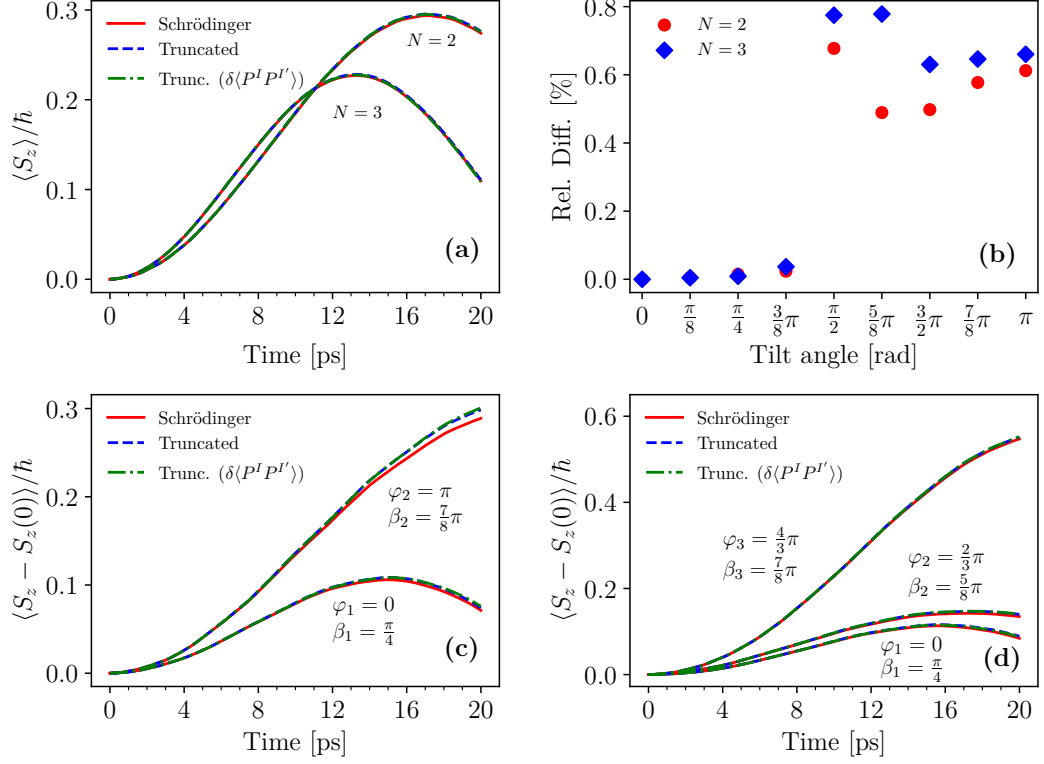
Finalmente, dado que trabajaremos con una cantidad pequeña de impurezas, supondremos que las mismas están distribuidas en el anillo en los vértices de un polígono regular de  $N_{\text{Mn}}$  lados cuando  $N_{\text{Mn}} > 2$ , o que se ubican en posición diametralmente opuesta cuando  $N_{\text{Mn}} = 2$ . Si bien esta configuración es altamente simétrica y difícil de obtener en la práctica, pues es imposible predecir la posición de las impurezas durante el proceso de fabricación de la muestra, es, sin embargo,

útil para garantizar la condición de alta dilución, ya que la máxima separación de las impurezas en un anillo cuasi-unidimensional se alcanza precisamente con esta distribución.

## 4.4. Estudio numérico del truncamiento

Supongamos que las impurezas están inicialmente magnetizadas sobre el eje  $x$  ( $\beta = \pi/2$ ) y que el electrón se encuentra en el estado  $|1, \uparrow\rangle$ . En estas condiciones, la proyección paralela al eje del anillo de la magnetización de una de las  $N_{\text{Mn}}$  impurezas evoluciona en el tiempo como muestra la Fig. 4.1a. Notemos que no es necesario especificar el índice de la impureza elegida, ya que todas evolucionan acompasadamente debido a la alta simetría de su distribución espacial y de su estado inicial (ver apéndice C). En la figura, la línea sólida representa la dinámica de referencia (la solución exacta), mientras que las líneas de guiones (azul) y guiones y puntos (verde) muestran, respectivamente, la dinámica aproximada tanto si se desprecian las correlaciones de la interacción directa entre impurezas ( $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ ), como si se incluyen en el sistema truncado.

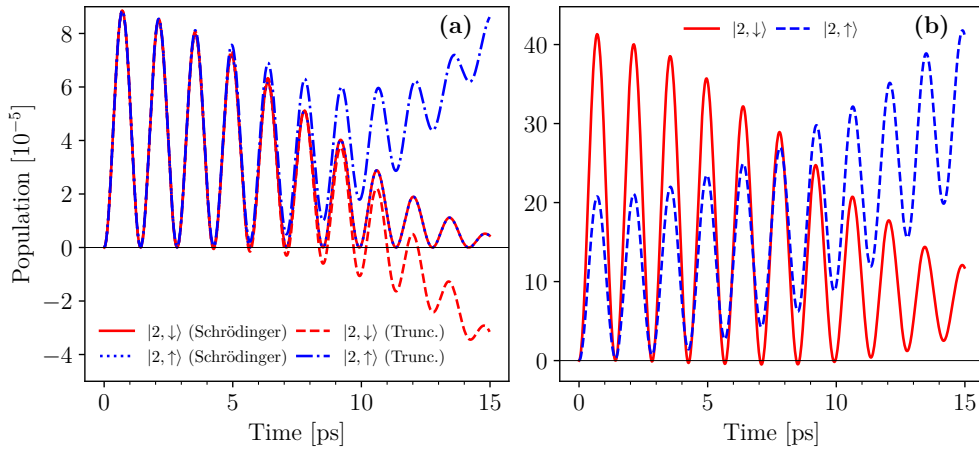
Observamos que en el rango temporal elegido, la aproximación reproduce con altísima precisión la magnetización exacta. La inclusión de las correlaciones provenientes de la interacción directa entre impurezas no modifica significativamente los resultados, como esperamos en el límite de alta dilución. Para el mismo número de impurezas, esta correspondencia tan próxima entre la dinámica aproximada y la exacta se observa asimismo cuando las impurezas comienzan polarizadas en otras direcciones. En efecto, como se observa en la Fig. 4.1b, la diferencia relativa entre la solución aproximada y la exacta no supera el 1 % cuando la separación entre ellas



**Figura 4.1:** (a): Magnetización de las impurezas paralela al eje del anillo para una polarización inicial de  $5\hbar/2$  paralela al eje  $x$ . La curva sólida muestra la solución exacta, mientras que la curva de guiones y de guiones y puntos muestran, respectivamente, las soluciones aproximadas despreciando o incluyendo las correlaciones de la interacción directa entre impurezas ( $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ ). (b): Máxima diferencia relativa entre la solución aproximada (sin  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ ) y la exacta para distintos ángulos de orientación iniciales. (c-d): Lo mismo que en (a) pero suponiendo orientaciones iniciales  $\beta_I$  diferentes para cada una de las  $N_{\text{Mn}} = 2$  (c) o  $N_{\text{Mn}} = 3$  (d) impurezas, ubicadas en  $\varphi_I$ . La magnetización se muestra relativa a la inicial. El estado inicial del electrón es  $|1, \uparrow\rangle$  en todos los casos.

alcanza el máximo global. Las Figs. 4.1c-d muestran un ejemplo de este caso cuando el sistema contiene dos y tres impurezas, respectivamente. Mencionamos aquí que las soluciones aproximadas reproducen con igual precisión la magnetización exacta cuando las impurezas comienzan en estados puros elegidos de forma totalmente aleatoria.

De estos resultados concluimos, por un lado, que el esquema de truncamiento es excelente para reproducir la magnetización de las impurezas en este rango temporal y cuando estas y el electrón se encuentran en estados puros; y, por otro, que en el límite de alta dilución es válido ignorar las correlaciones  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ . Notemos que, por conservación del SAM total, una alta precisión en la reproducción de la magnetización de las impurezas, cuando éstas son pocas, acota el error en la aproximación del SAM electrónico.

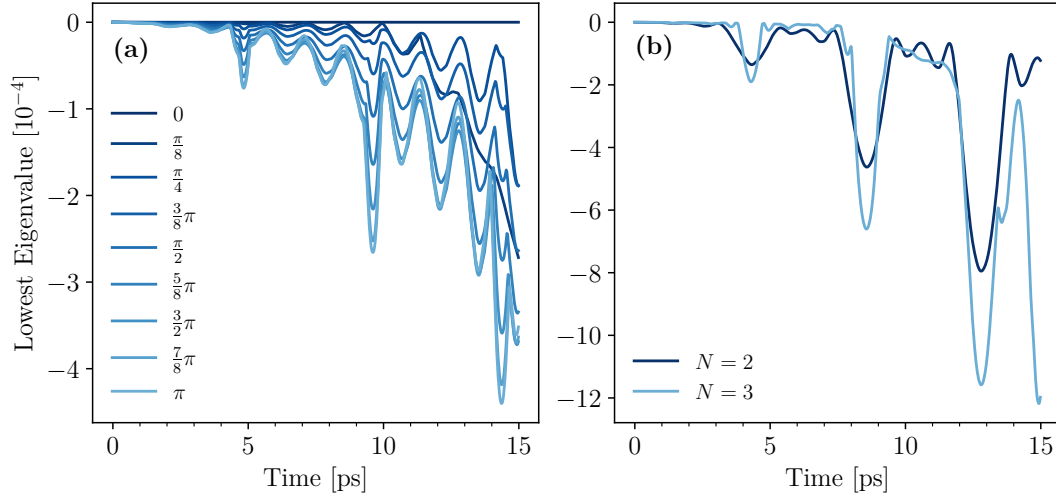


**Figura 4.2:** (a): Población de los estados  $|2, \uparrow\rangle$  y  $|2, \downarrow\rangle$  electrónicos adyacentes en energía al estado inicial  $|1, \uparrow\rangle$ . La línea sólida representa la solución de referencia (exacta) calculada en el *picture* de Schrödinger, mientras que la de guiones representa la solución aproximada (sin  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ ). La polarización inicial de cada impureza es  $5\hbar/2$  y paralela al eje  $x$ . (b): Población de los mismos estados cuando las impurezas están inicialmente en el estado totalmente no polarizado. En ambos casos consideramos  $N_{\text{Mn}} = 3$ .

El esquema de truncamiento, sin embargo, no reproduce con la misma precisión las ocupaciones de los estados electrónicos o de espín de las impurezas. Si suponemos la misma configuración inicial que para la Fig. 4.1a, notamos que las primeras (los elementos diagonales de la matriz densidad electrónica  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle$ ) toman valores negativos dentro del rango temporal elegido, particularmente para los primeros estados más próximos en energía al inicial, como muestra la 4.2a. La magnitud de estos valores no afecta al cálculo de observables como la magnetización de las impurezas, pero es, sin embargo, demasiado grande para asociarlo a errores numéricos. El mismo comportamiento se observa para otras condiciones iniciales, e incluso cuando las impurezas comienzan en el estado completamente no polarizado, descrito por la matriz densidad  $\langle P_{n_1n_2}^I \rangle(t=0) = \frac{1}{6}\delta_{n_1n_2}$  para todo  $I$ , como se observa en la Fig. 4.2b. Para tratar este último caso, suponemos inicialmente nulos los términos de correlación entre impurezas y electrones,  $\delta\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I \rangle$ , y entre impurezas  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$ , cuando estos últimos son incluidos en la dinámica. Al tomar esta condición inicial seguimos nuevamente a Thurn y Axt, y suponemos que el tiempo que tardan estas correlaciones en generarse es mucho mayor al tiempo de excitación inicial del sistema [78]. Esto es razonable en nuestro caso, dado que el tiempo de excitación del sistema es esencialmente el de excitación óptica del electrón.

La hermiticidad de las matrices densidad aproximadas se conserva en todos los casos estudiados. Los valores negativos para las poblaciones indican, por tanto, que la condición de ser semidefinidas positivas no se respeta durante la evolución temporal. Para la matriz densidad electrónica, el signo del menor autovalor muestra que esto sucede en (casi) todos los casos y desde el primer paso de integración, como se ve en la Fig. 4.3. Ratificamos que este comportamiento no es un efecto de





**Figura 4.3:** (a): Menor autovalor de la matriz densidad electrónica  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} \rangle$  en el tiempo cuando las impurezas están inicialmente polarizadas a distintos ángulos de inclinación sobre el plano  $xz$ . (b): Lo mismo que en (a) pero suponiendo que las impurezas se encuentran en el estado totalmente no polarizado. En ambos casos suponemos  $N_{\text{Mn}} = 3$  y el electrón inicialmente en  $|1, \uparrow\rangle$ .

error numérico (la reducción del paso de integración en un orden, por ejemplo, no proporciona ninguna mejora), sino propio del esquema de truncamiento. La única configuración en que no se observa este problema es aquella para la cual todas las impurezas se encuentran inicialmente polarizadas paralelamente al eje del anillo ( $\beta = 0$ ). Si consideramos que el estado electrónico inicial también es el de máxima proyección en la misma dirección, observamos que esta configuración corresponde al estado de máxima proyección del SAM total. Es, por tanto, un autoestado de SAM total con proyección máxima  $5N_{\text{Mn}}/2 + 1/2$ . Puesto que el Hamiltoniano total y el esquema de truncamiento conservan esta cantidad, es inmediato ver que ni el espín del electrón ni los de las impurezas tienen, en este caso, otros estados a los cuales transicionar sin romper la conservación del SAM total. Por tanto, no existe variación en la magnetización. Sin embargo, el sistema sí evoluciona, pues el OAM

del electrón no se conserva. Es por tanto razonable que el truncamiento aplicado sobre el término de interacción indirecta entre impurezas no tenga efecto neto sobre la dinámica. Aproximar o no esta interacción es irrelevante en este caso, y esto se refleja en la conservación de la semidefinitud positiva de la matriz densidad electrónica.

Notemos que la conservación de la hermiticidad puede garantizarse directamente en la ecuación de Heisenberg truncada, pues esta condición depende, como mucho, de los valores de las matrices densidad en cada tiempo  $t$ . Sin embargo, la condición de semidefinitud positiva es esencialmente una condición sobre la segunda derivada temporal de la matriz densidad, pues sus elementos diagonales deben alcanzar mínimos locales toda vez que se anulan. Por tanto, la misma depende fuertemente de la aproximación sobre los  $Q^I$ . La diferencia entre estas propiedades se ve, en otras palabras, en el hecho de que la hermiticidad sólo requiere que los elementos diagonales sean reales, mientras que la semidefinitud positiva requiere, además, que estos sean no negativos.

Lo discutido para la matriz densidad electrónica sucede también para las otras matrices de dos y tres partículas. Y en todos los casos la adición de las correlaciones  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$  sólo introduce pequeñas correcciones. Esto es indicativo de que el problema se halla principalmente en el truncamiento de los  $Q^I$ .

Para estos rangos temporales, que exceden los típicos de teoría de perturbaciones dependiente del tiempo, podemos concluir que la aproximación es útil para estimar correctamente los observables como la magnetización de las impurezas, que no es muy sensible a estos pequeños errores en las poblaciones. Sin embargo, tanto en caso simples como en otros más complejos, en los que no se cuenta con soluciones exactas de referencia, es necesario determinar las circunstancias en que estos errores

en las poblaciones pueden ignorarse.



# Capítulo 5

## Dinámica del intercambio de SAM en presencia de SOI

### 5.1. Presentación

En este capítulo integraremos lo estudiado en los capítulos anteriores. Integraremos numéricamente las ecuaciones (4.6), (4.7) y (4.8), teniendo en consideración las limitaciones de la aproximación descrita en el Cap. 4. Consideraremos, por tanto, un único electrón de conducción.

Como mencionamos anteriormente, nuestro objetivo es comprender la generalidad de la transferencia de SAM electrónico a SAM de las impurezas en presencia de interacción espín-órbita. A este respecto, consideraremos únicamente la interacción de Dresselhaus, y omitiremos la de Rashba. La razón detrás es simple: ambas interacciones generan dinámicas comparables en el sistema que estamos tratando, tal como se mostró en el Cap. 3, pero sólo la de Dresselhaus es fundamentalmente una propiedad tanto del semiconductor del QR, como del confinamiento. La interacción

de Rashba, como vimos, puede ser ajustada o suprimida en algunas estructuras, pero la de Dresselhaus es más difícil de modificar sin cambiar el semiconductor considerado o el confinamiento (lo cual podría alejarnos de la condición de anillo delgado, por ejemplo).

La inclusión de las interacciones SOI de Dresselhaus o Rashba puede hacerse sin modificar sustancialmente las hipótesis que conducen al truncamiento descrito en el Cap. 4, pues las SOI no incluyen términos directos de interacción con las impurezas, sino que vinculan el OAM con el SAM del electrón. Por tanto, podemos incluir las ecuaciones de Heisenberg que derivan de los Hamiltonianos de las ecs. (3.2) sin modificar el truncamiento desarrollado en la §4.3. Cabe enfatizar que las interacciones de intercambio y de espín-órbita son tratadas en pie de igualdad. En otras palabras, las ecuaciones de Heisenberg derivadas de los Hamiltonianos de espín-órbita son las mismas que las utilizadas para estudiar la dinámica en ausencia de la interacción de intercambio, y son incluidas directamente y sin modificaciones adicionales en el sistema de ecuaciones truncado. Destacamos este aspecto dado que el tratamiento de la dinámica de electrones en presencia de ambas interacciones, puede ser distinto en el *bulk* o en otras geometrías [85, 86].

Consideraremos un anillo delgado de  $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$  en el límite de alta dilución ( $x \ll 1$ ), con una densidad de impurezas  $N_{\text{Mn}}/V = 1.52 \times 10^{-2} \text{ nm}^{-3}$  ( $N_{\text{Mn}} = 20$ ), un radio efectivo de  $a = 14 \text{ nm}$  y un ancho efectivo de  $7.3 \text{ nm}$ , que corresponde a un potencial parabólico confinante de intensidad  $\hbar\omega = 15 \text{ meV}$ . Supondremos, como en la §4.3, que la masa efectiva del electrón en el borde de la banda de conducción es, en el límite de alta dilución, la del ZnSe sin impurezas, esto es,  $m^* = 0.16m_e$ . Estos parámetros dan una escala de energía de la banda libre (sin SOI ni intercambio) de  $E_0 = 1.22 \text{ meV}$ .

El acoplamiento de intercambio para el (Zn, Mn)Se en las condiciones propuestas es  $J = 11.8 \text{ meV nm}^3$ . La constante de Dresselhaus efectiva,  $\beta/a$ , para este (y otros) materiales puede calcularse a partir de la constante de Dresselhaus en el *bulk*, que para el ZnSe es  $\gamma_D = 14.3 \text{ meV nm}^3$  [16, 85], y de la geometría del anillo. Suponiendo que el confinamiento en dirección vertical es adecuadamente descrito por un pozo cuadrado, en este caso de ancho  $h = 3 \text{ nm}$ , y que el electrón siempre se halla en el modo axial de menor energía, obtenemos  $\beta/a = (\gamma_D/a)(\pi/h)^2 \approx 1.12 \text{ meV}$ . Notemos que este valor es del orden de  $E_0$  y, por tanto,  $\beta/a \gg J/V \approx 9 \times 10^{-3} \text{ meV}$ . Podríamos considerar otros materiales, pero a los fines de nuestro estudio esto sólo modificaría ligeramente los parámetros efectivos que entran en las ecuaciones. Esto es debido al hecho de que el orden de las constantes  $J$  y  $\gamma_D$  es compartido por un gran número de materiales de estructura zincblenda (con excepción del InSb, en el que  $\gamma_D$  es notoriamente superior [16]). Asimismo, podríamos variar las características del anillo, pero esto, por lo anterior, no modificaría el orden de los acoplamientos efectivos ( $\beta/a$  y  $J/V$ ) ni la relación entre ellos, a menos que reduzcamos o aumentemos significativamente el confinamiento. En el primer caso, incrementaríamos mucho el peso de la interacción SOI frente a la de intercambio, y no observaríamos el efecto de esta última en el rango temporal en el que podemos trabajar dadas las limitaciones metodológicas expuestas en el Cap. 4. En el segundo caso, nos alejaríamos de la aproximación de anillo delgado que nos permitió reducir la dinámica espacial a una dimensión.

Finalmente, para realizar la integración numérica de las ecuaciones de Heisenberg, supondremos que las impurezas se encuentran inicialmente no magnetizadas y en un estado totalmente isótropo, descrito por la matriz densidad  $\langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{1}{6} \delta_{n_1 n_2}$ . Dada la relación  $\beta/a \approx E_0 \gg J/V$ , supondremos una base restringida de autoesta-

dos electrónicos de  $H_0$  cuyas autoenergías no superan  $9E_0$ . Supondremos, como lo hemos hecho en los capítulos anteriores, que el electrón comienza en un estado de OAM determinado, esto es, en un autoestado de  $L_z$ . No haremos hipótesis sobre el estado de espín del electrón a menos que sea necesario.

### 5.2. Dinámica en ausencia de SOI

Comencemos suponiendo que es posible omitir la interacción de Dresselhaus ( $\beta = 0$ ). El Hamiltoniano en este caso es, como vimos,  $H_0 + H_{sd}$ , y es un operador escalar respecto de rotaciones que involucren únicamente al espín total  $\mathbf{S} = \sum_{I=1}^{N_{\text{Mn}}} \mathbf{S}_I + \mathbf{s}$ . Esta simetría está ligada a la conservación del SAM total, como mencionamos en el Cap. 3, y es de importancia porque permite estudiar la magnetización total de las impurezas observando el comportamiento del SAM electrónico. Asimismo, impone una restricción a la magnetización que pueden alcanzar las impurezas en su conjunto y, por tanto, a la magnetización de cada una de ellas en particular.

Esta simetría, además, simplifica notoriamente el análisis de la dinámica de intercambio cuando las impurezas se hallan inicialmente en un estado totalmente isótropo, pues permite suponer que el espín del electrón se halla siempre polarizado sobre el eje del anillo, sin por ello perder generalidad en el estudio. En otras palabras, si la polarización inicial del espín del electrón se halla en una dirección que no es el eje del anillo, podemos llevarla mediante rotaciones al eje, siempre que compensemos estas rotaciones con rotaciones inversas aplicadas sobre los espines de las impurezas. Sin embargo, estas últimas no modifican el estado inicial de las mismas. La dinámica de intercambio para una polarización inicial está, por tanto, vinculada a la dinámica para otra polarización a través de rotaciones que involucran



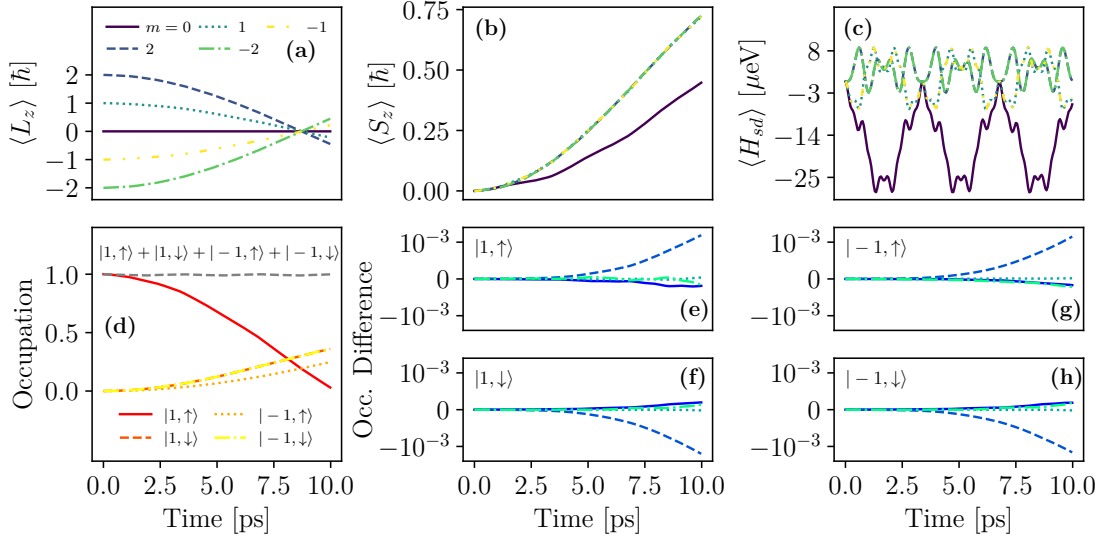
únicamente al espín total.

De la naturaleza escalar del Hamiltoniano y de la simetría del estado inicial de las impurezas se deduce, además, que la dinámica del impulso angular orbital no depende de la polarización inicial del espín del electrón, independientemente de que este comience o no en un autoestado de  $L_z$ . Esto es consecuencia directa del hecho de que las rotaciones mencionadas anteriormente actúan solamente sobre el espacio de espín.

Destacamos aquí que estas observaciones se deducen de la estructura del Hamiltoniano y de las condiciones iniciales, y no dependen en absoluto de las hipótesis subyacentes al truncamiento de las ecuaciones de Heisenberg.

En la Fig. 5.1a-b mostramos la dinámica del impulso angular electrónico y la magnetización total de las impurezas, respectivamente, para una realización particular y arbitraria de  $H_{sd}$  y un electrón inicialmente excitado en un estado  $|\ell, \uparrow\rangle$ . Por «realización» de  $H_{sd}$  entendemos, como en §4.2, el conjunto de parámetros  $\{\varphi_I\}$  que dan las posiciones de las impurezas en el anillo.

A pesar de ser relativamente pequeña respecto de la energía de la banda libre, observamos una gran influencia de la interacción de intercambio sobre la dinámica del OAM electrónico y la magnetización de las impurezas, especialmente cuando  $\ell \neq 0$ . Por una parte, vemos que las curvas de OAM opuesto (esto es, de  $\ell$  y  $-\ell$ ) parecen ser una reflexión de la otra respecto del eje  $\langle L_z \rangle = 0$ ; y todas ellas parecen cambiar de signo casi al mismo tiempo. Por otra parte, vemos que el intercambio de SAM no depende significativamente del OAM inicial cuando éste es no nulo, y en todos los casos esta transferencia es de tal magnitud que produce la inversión del signo del SAM electrónico. Mencionamos aquí que, por simetría, la magnetización de las impurezas se da en dirección del eje del anillo (es decir, en la dirección de



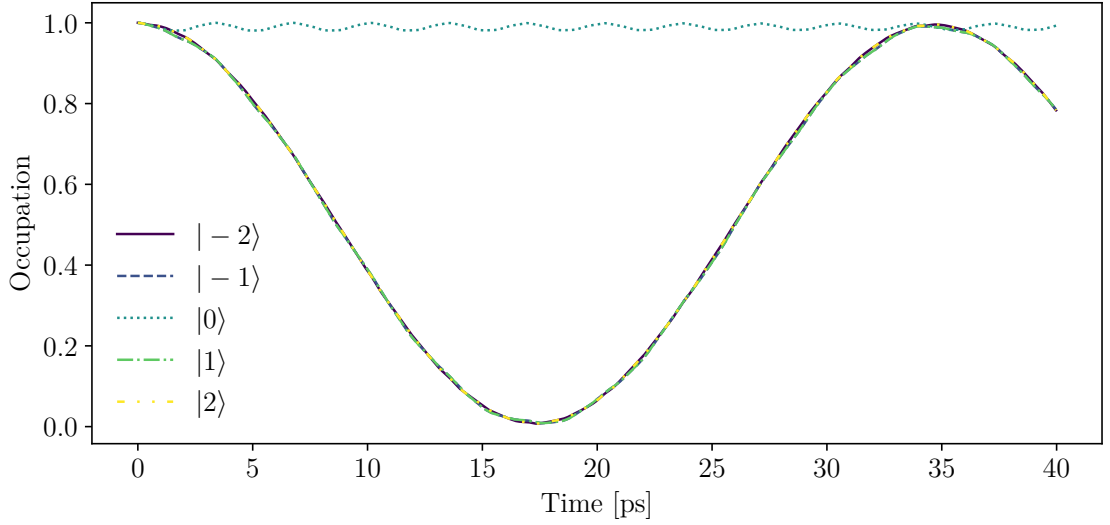
**Figura 5.1:** (a): Evolución en el tiempo del OAM electrónico para una realización particular y arbitraria de  $H_{sd}$ . El electrón se halla inicialmente en el autoestado  $|\ell, \uparrow\rangle$  de  $H_0$  y las impurezas se encuentran en el estado totalmente mixto (isótropo)  $\langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{1}{6} \delta_{n_1 n_2}$ . (b): SAM total de las impurezas. (c): Valor de expectación de la energía de *exchange* en el tiempo  $\langle H_{sd} \rangle$ . (d): Probabilidad de ocupación de los autoestados de  $H_0$  de OAM  $|\ell| = 1$  para un electrón inicialmente en  $|1, \uparrow\rangle$ . Estos estados degenerados en ausencia de la interacción de intercambio. En (b-d) la realización de  $H_{sd}$  es la misma. (e-h): Para cada estado en (d), diferencia entre la probabilidad de ocupación en (d) y la que se obtiene para otras cuatro realizaciones de  $H_{sd}$  distintas y tomadas al azar.

polarización inicial del espín del electrón) y no existe, por tanto, magnetización sobre el plano. Hechas estas observaciones generales, profundicemos en cada una de ellas.

La aparente relación entre las curvas de  $\langle L_z \rangle$  para distintos OAM iniciales es efectivamente confirmada por la dinámica de las ocupaciones de los autoestados de  $H_0$  que serían degenerados en ausencia de  $H_{sd}$ . Como observamos en la Fig. 5.1d para el caso en que el electrón comienza en el estado  $|1, \uparrow\rangle$ , la dinámica electrónica se halla esencialmente reducida a cuatro niveles: el inicial y otros tres que serían degenerados con este si la interacción de intercambio no estuviera, es

decir,  $\{|1, \downarrow\rangle, |-1, \uparrow\rangle, |-1, \downarrow\rangle\}$ . En el intervalo de tiempo estudiado, observamos que la ocupación total se mantiene casi en la unidad, y fluctúa alrededor de esta con amplitudes del orden de  $10^{-3}$ . En otras palabras, la dinámica electrónica queda confinada a un sistema de cuatro niveles, o dos si no se explicita el espín. En el régimen de alta dilución, la interacción de intercambio no es, pues, suficientemente fuerte para inducir transiciones entre estados por fuera de este subespacio (lo que requeriría una diferencia de energía al menos del orden de  $E_0$ ). Esto se refleja en la Fig. 5.1c. El OAM electrónico se halla por tanto limitado a  $\hbar|\ell|$  cuando  $\ell \neq 0$  y fluctúa alrededor de  $\langle L_z \rangle = 0$  cuando  $\ell = 0$ .

Supongamos ahora que  $\ell \neq 0$  (el caso  $\ell = 0$  lo analizaremos más adelante) y restringimos, a modo de aproximación, el espacio de Hilbert de estados electrónicos a estos cuatro niveles. Las transiciones entre estados de diferente OAM preservan o invierten el signo de  $\ell$ , como si el *scattering* fuese únicamente *forward* o *backward*. Esto se refleja en los desfases  $\rho^I$  introducidos por los potenciales de contacto tipo delta de Dirac (ver §4.2), que sólo pueden tomar los valores conjugados  $e^{\pm 2i\ell\varphi_I}$ . Si mantenemos la restricción de la base electrónica a cuatro niveles, definidos por  $\ell \neq 0$ , cambiar  $\ell$  a  $\ell' \neq 0$  es equivalente a mantener constante el valor de  $\ell$  y cambiar, en su lugar, la distribución de impurezas de  $\{\varphi_I\}$  a  $\{\varphi'_I \doteq (\ell'/\ell)\varphi_I\}$ . Sin embargo, esta modificación sólo introduce ligeras variaciones en las ocupaciones de los niveles degenerados, como puede verse en la Fig. 5.1e-h para cuatro distribuciones tomadas al azar. Más aún, estas variaciones parecen no afectar la ocupación total de los estados de OAM  $|1\rangle$  y  $|-1\rangle$ , esto es, las sumas de las ocupaciones de  $\{|1, \uparrow\rangle, |1, \downarrow\rangle\}$  y  $\{|-1, \uparrow\rangle, |-1, \downarrow\rangle\}$ . Observamos esto en la Fig. 5.2. En otras palabras, las variaciones en las ocupaciones de los niveles  $|\pm 1, \uparrow\rangle$ , producidas al cambiar la distribución de impurezas, parecen ser exactamente compensadas por cambios opuestos en



**Figura 5.2:** Ocupación total de los estados de OAM definido  $|\ell| \leq 2$  en un rango temporal extenso, cuando el electrón comienza en el estado de OAM definido  $|\ell, \uparrow\rangle$  y las impurezas en el estado isótropo  $\langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{1}{6} \delta_{n_1 n_2}$ . En este rango, las ocupaciones de los autoestados de  $H_0$ , de espín y OAM definidos, se vuelven negativas. Notemos que la ocupación total de cada nivel de OAM definido son siempre positivas, a pesar de que la matriz densidad electrónica  $\langle c_{\ell_1 \sigma_1}^\dagger c_{\ell_2 \sigma_2} \rangle$  no sea semidefinida positiva. Las ocupaciones excesivas o deficientes de un estado de espín  $|\ell, \uparrow\rangle$  y  $|\ell, \downarrow\rangle$  son, entonces, compensadas por defecto o exceso en la ocupación del estado complementario:  $|\ell, \downarrow\rangle$  y  $|\ell, \uparrow\rangle$ , respectivamente.

las ocupaciones de  $|\pm 1, \downarrow\rangle$ , de forma que la ocupación total de cada nivel  $|\pm 1\rangle$  permanece prácticamente invariante y débilmente dependiente de la realización particular de  $H_{sd}$ . Puesto que  $\langle L_z \rangle / \ell$  depende únicamente de la ocupación total de cada nivel  $|\pm 1\rangle$ , este valor es también insensible a la distribución electrónica y, por lo anterior, al valor de  $\ell$ . Las curvas de  $\langle L_z \rangle$  en la Fig. 5.1a están, por tanto, relacionadas unas con otras pues pueden reducirse a una curva común  $\langle L_z \rangle / \ell$ .

Es interesante notar que lo mismo se observa también a tiempos más largos, cuando las ocupaciones de los estados  $|1, \uparrow\rangle$  y  $|1, \downarrow\rangle$  se vuelven negativas. En este punto destacamos un aspecto de la la Fig. 5.2 vinculado al problema metodológico

tratado en el Cap. 4. Si bien sabemos que el truncamiento no conserva la semi-definitud positiva de las matrices densidad (es decir, no es una aproximación que genera una evolución Hamiltoniana) vemos que, para tiempos más largos de los que permiten confiar en los resultados del truncamiento, las ocupaciones de los estados  $|\pm 1\rangle$  se mantienen siempre positivas, aunque las ocupaciones individuales de  $|1, \uparrow\rangle$  y  $|1, \downarrow\rangle$  se vuelvan negativas rápidamente. De aquí podemos ver que, para cada realización de  $H_{sd}$  la ocupación «excedente» («deficiente») de un estado de OAM y espín definidos es compensada por la ocupación «deficiente» («excedente») del estado de igual OAM y espín complementario.

La Fig. 5.2 nos revela que la dinámica del nivel  $|1\rangle$ , para las condiciones iniciales que estamos tratando, es oscilatoria y su periodo y amplitud están muy bien definidos. Esto es esperable no sólo para  $\ell = 1$ , sino para cualquier  $\ell \neq 0$ , pues sólo dos niveles de OAM definido intervienen esencialmente en la dinámica (los de  $\pm \hbar \ell$ ) y sus ocupaciones deben conservar el número de electrones (en nuestro caso, uno). En otras palabras, la dinámica en este subespacio se comporta como un sistema de dos niveles. Podemos agregar esta observación a las mencionadas en el Cap. 4 y enfatizar nuevamente que, a pesar de no ser Hamiltoniano, el truncamiento utilizado reproduce adecuadamente diversos aspectos físicos del sistema que estamos estudiando.

Retomando el análisis de la Fig. 5.1b, destacamos que la dinámica de la magnetización total  $\langle S_z \rangle$  depende de la distribución de impurezas. Podemos deducir que esto será así atendiendo nuevamente a los gráficos de las Figs. 5.1e-h. Si la suma de las ocupaciones de los estados  $|\ell, \uparrow\rangle$  y  $|\ell, \downarrow\rangle$  es insensible a la realización de  $H_{sd}$ , la diferencia entre ellas no lo es y, por tanto, tampoco podrá serlo en general el valor de expectación del espín del electrón,  $\langle s_z \rangle$ , o la magnetización total  $\langle S_z \rangle$ ,

que está ligada al primero por conservación del SAM total. Sin embargo, en el rango temporal en el que estamos trabajando, el efecto de estas variaciones es tan pequeño que no alcanza a percibirse en las curvas de  $\langle S_z \rangle$ .

Analicemos ahora la dinámica observada cuando el electrón comienza en el autoestado  $|0\rangle$  de  $L_z$ . Como vemos en las Fig. 5.1a-b, la dinámica este caso es notoriamente diferente, aún a tiempos muy cortos en los que los errores de truncamiento no llegan a acumularse. Podemos comprender sus peculiaridades si procedemos como antes, teniendo en cuenta que el OAM electrónico en este caso oscila alrededor de  $\langle L_z \rangle = 0$ , pues la intensidad efectiva de la interacción de intercambio nuevamente limita las transiciones del electrón a otros estados de OAM degenerados con el inicial.

Las transiciones más relevantes en este caso son entre los estados  $|0, \uparrow\rangle$  y  $|0, \downarrow\rangle$ . Si reducimos nuevamente el subespacio de estados electrónicos a estos dos, observaríamos un comportamiento similar al de un sistema de dos niveles. Si sumamos en espín observamos en cambio que el sistema se comporta como si fuera esencialmente de un nivel, tal como muestra la Fig. 5.2. En otras palabras, los estados de OAM  $\hbar\ell \neq 0$  prácticamente no se ocupan en este caso. Al hacer cualquiera de estas reducciones estamos efectivamente suprimiendo las transiciones a otros estados de OAM definido y, por tanto, estamos suprimiendo el efecto de los potenciales de contacto sobre la matriz densidad electrónica. La ubicación de cada impureza en el anillo ya no es importante, pues los elementos de matriz diagonales de estos potenciales no dependen de las  $\{\varphi_I\}$ , y los términos de interacción entre los electrones y las impurezas pueden reducirse a un único término de interacción entre el espín del electrón y el de un espín total y no localizado [78], dado por

$$\mathbf{S} = \sum_{I=1}^{N_{\text{Mn}}} \mathbf{S}_I:$$

$$H = H_0 + \frac{J}{V} \left( \sum_{I=1}^{N_{\text{Mn}}} \mathbf{S}_I \right) \cdot \mathbf{s} \quad (5.1)$$

No obstante, esta reducción no elimina la interacción indirecta entre impurezas, pues cada término  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{S}_I$  no conmuta con  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{S}_{I'}$  para  $I \neq I'$ . La dinámica generada por este Hamiltoniano de la ec. (5.1) no es, por tanto, equivalente a la de  $N_{\text{Mn}}$  interacciones individuales entre el electrón y las impurezas.

Puesto que la distribución de las impurezas ya no entra en  $H_{sd}$ , cualquier reordenamiento de las impurezas por intercambio de índices no tiene efecto alguno sobre la dinámica. Esta nueva simetría trae como consecuencia que el electrón transfiera en todo momento la misma cantidad de SAM a cada impureza. En otras palabras, el SAM total se distribuye uniformemente en todas las impurezas (como cuando estas forman un polígono regular), y las impurezas se magnetizan (o desmagnetizan) de forma sincrónica si empiezan, como en nuestro caso, todas en el mismo estado. A tiempos cortos, vemos que esta restricción ralentiza la magnetización y la hace comparativamente menos efectiva que en los casos en los que cada impureza intercambia SAM con el electrón a ritmos diferentes.

### 5.3. Dinámica en presencia de SOI

Incluyamos ahora la interacción de Dresselhaus fijando, como dijimos,  $\beta/a = 1.12$  meV. El Hamiltoniano total ahora contiene tres términos: los dos con que venimos trabajando,  $H_0$  y  $H_{sd}$ , y el de Dresselhaus, dado en la ec. (3.2).

En la §3.2 mencionamos que tanto los autoestados como las autoenergías del Hamiltoniano  $H_0 + H_D$  pueden calcularse exactamente si se subdivide este en bloques de  $2 \times 2$  de autovalor de  $L_z - s_z$  definido (cantidad conservada por

la interacción de Dresselhaus). Si reordenamos el espacio de Hilbert de estados electrónicos y lo suponemos dividido en subespacios de la forma  $\{|\ell, \uparrow\rangle, |\ell - 1, \downarrow\rangle\}$ , podemos trabajar con los autoestados de  $H'_0 \doteq H_0 + H_D$ :

$$\psi_\ell^+(\varphi) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} e^{i\ell\varphi} \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ ie^{-i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}, \quad \psi_\ell^-(\varphi) = \frac{i}{\sqrt{2\pi}} e^{i\ell\varphi} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} \\ ie^{-i\varphi} \sin \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}; \quad (5.2)$$

cuyas autoenergías asociadas son

$$\frac{E_\ell^\pm}{E_0} = \left[ \left( \ell - \frac{1}{2} \right)^2 \pm \left( \ell - \frac{1}{2} \right) \sqrt{1 + \tan^2 \theta} + \frac{1}{4} \right]. \quad (5.3)$$

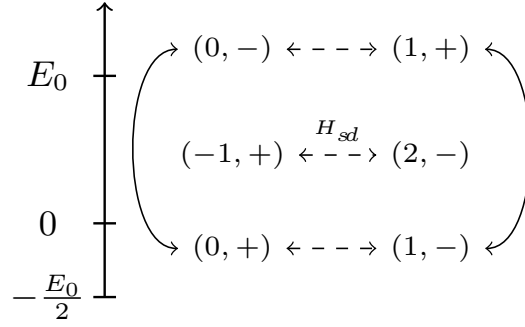
El ángulo cenital  $\theta$  queda enteramente determinado por  $\tan \theta = \beta/aE_0$ , que, en nuestro caso, resulta  $\theta \approx \pi/4$ . Si el electrón comienza en alguno de los autoestados  $\psi_\ell^\pm(\varphi)$ , su espín apuntará hacia el eje del anillo ( $\psi_\ell^+$ ) o en la dirección opuesta ( $\psi_\ell^-$ ). En ambos casos, el espín describirá una «corona» alrededor del anillo. Si, en cambio, el electrón comienza en un autoestado de  $H_0$ ,  $|\ell, \sigma\rangle$ , su estado inicial involucrará únicamente el bloque de  $H'_0$  dado por  $\{|\ell, \sigma\rangle, |\ell - 2\sigma, \bar{\sigma}\rangle\}$ .

En ausencia de  $H_{sd}$ , los autoestados de  $H_0$  son doble ( $\ell = 0$ ) o cuádruplemente degenerados ( $\ell \neq 0$ ), pues  $H_0$  es independiente del espín y cuadrático en  $L_z$ . Esta simetría axial se reduce en  $H'_0$  a rotaciones en  $\pi$  alrededor del eje del anillo (ver §3.3). Sin embargo, persiste la simetría de inversión temporal (ver Cap. 2), y la degeneración de Kramers. Los autoestados de  $H'_0$  son siempre doblemente degenerados si  $\beta/a \leq E_0$ , como en nuestro caso ( $\beta/aE_0 \approx 0.92$ ). A partir de la forma matricial de cada bloque de  $H'_0$  en la base  $\{|\ell, \uparrow\rangle, |\ell - 1, \downarrow\rangle\}$ , puede verse que el autoestado degenerado de  $\psi_\ell^\pm(\varphi)$  es  $\psi_{-\ell+1}^\mp(\varphi)$ . Este estado pertenece a otro bloque de  $H'_0$ , y su orientación de espín es diametralmente opuesta a la de  $\psi_\ell^\pm(\varphi)$ .

El reordenamiento del subespacio de estados electrónicos en bloques de  $2 \times 2$  es sumamente útil pues la intensidad de la interacción de Dresselhaus es similar a la



escala de energía de la banda libre  $E_0$  y, por tanto, mucho mayor que la intensidad de la interacción de intercambio. Aprovechando que podemos diagonalizar  $H'_0$  exactamente, podemos estudiar la dinámica conjunta en presencia de las dos interacciones tomando la base de autoestados de  $H'_0$ .

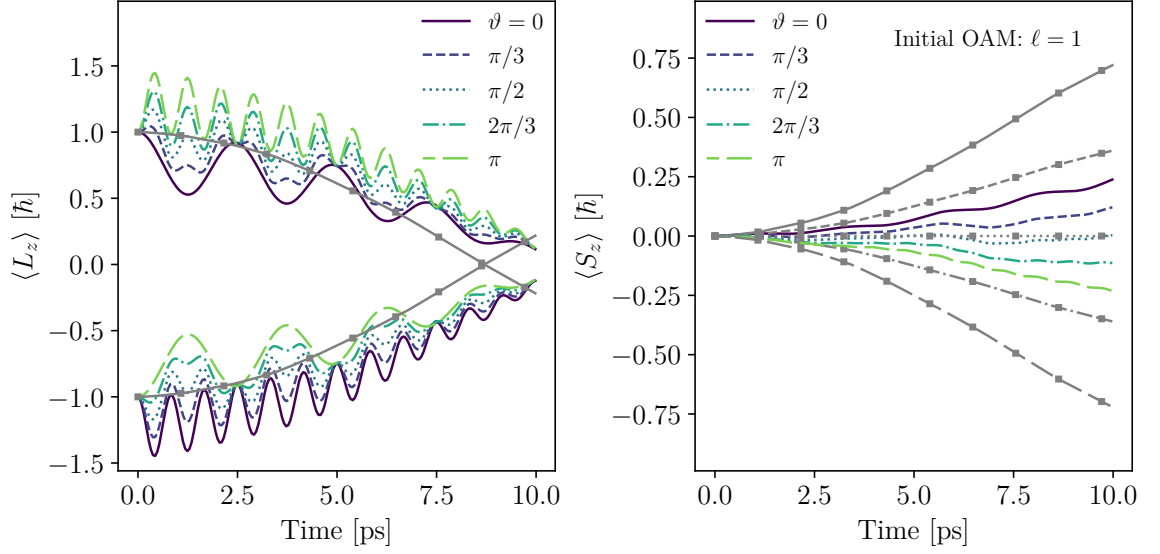


**Figura 5.3:** Autoestados de  $H'_0$  de menor energía y primeros excitados. Por claridad, los estados  $\psi_\ell^\pm(\varphi)$  se notan como  $(\ell, \pm)$ , y sus energías se miden respecto de  $E_0$ . Las flechas curvadas marcan las transiciones de alta energía entre estados de Dresselhaus pertenecientes a un mismo bloque (por ejemplo, para  $\ell = 0$ ,  $\Delta E \approx \sqrt{2}\beta/a \approx 1.58$  meV). Las flechas de guiones indican transiciones de mucha menor energía ( $\Delta E \approx 0.4$  meV) entre estados degenerados perturbados por  $H_{sd}$ . Notemos que  $H_{sd}$  introduce transiciones entre cualquier par de autoestados de  $H'_0$ . Sin embargo, esperamos que los más relevantes a la dinámica sean los que marcamos aquí.

En las condiciones de nuestro sistema, es esperable que la interacción de intercambio induzca transiciones principalmente entre autoestados degenerados de  $H'_0$  degenerados. En la Fig. 5.3 mostramos esquemáticamente las transiciones más relevantes entre los autoestados de  $H'_0$  de más baja energía.

Para comparar con los resultados obtenidos en §5.2, analizaremos el caso en que el electrón comienza en un estado de OAM definido  $|\pm 1\rangle$  y de espín polarizado sobre el plano  $xz$  a distintos ángulos  $0 \leq \vartheta \leq \pi$  respecto del eje del anillo.

En la Fig. 5.4 mostramos la dinámica del OAM y de la magnetización de las impurezas, suponiendo, como siempre, que estas comienzan en el estado isótropo



**Figura 5.4:** Evolución temporal del OAM electrónico y de la magnetización total de las impurezas. El electrón se supone inicialmente en un estado de OAM definido  $|\pm 1\rangle$  y polarización de espín sobre el plano  $xz$  a un ángulo  $\vartheta$  del eje del anillo. Por claridad, sólo se muestran las curvas  $\langle S_z \rangle$  para el caso  $|1\rangle$ . Las impurezas están distribuidas como en las Figs. 5.1a-d. El estado inicial de las impurezas se supone, como siempre, isótropo y de mínima pureza:  $\langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{1}{6} \delta_{n_1 n_2}$ . Las curvas en gris y marcadas con cuadrados corresponden a la dinámica para la misma realización de  $H_{sd}$  y configuración inicial, pero sin SOI.

$\langle P_{n_1 n_2}^I \rangle = \frac{1}{6} \delta_{n_1 n_2}$ . En la dinámica de  $\langle L_z \rangle$  observamos que la SOI introduce oscilaciones de alta frecuencia que perturban notoriamente la tendencia del OAM a cambiar de signo (es decir, la tendencia de la corriente eléctrica  $\langle j_\varphi \rangle \propto \langle L_z \rangle$  a invertir su sentido). Observamos que esta tendencia es similar al caso sin SOI, y proviene mayormente del *scattering* en las impurezas. Estas oscilaciones de alta frecuencia provienen (con un error del orden de  $10^{-2}$ ) de los intercambios rápidos de OAM con SAM electrónico dentro de un mismo subespacio de autoestados  $\{\psi_\ell^+(\varphi), \psi_\ell^-(\varphi)\}$ , y por tanto dependen, como mostramos en la §3.2 (ver definición de  $\hbar\Omega_D \propto |\ell - \sigma|$ ), tanto del OAM como de la polarización de espín iniciales. Cuando la polarización

de espín se halla sobre el eje del anillo ( $\vartheta = 0, \pi$ ), observamos que sólo intervienen las transiciones dentro del bloque definido por el estado  $|\pm 1, \uparrow\rangle$  ( $\vartheta = 0$ ) o  $|\pm 1, \downarrow\rangle$  ( $\vartheta = \pi$ ). En cambio, cuando la polarización se halla fuera del eje ( $0 < \vartheta < \pi$ ), intervienen las transiciones entre autoestados en cada subespacio. Esto último se observa en las curvas en la Fig. 5.4 como superposición de oscilaciones de alta pero distinta frecuencia. En términos generales, entonces, los bloques que intervienen en la dinámica están esencialmente determinados por el estado inicial del electrón. Esta observación es validada, como en el caso de la sección anterior, por el hecho de que, en cada subespacio, la suma de las ocupaciones de los autoestados de  $H'_0$  oscila alrededor de un valor constante con una amplitud del orden de entre  $10^{-4}$  y  $10^{-2}$ .

En las curvas de  $\langle S_z \rangle$  estas transiciones de alta energía tienen una amplitud menor, pues la evolución de esta cantidad está dominada por la interacción de intercambio. Esto se observa especialmente en el caso  $\vartheta = \pi/2$ , en el que la magnetización oscila alrededor de  $\langle S_z \rangle = 0$  con una amplitud de  $10^{-3}\hbar$  debido a la interacción de Dresselhaus que permite al espín del electrón adquirir una polarización fuera del plano del anillo (y, por tanto, magnetizar las impurezas en dirección perpendicular a este).

Tanto la interacción de intercambio como la de Dresselhaus modifican el SAM del electrón, aunque en esta geometría y con este confinamiento, esta última lo hace transfiriéndolo hacia y desde el OAM a un ritmo con el que la de intercambio no puede competir. En definitiva, en el intervalo de tiempo estudiado, el proceso de magnetización se ve obstaculizado por las constantes inversiones del espín, producidas por la SOI, y el proceso de magnetización se ralentiza.



# Capítulo 6

## Conclusiones

En este trabajo hemos estudiado la interacción de un electrón de conducción con un conjunto de impurezas magnéticas en un anillo semiconductor delgado y unidimensional, cuando en éste se halla presente la interacción de espín-órbita de Dresselhaus. En lugar de concentrarnos directamente en este sistema, hemos optado por estudiar primeramente diversos aspectos del sistema sin impurezas. Esto nos permitió comprender mejor la dinámica de transferencia del espín de los electrones a las impurezas, y entender cómo compiten la interacción de intercambio y la interacción espín-órbita. Asimismo, el estudio previo del sistema sin impurezas nos dio mayor seguridad al momento de argumentar las conclusiones sobre el sistema con impurezas, que mencionamos en el último capítulo. Mencionamos aquí algunas de las conclusiones principales a las que hemos llegado en cada parte de este estudio «constructivo».

En el Cap. 2, estudiamos la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo de un electrón de conducción sujeto a las interacciones espín-órbita de Rashba y Dresselhaus en un anillo semiconductor delgado. Dedujimos el Hamiltoniano

total de una dimensión utilizando el método de Meijer *et al.*. Observamos que este problema podía estudiarse usando la teoría de Floquet, y pudimos obtener la forma general de los autoestados y las autoenergías asociadas sin imponer condiciones sobre la intensidad relativa de las constantes de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta$ . Observamos que para valores típicos y no tanto de estos acoplamientos efectivos (ver Tabla 2.1), es posible utilizar formas aproximadas tanto de los autoestados como de las autoenergías, deducidas usando tratamientos perturbativos conocidos (ver §2.5).

En el Cap. 3 comenzamos con la dinámica. Primero, en la §3.2, estudiamos el caso en que sólo una de las dos interacciones espín-órbita está presente y suponiendo que el electrón se hallaba en un estado puro. Observamos que, debido a la conservación del impulso angular total,  $L_z + s_z$ , en el caso de Rashba, o de la cantidad  $L_z - s_z$  en el caso de Dresselhaus, estas interacciones conectan cíclicamente estados que comparten el mismo autovalor de estos operadores. Esto nos permitió llevar la forma matricial del Hamiltoniano a una forma diagonal por bloques de  $2 \times 2$  y obtener explícitamente el operador de evolución temporal en cada caso, lo que nos permitió estimar el impulso angular transferido entre  $L_z$  y  $s_z$ .

Luego, en la §3.3, agregamos el efecto de la interacción restante y notamos que los Hamiltonianos reducidos (los bloques de  $2 \times 2$ ) se enlazaban entre sí (ver Fig. 3.3). A pesar de que las cantidades  $L_z \pm s_z$  ya no se conservan, observamos que el Hamiltoniano total aún podía dividirse en dos bloques inconexos, debido a la persistencia de una simetría de rotación en  $\pi$  alrededor del eje del anillo ( $C_2$ ). Notamos que, para valores típicos de las constantes  $\alpha$  y  $\beta$ , la probabilidad de que el electrón ocupara estados adyacentes (en el sentido de la Fig. 3.3) a su estado inicial era tanto más pequeña cuanto más alejados los primeros se hallaban de este último. Vimos que, en efecto, para un electrón en un estado inicial puro, sólo los primeros

---

tres o cuatro estados adyacentes tenían alguna probabilidad de ser ocupados a tiempos que son del orden de la interacción entre el electrón y las impurezas [78-81, 87].

Finalmente, en la §3.4, relajamos la condición de anillo unidimensional y, siguiendo a Shakouri *et al.*, supusimos que el electrón podía transicionar entre los dos primeros estados radiales de más baja energía. Notamos que las cadenas **A** y **B** de la Fig. 3.3 en este caso se ampliaban, pero sin afectar la simetría  $C_2$  (ver Fig. 3.7). Vimos que, si bien la inclusión del primer nivel radial excitado proporciona una descripción más precisa de la dinámica, esta introduce una complejidad innecesaria para nuestros propósitos, pues la probabilidad de que el electrón ocupe el estado radial excitado es muy pequeña (ver Fig. 3.8).

Habiendo estudiado en detalle el problema del electrón en el anillo sujeto a la interacción espín-órbita, comenzamos, en el Cap. 4, estudiando las generalidades del sistema conformado por el electrón de conducción y un conjunto de impurezas magnéticas que actúan como centros de dispersión fijos con cuyos espines el espín del electrón puede interactuar. Modelamos esta interacción como es usual en la literatura (a través de un Hamiltoniano de contacto tipo Kondo, que conserva el impulso angular total de espín) y dedujimos en la §4.2 el Hamiltoniano unidimensional utilizando la aproximación de Meijer *et al.* a partir del Hamiltoniano en volumen. En la §4.3 dedujimos las ecuaciones de movimiento de Heisenberg para las matrices densidad electrónicas, de impurezas y de primer orden de interacción entre las impurezas y el electrón. Adoptamos un tratamiento en el formalismo de segunda cuantización, distinto al adoptado en los capítulos anteriores, pues este resulta, por un lado, más apropiado para expresar las condiciones iniciales en las que pueden hallarse las impurezas y, por otro, por razones numéricas que vuelven el tratamiento

en otro formalismo numéricamente prohibitivo. El tratamiento en este formalismo reveló, como observamos oportunamente, la existencia de una jerarquía infinita de ecuaciones que, a primer orden fuera de la aproximación de campo medio, acoplan las matrices densidad electrónicas de cada impureza a aquellas que describen interacciones entre pares de impurezas y entre el electrón y dos impurezas distintas. Siguiendo a Thurn y Axt, truncamos esta jerarquía a primer orden, suponiendo que el sistema es diluido y que estas interacciones que involucran más de una impureza no son apreciables. Nuestro análisis numérico de este truncamiento, expuesto en la §4.4, reveló que el truncamiento a primer orden reproduce adecuadamente la dinámica de observables como el impulso angular del electrón y la magnetización de las impurezas en casos simples en que el tratamiento exacto de la ecuación de Schrödinger es factible. Sin embargo, aún en estos casos, la dinámica del sistema truncado no es Hamiltoniana, pues no preserva la semidefinitud positiva de las matrices densidad. En efecto, observamos en la Fig. 4.3 que el menor autovalor de la matriz electrónica se hace negativo tan pronto como se producen unos pocos pasos de integración, excepto en un caso en el que el truncamiento reproduce exactamente el resultado esperado. Esto restringe el rango temporal en que el truncamiento es confiable en casos en que no existe (o no es posible hallar sencillamente) una solución exacta con la cual comparar la aproximada. No obstante, es notable que, aún con este inconveniente, el truncamiento reproduzca las simetrías del sistema y sus efectos en los observables.

Nos adentramos, finalmente, en nuestro objetivo inicial y agregamos al sistema de electrón e impurezas la interacción espín-órbita de Dresselhaus. Optamos por esta interacción, en lugar de la de Rashba, porque, de las dos, es la que depende únicamente de las propiedades del semiconductor, de la geometría y del confinamiento,



---

y no es controlable externamente. Sin embargo, dada la similitud entre las formas funcionales de ambos Hamiltonianos (ver §3.2), esperamos que los resultados con una u otra interacción sean también cualitativamente similares.

Comenzamos, en la §5.2, analizando la dinámica sin interacción espín-órbita cuando el número de impurezas es suficientemente grande para ser físicamente interesante y, a la vez, numéricamente tratable sin recurrir a aproximaciones sobre la ubicación de las impurezas. Estas últimas son necesarias cuando su número es tan grande que resulta conveniente reemplazar la noción de distribución de impurezas por una densidad (homogénea), como sucede en el *bulk*.

Para nuestro tratamiento elegimos un semiconductor particular, el ZnSe, y valores típicos para un anillo delgado. Los parámetros para este material son similares en otros materiales para nuestra geometría, por lo que es esperable que los resultados obtenidos en este caso sean representativos de estos otros. Vimos que la interacción de intercambio es comparativamente pequeña frente a la escala de energía de los estados acimutales del electrón en el anillo, por lo que la dinámica de éste (y, por tanto, la de transferencia de impulso angular de espín hacia y desde las impurezas) queda concentrada en un subespacio de Hilbert compuesto por estados electrónicos que, en ausencia de toda interacción, serían degenerados. Notamos, además, que la distribución de impurezas no altera notoriamente la ocupación total de los niveles de impulso angular orbital definido (y, por tanto, no afecta notoriamente la dinámica de éste), pero sí impacta en la dinámica de transferencia de impulso angular de espín, a pesar de que este impacto no se perciba en los resultados, debido a las restricciones metodológicas antes mencionadas.

Finalmente, en la §5.3 agregamos la interacción de Dresselhaus y observamos que, debido al confinamiento, esta era del orden de la escala de energía de los

estados acimutales de la banda libre. Esto, y el conocimiento adquirido en el Cap. 3, nos permitió abordar el problema como lo hicimos en la §5.2. Observamos, como esperábamos, que la interacción de intercambio sólo conecta estados de Dresselhaus degenerados, y que la dinámica del electrón, como antes, queda confinada al subespacio definido por éstos. Dedujimos, por tanto, que la dinámica en casos más generales, cuando el espín del electrón comienza polarizado fuera del eje del anillo, puede estudiarse teniendo en cuenta únicamente los bloques de Dresselhaus que intervienen en la descomposición de este estado inicial. Notamos que la presencia de la interacción de Dresselhaus obstaculiza notoriamente la transferencia de espín de los electrones a las impurezas, debido a la preeminencia, en el caso estudiado, de las transiciones entre estados de un mismo bloque, que provocan una inversión del espín a una frecuencia mucho más alta de la asociada a la transferencia de impulso angular entre el electrón y las impurezas. Si vemos al electrón como nuestra fuente de impulso angular para magnetizar a las impurezas, notamos que la interacción de Dresselhaus desvía, en cierta forma, este recurso. Creemos que incrementar el número de impurezas modificaría estos resultados, pues permitiría a la interacción de intercambio competir con la de Dresselhaus. Sin embargo, enfatizamos que, esto requeriría aplicar una aproximación adicional al esquema de truncamiento utilizado. Incluir la interacción de Rashba es otro camino a explorar, pues la posibilidad de controlarla externamente permitiría incluir una dependencia temporal en el Hamiltoniano, o bien, como vimos en la §3.3, involucraría en la dinámica otros bloques de Dresselhaus no presentes en la descomposición del estado electrónico inicial. Esto, sin duda, volvería la dinámica más rica e interesante.

Dejamos estas opciones como caminos a explorar en trabajos futuros, como así también estudiar la posibilidad de paliar, evitar o hallar una solución numéricamente

---

viable al problema hallado en el método de truncamiento.



# Lista de trabajos publicados

- J. M. Lia y P. I. Tamborenea, *Narrow quantum rings with general Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions*, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **126**, 114419 (2021).
- J. M. Lia, P. I. Tamborenea, M. Cygorek y M. Axt, *Dynamics of the angular momentum in narrow quantum rings with Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions*, Phys. Rev. B **105**, 115426 (2022).
- J. M. Lia y P. I. Tamborenea, *Angular momentum dynamics in DMS quantum rings driven by Dresselhaus spin-orbit and  $s-d$  exchange interactions*. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **164**, 116043 (2024).
- J. M. Lia y P. I. Tamborenea, *Case study of the validity of truncation schemes of kinetic equations of motion: few magnetic impurities in a semiconductor quantum ring*, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **608**, 172438 (2024).



# Apéndice A

## Anillo delgado

En este apéndice detallamos las justificaciones que sostienen algunos de los resultados utilizados en el Capítulo 2. Las derivaciones completas y formales pueden hallarse en las referencias ya citadas.

### Inversión temporal del Hamiltoniano efectivo

La operación de inversión temporal usualmente se define a través de la acción de un operador  $\Theta$  sobre otros operadores (asociados a observables) del sistema [40]. Las que aquí necesitamos son las siguientes:

$$\begin{aligned}\Theta \mathbf{p} \Theta^{-1} &= -\mathbf{p} \\ \Theta \mathbf{s} \Theta^{-1} &= -\mathbf{s}.\end{aligned}\tag{A.1}$$

La última de ellas se verifica para partículas de espín semientero, como el electrón de nuestro caso. En particular, cuando se trata de fermiones de espín 1/2, esta relación conduce a una forma explícita para  $\Theta$  cuando este actúa sobre el observable

$\mathbf{s}$  [40],

$$\Theta = \eta \sigma_y C. \quad (\text{A.2})$$

En esta fórmula,  $\eta$  es una fase constante,  $|\eta| = 1$ ,  $\sigma_y$  es la conocida matriz de Pauli, y  $C$  el operador de conjugación, que actúa sobre un escalar, un vector o una matriz conjugando sus componentes. De estas relaciones se observa que el término de energía cinética en  $H_\varphi$  es invariante ante la acción de  $\Theta$ , y que los términos provenientes de  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{s}$  también lo son, pues los signos que ambos introducen al conmutar con  $\Theta$  se cancelan mutuamente.

## Propiedades de $U(\varphi, 0)$

Por analogía con su par temporal de la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, el operador  $U(\varphi, 0)$  puede escribirse como una serie cuyos términos derivan de integrar sucesivamente (esto es, «por partes») una propuesta de solución a la ec. (2.14). Esta serie —conocida como *serie de Dyson* [40, 50]— habitualmente se expresa de forma compacta a través del operador exponencial y de un operador  $\mathcal{T}$  que tiene en cuenta el orden en que debe realizarse la integración a fin de respetar la relación (2.16) [40]:

$$U(\varphi, 0) = \mathcal{T}_\varphi \exp \left( \frac{1}{2E_0} \int_0^\varphi F(\varphi) \, d\varphi \right) \quad (\text{A.3})$$

El operador  $\mathcal{T}$  toma usualmente el nombre de *operador de ordenamiento temporal* y aquí refiere a la variable angular  $\varphi$ . Notemos que esta expresión garantiza que  $U(0, 0)$  sea el operador identidad. Puesto que la operación de conjugación hermitiana no interfiere con el orden de integración (pues  $\varphi$  es siempre real), es posible observar a



---

partir de esta serie, o de su expresión compacta, que  $U(\varphi, 0)$  es unitario si  $F(\varphi)$  es antihermitiano.

El determinante de  $U(\varphi, 0)$  se obtiene a partir de la fórmula de Liouville [43]:

$$\det U(\varphi, 0) = \exp \int_0^\varphi \text{tr} F(\varphi') d\varphi' = 1, \quad (\text{A.4})$$

y es independiente de  $\varphi$ , pues la traza de  $F(\varphi)$  es nula para todo  $\varphi$ . Nuevamente, esto es consecuencia de las propiedades de las matrices de Pauli que componen este operador, pues  $\text{tr} \sigma_i = 0$ , ( $i = x, y, z$ ).

Así, en todo el anillo  $U(\varphi, 0)$  es unitario y su determinante es la unidad, y admite además una representación matricial de  $2 \times 2$ , pues opera sobre espinores de espín 1/2. Estas tres propiedades convierten a este operador en un elemento del grupo  $SU(2)$  [60]. Los autovalores de  $U(2\pi, 0)$  satisfacen, entonces,

$$\det U(2\pi, 0) = \rho_+ \rho_- = |\rho_\pm| = 1; \quad (\text{A.5})$$

y sus autovectores asociados son ortonormales,

$$\chi_s^\dagger(0) \chi_{s'}(0) = \delta_{ss'} \quad (s, s' = \pm), \quad (\text{A.6})$$

pues, por ser unitaria,  $U(2\pi, 0)$  es diagonalizable. De aquí se deduce que los espinores  $\chi_\pm(\varphi)$  son ortonormales punto a punto en el anillo, ya que

$$\chi_s^\dagger(\varphi) \chi_{s'}(\varphi) = \chi_s^\dagger(0) U^\dagger(\varphi, 0) U(\varphi, 0) \chi_{s'}(0) = \delta_{ss'}. \quad (\text{A.7})$$

## Ortonormalidad de las funciones de Mathieu

Las funciones de Mathieu de orden entero son ortogonales en el intervalo que cubre el anillo [45]. Las de orden no entero también lo son en el mismo intervalo

pero por extensión, ya que satisfacen, si  $\nu$  es real [45],

$$\int_0^\pi \text{me}_{\nu+2n}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+2m}(\varphi) \, d\varphi = \pi \delta_{nm}; \quad (\text{A.8})$$

siendo aquí  $n$  y  $m$  números enteros. En el intervalo  $0 \leq \varphi \leq \pi$ , esta relación requiere que la diferencia entre los órdenes de las funciones involucradas sea par. Si extendemos el intervalo de  $\varphi$  a todo el anillo, se hace posible incluir las funciones cuyos órdenes difieran en un número entero, independientemente de su paridad. Para ver esto, notemos que

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \text{me}_{\nu+m}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+n}(\varphi) \, d\varphi = \\ & \int_0^\pi \text{me}_{\nu+m}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+n}(\varphi) \, d\varphi + \int_\pi^{2\pi} \text{me}_{\nu+m}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+n}(\varphi) \, d\varphi = \\ & \int_0^\pi \text{me}_{\nu+m}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+n}(\varphi) \, d\varphi + \int_0^\pi \text{me}_{\nu+m}^*(x+\pi) \text{me}_{\nu+n}(x+\pi) \, dx = \\ & (1 + e^{i(n-m)\pi}) \int_0^\pi \text{me}_{\nu+m}^*(\varphi) \text{me}_{\nu+n}(\varphi) \, d\varphi \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

En el último paso hemos utilizado la propiedad mencionada en la ec. (2.21). La ortogonalidad entre las funciones propuestas depende, como antes, de la diferencia  $n - m$ . Si esta es par, entonces estamos en el caso conocido (A.8). Si, en cambio, la diferencia es impar, se anula el factor que acompaña a la integral, aunque esta última pueda tomar un valor no nulo.

## Convergencia de la serie de Magnus

La convergencia de la serie que describe perturbativamente al operador  $\Omega(\varphi)$  que consideramos en §2.5 depende, naturalmente, del «Hamiltoniano»  $iF(\varphi)/2E_0$  que rige la ec. (2.14). Blanes *et al.* [50] proveen el siguiente criterio para decidir

---

sobre la convergencia de esta serie en el intervalo  $0 \leq \varphi \leq \varphi'$ :

$$\frac{1}{2E_0} \int_0^{\varphi'} \|F(\varphi)\|_2 \, d\varphi < \pi. \quad (\text{A.10})$$

Si bien en la §2.4 no hemos impuesto restricciones sobre el intervalo en el cual toma valores  $\varphi$ , para aplicar este criterio supondremos razonablemente que este cubre al anillo sólo una vez; es decir, tomaremos  $0 \leq \varphi < 2\pi$ .

La norma espectral  $\|F(\varphi)\|_2$  queda determinada por las constantes de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta$  a través del radio espectral de  $F(\varphi)$ ,  $\rho[F(\varphi)]$  [88], que puede acotarse:

$$\|F(\varphi)\|_2 = \sqrt{\rho[F^\dagger(\varphi)F(\varphi)]} = \sqrt{\rho[F^2(\varphi)]} \leq \frac{1}{a}|\alpha + \beta|. \quad (\text{A.11})$$

Si consideramos que estos valores típicamente son los de la tabla (2.1), y tomamos para uno de los parámetros el mayor de los que allí listamos (0.181 meV nm para el InAs, en las condiciones dadas en el epígrafe de la tabla), observamos que

$$\frac{1}{2E_0} \int_0^{2\pi} \|F(\varphi)\|_2 \, d\varphi \leq 2\pi|\bar{\alpha} + \bar{\beta}| \leq 4\pi \max\{|\bar{\alpha}|, |\bar{\beta}|\} \approx 0.724\pi < \pi. \quad (\text{A.12})$$



# Apéndice B

## Dinámica en el anillo

En este apéndice detallamos las operaciones que dan lugar a algunas de las conclusiones mencionadas en el Capítulo 3.

### Conservación de $J_z$ y $L_z - s_z$

Nuestro objetivo es mostrar que  $[H_R, J_z] = [H_R, L_z + s_z] = [H_D, L_z - s_z] = 0$ , donde  $H_R$  y  $H_D$  son los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus que presentamos en la ec. 3.2.

Notemos que  $[L_z, s_z] = [L_z, \sigma_{\pm}] = 0$ . Para obtener las igualdades buscadas, basta, entonces, con calcular  $[p_{\pm}, L_z]$  y  $[\sigma_{\pm}, s_z]$ , y mostrar que  $[H_R, L_z] = -[H_R, s_z]$  y que  $[H_D, L_z] = [H_D, s_z]$ . No es difícil obtener la relación  $[\sigma_{\pm}, s_z] = \mp \sigma_{\pm}$  manualmente, por lo que sólo mostraremos en lo que sigue el cálculo de los conmutadores  $[p_{\pm}, L_z]$ . Repetimos aquí, por claridad, la forma general de los primeros, que presentamos en la ec. 2.3:

$$p_{\pm} = -i\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r} \partial_{\varphi} \right). \quad (\text{B.1})$$

Puesto que  $L_z = -i\hbar\partial_\varphi$ , los conmutadores  $[p_\pm, \partial_\varphi] = i\hbar^{-1}[p_\pm, L_z]$  resultan:

$$\begin{aligned}
 [p_\pm, \partial_\varphi] &= p_\pm\partial_\varphi + i\hbar \left( \pm ie^{\pm i\varphi} + e^{\pm i\varphi}\partial_\varphi \right) \left( \partial_r \pm \frac{i}{r}\partial_\varphi \right) \\
 &= p_\pm\partial_\varphi + \mp\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r}\partial_\varphi \right) + i\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r}\partial_\varphi \right) \partial_\varphi \\
 &= p_\pm\partial_\varphi + \mp\hbar e^{\pm i\varphi} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r}\partial_\varphi \right) - p_\pm\partial_\varphi = \mp ip_\pm.
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

De este resultado y del deducido para el conmutador  $[\sigma_\pm, s_z]$ , observamos que:

$$\begin{aligned}
 [H_R, L_z] &= i\frac{\alpha}{\hbar} ([p_-, L_z]\sigma_+ - [p_+, L_z]\sigma_-) = i\alpha(p_-\sigma_+ + p_+\sigma_-) \\
 &= -i\alpha(p_-(-\sigma_+) - p_+\sigma_-) = -i\alpha(p_-[\sigma_+, s_z] - p_+[\sigma_-, s_z]) \\
 &= -[H_R, s_z].
 \end{aligned} \tag{B.3}$$

Y, de forma similar, obtenemos:

$$\begin{aligned}
 [H_D, L_z] &= \frac{\beta}{\hbar} ([p_+, L_z]\sigma_+ + [p_-, L_z]\sigma_-) = \beta(p_-\sigma_- - p_+\sigma_+) \\
 &= \beta(p_-\sigma_- + p_+(-\sigma_+)) = \beta(p_-[\sigma_-, s_z] + p_+[\sigma_+, s_z]) \\
 &= [H_R, s_z].
 \end{aligned} \tag{B.4}$$

## Independencia de $\langle s_z(t) \rangle$ respecto de $|\ell|$

Consideremos un estado arbitrario  $|\psi\rangle$  de la forma dada en la ec. (3.11) y perteneciente a un sistema de dos niveles de autovalor  $L_z + s_z$  constante. El mismo argumento puede aplicarse para un estado del mismo tipo pero de autovalor  $L_z - s_z$  constante. El operador de evolución temporal es el correspondiente al caso de Rashba,  $U_R(t, t_0)$ , y su forma es la presentada en la ec. (3.9). El estado del electrón a tiempo  $0 \leq t$  es  $|\psi(t)\rangle = U_R(t, 0)|\psi\rangle$ , y el valor de expectación del operador  $s_z$

---

sobre este último es:

$$\begin{aligned}
\langle \psi(t) | s_z | \psi(t) \rangle &= \langle \psi | s_z | \psi \rangle \cos^2(\Omega_R t) \\
&+ \langle \psi | i\Omega_R^{-1} [\mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma}, s_z] | \psi \rangle \cos(\Omega_R t) \sin(\Omega_R t) \\
&+ \Omega_R^{-2} \langle \psi | \mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma} s_z \mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma} | \psi \rangle \sin^2(\Omega_R t).
\end{aligned} \tag{B.5}$$

A partir de la ec. B.5 se deduce que  $\langle \psi(t) | s_z | \psi(t) \rangle$  alcanza sus extremos para valores de  $\Omega_R t$  que satisfacen la condición:

$$\begin{aligned}
\tan(2\Omega_R t) &= \frac{\langle \psi | i\Omega_R^{-1} [\mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma}, s_z] | \psi \rangle}{\langle \psi | s_z | \psi \rangle - \Omega_R^{-2} \langle \psi | \mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma} s_z \mathbf{n}_R \cdot \vec{\sigma} | \psi \rangle} \\
&= \frac{\langle \psi | \sigma_y | \psi \rangle \hbar \sqrt{\omega_0^2 + \omega_R^2}}{2\omega_R \langle \psi | s_z | \psi \rangle + \hbar \omega_0 \langle \psi | \sigma_z | \psi \rangle} \frac{\ell + 1/2}{|\ell + 1/2|}
\end{aligned} \tag{B.6}$$

Notemos que, si  $\ell \neq 0$ , el término del lado derecho depende únicamente del signo de  $\ell$ , que coincide con el de  $\ell + 1/2$ . Esta dependencia proviene del numerador, y no se traslada al valor de  $\langle \psi(t) | s_z | \psi(t) \rangle$  cuando se insertan en la expresión de la ec. (B.5) los valores de  $2\Omega_R t$  obtenidos al invertir la relación (B.6). La elección de un  $\ell$  particular modifica la ubicación de los extremos, pues modifica la frecuencia  $\Omega_R$ , pero no la amplitud que alcanza  $\langle \psi(t) | s_z | \psi(t) \rangle$  en ellos.





# Apéndice C

## Interacción entre electrones e impurezas sin SOI

En este apéndice desarrollaremos dos cálculos: el primero nos permitirá justificar la posibilidad de incluir las correlaciones  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$  en el sistema de ecuaciones de Heisenberg truncadas, sin que esto extienda la jerarquía más allá de matrices densidad de dos y tres partículas. El segundo, en cambio, justifica el hecho de que la dinámica de todas las impurezas es idéntica cuando se dan conjuntamente las condiciones de que, primero, estas se distribuyen sobre el anillo formando un polígono regular de  $N_{\text{Mn}}$  lados; segundo, adoptan el mismo estado puro inicial; y tercero, el electrón comienza polarizado y en un autoestado de OAM definido:  $|\ell, \sigma\rangle$ .

## Inclusión de las correlaciones $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$

Las ecuaciones de Heisenberg para las cantidades  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$  solamente involucran conmutadores de la forma  $[P^I P^{I'}, P^{I''}]$ . Estos conmutadores generan términos proporcionales a  $P^I P^{I'}$ , como puede verse de la definición de las  $P^I$  dada en la ec. (4.4). La evolución temporal de cada  $\langle P^I P^{I'} \rangle$  ( $I \neq I'$ ), depende, en consecuencia, únicamente de matrices densidad de tres partículas  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$ . Por tanto, no es necesario despreciar el término  $\delta\langle P^I P^{I'} \rangle$  ( $I \neq I'$ ) en la expansión de  $\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$  dada en la ec. (4.10). En consecuencia, agregar la dinámica de  $\langle P^I P^{I'} \rangle$  al conjunto de ecuaciones truncadas no requiere expandir este a matrices densidad de más de tres partículas. Dicho de otro modo, para truncar la jerarquía en este caso sólo es necesario despreciar en  $Q^I$  las correlaciones  $\delta\langle c_{\ell_1\sigma_1}^\dagger c_{\ell_2\sigma_2} P^I P^{I'} \rangle$ . Notemos, finalmente, que los operadores  $P^I$  conmutan con cualquier operador electrónico  $c_{\ell\sigma}$ , por lo que la dinámica de los mismos es generada únicamente por el Hamiltoniano de *exchange*  $H_{sd}$ .

## Dinámica acompañada de las impurezas

Supongamos que las impurezas están ubicadas en los vértices de un polígono regular de  $N_{\text{Mn}}$  lados y consideremos una rotación  $R$  del grupo de simetría de este polígono regular. La operación  $RHR^\dagger$  sobre el Hamiltoniano total no afecta los operadores escalares  $H_0$  y  $\mathbf{S}_I \cdot \mathbf{s}$  en  $H$ , pero sí traslada los argumentos de los potenciales delta de Dirac en un múltiplo de  $2\pi/N_{\text{Mn}}$ . Esta traslación sobre el anillo es cíclica, y es equivalente a una permutación cíclica de las impurezas que las reubica en distintos vértices del mismo polígono, pues la operación mueve los

---

$\varphi_I$  a otros  $\varphi_{I'}$  (módulo  $2\pi$ ).

El Hamiltoniano rotado puede, obtenerse, por tanto, a través de esta permutación equivalente, que modifique los índices de las impurezas en  $H$ , sin trasladar los argumentos de los potenciales tipo delta. En otras palabras, la operación  $RHR^\dagger$  es equivalente a  $\hat{O}_R H \hat{O}_R^\dagger$  para algún  $\hat{O}_R$  que cambie las «etiquetas» de  $\mathbf{S}_I$  sin afectar los parámetros  $\varphi_I$ .

El operador de permutación  $\hat{O}_R$  puede expresarse como composición (producto) de operaciones de permutación de a pares, que sólo intercambian dos impurezas. Definimos estos operadores como:

$$\hat{O}_{II'} \doteq \sum_{n_1 n_2} P_{n_1 n_2}^I P_{n_2 n_1}^{I'}. \quad (\text{C.1})$$

Notemos que  $\hat{O}_{II'} = \hat{O}_{I'I} = \hat{O}_{II'}^{-1}$ , como es requerido.

Con estas herramientas, descompongamos la rotación  $R$  en un producto de dos rotaciones:  $R = R_{\text{OAM}} R_{\text{SAM}}$ . El primer factor a la izquierda actúa sobre el OAM del electrón, y por tanto depende únicamente de  $L_z$ , mientras que el segundo actúa solamente sobre el SAM total del espín y de las impurezas. Consideremos, ahora, el estado  $|\psi\rangle = |\ell, \sigma\rangle |\text{Mn}\rangle \cdots |\text{Mn}\rangle$ . En este, como siempre,  $|\ell, \sigma\rangle$  es un autoestado de los operadores electrónicos  $L_z$  y  $s_z$ , con autovalores  $\ell$  y  $\sigma$ , respectivamente; y  $|\text{Mn}\rangle$  es un estado de una impureza, repetido  $N_{\text{Mn}}$  veces en el producto. Observemos que  $|\psi\rangle$  es un autoestado de  $R_{\text{OAM}}$  y de  $\hat{O}_R$  para cualquier rotación  $R$ , pues intercambiar cualquier par de  $|\text{Mn}\rangle$  en  $|\psi\rangle$  no modifica este último.

Llamemos  $U(t, t_0)$  al operador de evolución temporal y  $S_z^I$  la componente  $z$  del

operador  $\mathbf{S}_I$  en el *picture* de Schrödinger. Podemos escribir, entonces:

$$\begin{aligned}
\langle \psi | U^\dagger S_z^I U | \psi \rangle &= \langle \psi | \hat{O}_R^\dagger R U^\dagger R^\dagger \hat{O}_R S_z^I \hat{O}_R^\dagger R U R^\dagger \hat{O}_R | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | R_{\text{SAM}}^\dagger U^\dagger S_z^{I'} U R_{\text{SAM}} | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | R_{\text{SAM}}^\dagger U^\dagger S_z^{I'} U R_{\text{SAM}} | \psi \rangle \\
&= \langle \psi | U^\dagger S_z^{I'} U | \psi \rangle
\end{aligned} \tag{C.2}$$

En esta expresión hemos omitido, por simplicidad, la dependencia temporal de  $U(t, t_0)$ . La segunda igualdad del miembro derecho es consecuencia, por un lado, de que el operador  $S_z^I$  conmuta con cualquier rotación  $R$  paralela al eje del anillo:  $[S_z, R] = 0$ ; y, por otro, de que la operación  $\hat{O}_R$  modifica el índice de  $S_z^I$ , y por tanto traduce este operador en otro  $S_z^{I'}$ , para algún par  $(I, I')$  ( $I \neq I'$ ), esto es:  $\hat{O}_R^\dagger S_z^I \hat{O}_R = S_z^{I'}$ . La cuarta igualdad, en cambio, se sigue del hecho de que el operador  $H$  es un operador escalar frente a cualquier rotación que involucre al espín total, por lo que  $[H, R_{\text{SAM}}] = 0$ .

# Bibliografía

- [1] G. F. Quinteiro y P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **82**, 125207 (2010).
- [2] G. F. Quinteiro Rosen, P. I. Tamborenea y T. Kuhn, Rev. Mod. Phys. **94**, 035003 (2022).
- [3] G. F. Quinteiro y P. I. Tamborenea, Phys. Rev. B **79**, 155450 (2009).
- [4] G. F. Quinteiro, D. E. Reiter y T. Kuhn, Journal of Physics: Conference Series **906**, 012014 (2017).
- [5] G. F. Quinteiro, P. I. Tamborenea y J. Berakdar, Opt. Express **19**, 26733 (2011).
- [6] G. F. Quinteiro y J. Berakdar, Opt. Express **17**, 20465 (2009).
- [7] G. F. Quinteiro, C. T. Schmiegelow, D. E. Reiter y T. Kuhn, Phys. Rev. A **99**, 023845 (2019).
- [8] C. T. Schmiegelow, J. Schulz, H. Kaufmann, T. Ruster, U. G. Poschinger y F. Schmidt-Kaler, Nature Communications **7**, 12998 (2016).
- [9] R. J. Hernández-Hernández, R. A. Terborg, I. Ricardez-Vargas y K. Volke-Sepúlveda, Appl. Opt. **49**, 6903 (2010).

- [10] M. S. Soskin, V. N. Gorshkov, M. V. Vasnetsov, J. T. Malos y N. R. Heckenberg, *Phys. Rev. A* **56**, 4064 (1997).
- [11] G. Molina-Terriza, J. P. Torres y L. Torner, *Nature Physics* **3**, 305 (2007).
- [12] J. K. Furdyna, *Journal of Applied Physics* **64**, R29 (1988).
- [13] T. Dietl y H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
- [14] K. Sato, L. Bergqvist, J. Kudrnovský, P. H. Dederichs, O. Eriksson, I. Turek, B. Sanyal, G. Bouzerar, H. Katayama-Yoshida, V. A. Dinh, T. Fukushima, H. Kizaki y R. Zeller, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 1633 (2010).
- [15] J. A. Gaj y J. Kossut, «Basic Consequences of sp-d and d-d Interactions in DMS», en *Introduction to the Physics of Diluted Magnetic Semiconductors*, ed. por J. A. Gaj y J. Kossut (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010), págs. 1-36.
- [16] R. Winkler, *Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, 1.<sup>a</sup> ed., vol. 191 (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2003).
- [17] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [18] Y. Bychkov y É. Rashba, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **39**, 78 (1984).
- [19] P. Yu y M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors*, 4.<sup>a</sup> ed., Graduate Texts in Physics (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010).
- [20] H. Ibach y H. Lüth, *Solid-State Physics*, 4.<sup>a</sup> ed., Advanced Texts in Physics (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009).
- [21] N. Ashcroft y N. Mermin, *Solid-State Physics* (Harcourt College Publishers, 1976).

- 
- [22] M. Willatzen y L. C. L. Y. Woon, *The  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  Method*, 1.<sup>a</sup> ed. (Springer Berlin, Heidelberg, 2009).
- [23] E. O. Kane, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **1**, 249 (1957).
- [24] R. Winkler, *Phys. Rev. B* **62**, 4245 (2000).
- [25] G. L. Bir y G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, New York, 1974).
- [26] F. Malcher, G. Lommer y U. Rössler, *Superlattices and Microstructures* **2**, 267 (1986).
- [27] R. Eppenga y M. F. H. Schuurmans, *Phys. Rev. B* **37**, 10923 (1988).
- [28] O. Madelung, «II-VI compounds», en *Semiconductors: Data Handbook* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004), págs. 173-244.
- [29] O. Madelung, «III-V compounds», en *Semiconductors: Data Handbook* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2004), págs. 71-172.
- [30] T. Dietl, *Nature Materials* **9**, 965 (2010).
- [31] J. A. Gaj y J. Kossut, eds., *Introduction to the Physics of Diluted Magnetic Semiconductors* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010).
- [32] H. Munekata, H. Ohno, S. von Molnar, A. Segmüller, L. L. Chang y L. Esaki, *Phys. Rev. Lett.* **63**, 1849 (1989).
- [33] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. von Molnár y L. L. Chang, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2664 (1992).
- [34] A. Fert, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 1517 (2008).
- [35] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. N. Van Dau, F. Petroff, P. Etienne, G. Creuzet, A. Friederich y J. Chazelas, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2472 (1988).

- [36] G. Binasch, P. Grünberg, F. Saurenbach y W. Zinn, *Phys. Rev. B* **39**, 4828 (1989).
- [37] I. A. Merkulov y A. V. Rodina, «Exchange Interaction Between Carriers and Magnetic Ions in Quantum Size Heterostructures», en *Introduction to the Physics of Diluted Magnetic Semiconductors*, ed. por J. A. Gaj y J. Kossut (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010), págs. 65-101.
- [38] J. Kondo, *Progress of Theoretical Physics* **32**, 37 (1964).
- [39] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo y T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **66**, 033107 (2002).
- [40] J. J. Sakurai y J. Napolitano, *Modern Quantum Mechanics*, 2.<sup>a</sup> ed. (Pearson Education, 2011).
- [41] D. Frustaglia y K. Richter, *Phys. Rev. B* **69**, 235310 (2004).
- [42] B. Berche, C. Chatelain y E. Medina, *European Journal of Physics* **31**, 1267 (2010).
- [43] C. Chicone, *Ordinary Differential Equations with Applications*, 2.<sup>a</sup> ed., vol. 34, Texts in Applied Mathematics (Springer-Verlag New York, 2006).
- [44] J. H. Shirley, *Phys. Rev.* **138**, B979 (1965).
- [45] G. Wolf, en *NIST Handbook of Mathematical Functions*, ed. por F. Olver, D. Lozier, R. Boisvert y C. Clark (Cambridge University Press, 2010).
- [46] N. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions*, 1.<sup>a</sup> ed. (Clarendon, 1951).



- [47] F. M. Arscott, *Periodic Differential Equations. An Introduction to Mathieu, Lamé, and Allied Functions*. Vol. 66, International Series of Monographs in Pure and Applied Mathematics (Pergamon Press, The Macmillan Co., New York, 1964).
- [48] T. Campos, P. E. Faria Junior, M. Gmitra, G. M. Sipahi y J. Fabian, *Phys. Rev. B* **97**, 245402 (2018).
- [49] K. Shakouri, B. Szafran, M. Esmailzadeh y F. M. Peeters, *Phys. Rev. B* **85**, 165314 (2012).
- [50] S. Blanes, F. Casas, J. Oteo y J. Ros, *Physics Reports* **470**, 151 (2009).
- [51] S. Blanes, F. Casas, J. Oteo y J. Ros, *European Journal of Physics* **31**, 907 (2010).
- [52] E. Tsitsishvili, G. S. Lozano y A. O. Gogolin, *Phys. Rev. B* **70**, 115316 (2004).
- [53] V. M. Fomin, *Physics of Quantum Rings*, NanoScience and Technology (Springer, 2014).
- [54] X. W. Zhang y J. B. Xia, *Phys. Rev. B* **74**, 075304 (2006).
- [55] K. Takase, Y. Ashikawa, G. Zhang, K. Tateno y S. Sasaki, *Scientific Reports* **7**, 930 (2017).
- [56] D. Liang y X. P. Gao, *Nano Letters* **12**, PMID: 22545669, 3263 (2012).
- [57] A. Wolos, Z. Wilamowski, C. Skierbiszewski, A. Drabinska, B. Lucznik, I. Grzegory y S. Porowski, *Physica B: Condensed Matter* **406**, 2548 (2011).
- [58] M. A. U. Absor, H. Kotaka, F. Ishii y M. Saito, *Applied Physics Express* **7**, 053002 (2014).

- [59] J. Lia y P. Tamborenea, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **126**, 114419 (2021).
- [60] M. Le Bellac, *Quantum Physics*, ed. por P. d. Forcrand-Millard (Cambridge University Press, 2006).
- [61] J. Schliemann, J. C. Egues y D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [62] M. P. Nowak y B. Szafran, *Phys. Rev. B* **80**, 195319 (2009).
- [63] M. Wu, J. Jiang y M. Weng, *Physics Reports* **493**, 61 (2010).
- [64] A. N. Chantis, M. Cardona, N. E. Christensen, D. L. Smith, M. van Schilfgaarde, T. Kotani, A. Svane y R. C. Albers, *Phys. Rev. B* **78**, 075208 (2008).
- [65] L. E. Ballentine, *Quantum Mechanics*, 1.<sup>a</sup> ed. (Simon Fraser University, 2000).
- [66] M. Tinkham, *Group Theory and Quantum Mechanics*, 1.<sup>a</sup> ed. (Dover Publications, 1964).
- [67] G. A. Intronati, «Relajación de espín en semiconductores dopados y nanoestructuras semiconductoras», Tesis de Doctorado (Universidad de Buenos Aires, 2013).
- [68] C. Romano, «Relajación de espín en puntos cuánticos acoplados cuasi-unidimensionales», Tesis de Doctorado (Universidad de Buenos Aires, 2008).
- [69] E. Zipper, M. Kurpas, J. Sadowski y M. M. Maška, *Journal of Physics: Condensed Matter* **23**, 115302 (2011).
- [70] X. R. Wang, Y. S. Zheng y S. Yin, *Phys. Rev. B* **72**, 121303 (2005).
- [71] J. Fischer, M. Trif, W. Coish y D. Loss, *Solid State Communications* **149**, Fundamental Phenomena and Applications of Quantum Dots, 1443 (2009).

- [72] M. Schlosshauer, *Physics Reports* **831**, Quantum decoherence, 1 (2019).
- [73] G. E. Murgida, D. A. Wisniacki y P. I. Tamborenea, *Phys. Rev. B* **79**, 035326 (2009).
- [74] G. F. Koster, J. Dimmock, R. G. Wheeler y H. Satz, *The Properties of the Thirty-two Point Groups* (MIT Press, Cambridge, 1964).
- [75] A. W. Joshi, *Elements of Group Theory for Physicists* (John Wiley & Sons, 1968).
- [76] A. Lorke, R. Johannes Luyken, A. O. Govorov, J. P. Kotthaus, J. M. Garcia y P. M. Petroff, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 2223 (2000).
- [77] T.-C. Lin, C.-H. Lin, H.-S. Ling, Y.-J. Fu, W.-H. Chang, S.-D. Lin y C.-P. Lee, *Phys. Rev. B* **80**, 081304 (2009).
- [78] C. Thurn y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **85**, 165203 (2012).
- [79] M. K. Kneip, D. R. Yakovlev, M. Bayer, A. A. Maksimov, I. I. Tartakovskii, D. Keller, W. Ossau, L. W. Molenkamp y A. Waag, *Phys. Rev. B* **73**, 035306 (2006).
- [80] T. Dietl, P. Peyla, W. Grieshaber e Y. M. d'Aubigné, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 474 (1995).
- [81] B. König, I. A. Merkulov, D. R. Yakovlev, W. Ossau, S. M. Ryabchenko, M. Kutrowski, T. Wojtowicz, G. Karczewski y J. Kossut, *Phys. Rev. B* **61**, 16870 (2000).
- [82] R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
- [83] T. Chakraborty y P. Pietiläinen, *Phys. Rev. B* **50**, 8460 (1994).

- [84] P. Mike, L. Z. Szabó y P. Földi, *Journal of Russian Laser Research* **39**, 465 (2018).
- [85] F. Ungar, M. Cygorek, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **91**, 195201 (2015).
- [86] F. Ungar, M. Cygorek, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Journal of Physics: Conference Series* **647**, 012010 (2015).
- [87] M. Cygorek, F. Ungar, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **95**, 045204 (2017).
- [88] G. H. Golub y C. F. V. Loan, *Matrix Computations*, 4.<sup>a</sup> ed. (The Johns Hopkins University Press, 2013).
- [89] M. Cygorek, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **93**, 205201 (2016).
- [90] C. F. Fong, Y. Ota, S. Iwamoto e Y. Arakawa, *Opt. Express* **26**, 21219 (2018).