

Relajación de espín en pozos cuánticos por el  
mecanismo de Elliot-Yafet

Ricardo Luis Rey

# Relajación de espín en pozos cuánticos por el mecanismo de Elliot-Yafet

Ricardo Luis Rey

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas  
Facultad de Ciencias Exactas y Naturales  
Universidad de Buenos Aires

Abril de 2006

**TEMA:** Relajación de espín en pozos cuánticos por el mecanismo de Elliot-Yafet.

**ALUMNO:** Ricardo Luis Rey    **L.U.:** 152/88

**LUGAR DE TRABAJO:** Departamento de Física, FCEyN, UBA.

**DIRECTOR DEL TRABAJO:** Dr. Pablo I. Tamborenea

**FECHA DE INICIACIÓN:** Marzo de 2005

**FECHA DE FINALIZACIÓN:** Marzo de 2006

**FECHA DE EXAMEN:**    /    /

**INFORME FINAL APROBADO POR:**

Autor
Director
Profesor de Tesis de Licenciatura

2

Jurado
Jurado
Jurado

## **Agradecimientos**

Quiero agradecer en primer lugar a la Universidad Pública la posibilidad de completar mis estudios de Licenciatura.

Al Dr. Pablo I. Tamborenea le agradezco la amabilidad, paciencia y buena disposición que tuvo para conmigo desde el primer momento en que comenzó este trabajo.

Para todos aquéllos que me instaron a no bajar los brazos (menciono especialmente aquí a Olga Ambas y Walter Feruglio), muchas gracias.

Por último, debo decir que la motivación principal para retomar la carrera y terminarla fueron mis hijos Francisco y Ana, y mi esposa, Marcela.

## Resumen

En este trabajo se obtuvo una expresión para el tiempo de relajación de espín en pozos cuánticos semiconductores del tipo III-V (GaAs, InAs e InSb) mediante el mecanismo de Elliot-Yafet inducido por el *scattering* con impurezas empleando el modelo de bandas de Kane.

En una etapa posterior se implementó en forma numérica el cálculo de dicha expresión, estudiando la dependencia del tiempo de relajación con la distancia de las impurezas ionizadas al pozo cuántico, la densidad de electrones donados, la densidad de desbalance de espín y la temperatura. El estudio se hizo para densidades de electrones donados variando desde  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  hasta  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , y para densidades de desbalance de espín entre el 1% y el 50% de estas cantidades. Asimismo la temperatura de estos sistemas se tomó en el rango de  $1K$  a  $300K$ , utilizando funciones de distribución de Fermi-Dirac para describir las dos poblaciones de espín.

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>3</b>
<b>2. Cálculo del Tiempo de Relajación</b>	<b>8</b>
2.1. Tiempo de Relajación de Espín . . . . .	9
2.2. Estados Electrónicos . . . . .	13
2.3. Potencial de <i>Scattering</i> . . . . .	15
2.4. Elementos de Matriz . . . . .	17
<b>3. Resultados</b>	<b>21</b>
3.1. $T_1$ vs $d$ . . . . .	22
3.2. $T_1$ vs $n_i$ . . . . .	26
3.3. $T_1$ vs $T$ . . . . .	33
3.4. $T_1$ vs $n_{ex}$ . . . . .	35
<b>4. Análisis y Discusión</b>	<b>38</b>
4.1. Temperaturas Características . . . . .	38
4.2. Dependencia con $d$ . . . . .	39
4.3. Dependencia con $n_i$ . . . . .	41
4.4. Dependencia con $T$ . . . . .	43
4.5. Dependencia con $n_{ex}$ . . . . .	44
4.6. Comparación con Experimentos . . . . .	45

<b>5. Conclusiones</b>	<b>49</b>
<b>A. Normalización de las Funciones de Onda</b>	<b>52</b>
<b>B. Potencial Químico de un Gas de Electrones Bidimensional</b>	<b>55</b>



# Capítulo 1

## Introducción

La utilización de materiales semiconductores en la fabricación de dispositivos electrónicos se basa en el control preciso que se puede ejercer sobre las distribuciones de carga de sus portadores. Sin embargo, el hecho que los electrones además de carga también poseen espín ha sido generalmente ignorado en el diseño de dichos dispositivos.

Actualmente la necesidad de incrementar la velocidad en el transporte de información ha obligado a la industria al diseño y construcción de dispositivos cada vez más pequeños, lo cual llevará a corto plazo a encontrarse con efectos cuánticos capaces de afectar el funcionamiento de tales sistemas. Como alternativa a esta situación ha crecido en los últimos años el interés por el estudio de las propiedades del espín de los portadores en sistemas de estado sólido, con vistas a futuras aplicaciones en el diseño de dispositivos electrónicos. Es así que se ha desarrollado una nueva rama de investigación multidisciplinaria, denominada *espintrónica*, cuyo objetivo fundamental es la manipulación y control de los grados de libertad de espín en sistemas de estado sólido. Entre los estudios fundamentales que incluye la espintrónica se encuentra la investigación sobre la relajación de corrientes polarizadas en

espín en metales y semiconductores. Éste es un proceso que lleva a la equilibración del espín electrónico en estos materiales. Dado que los desbalances en el espín electrónico tienen largos tiempos de vida (del orden del nanosegundo), información codificada en el espín de los portadores podría viajar distancias macroscópicas, convirtiendo así a la espintrónica en una opción viable para la tecnología electrónica.

Existe gran cantidad de trabajos publicados dentro de esta línea de investigación en estructuras semiconductoras, tanto en el *bulk* como en sistemas de baja dimensionalidad (ref. [1],[2],[3],[4],[14],[16]). Entre estos trabajos se encuentran los realizados utilizando la técnica experimental conocida como ‘rotación de Faraday’, la cual consiste, básicamente, en hacer incidir un pulso de luz circularmente polarizada sobre un semiconductor con energía superior al *gap* entre sus bandas de valencia y de conducción, creándose en ésta última una densidad de electrones fotoexcitados y polarizados en espín. En ausencia de campo magnético el desbalance entre las poblaciones de espín relaja, debido a las diferentes interacciones de los electrones, hacia el valor nulo. A fin de estudiar la evolución de la magnetización en la banda de conducción, se hace incidir luego un pulso de luz linealmente polarizada. El plano de polarización de la luz reflejada rota un ángulo  $\theta$  proporcional a la magnetización electrónica en la dirección de la luz incidente. Variando el retraso de los pulsos aplicados se puede entonces detectar la evolución temporal de esta magnetización.

Se han propuesto diferentes mecanismos para explicar la relajación de dichos desbalances en las poblaciones de espín, siendo los más importantes los de Elliot-Yafet, D’yakonov-Perel’ y Bir-Aronov-Pikus.

En 1954, R. J. Elliot fue el primero en reconocer que el espín de los electrones de conducción puede relajar via *scattering* de momento (producido

por fonones, impurezas, o con los mismos electrones entre sí) si los iones de la red inducen acoplamiento espín-órbita en las funciones de onda electrónicas [6]. En su trabajo Elliot estableció que la relación entre el *tiempo de relajación de espín*,  $\tau_s$ , que es el tiempo característico en el cual se equilibra el desbalance entre ambas poblaciones de espín, y  $\tau_p$ , el tiempo de relajación de momento, es de la forma  $\tau_s \sim \tau_p$ .

Por su parte, en 1963, Y. Yafet consideró por primera vez este proceso en sistemas con estructura de bandas y desarrolló una teoría completa para calcular la relajación de espín inducida por el *scattering* electrón-fonón [7].

En los materiales con estructura de blanda de zinc (como los de los grupos II-VI y III-V) el acoplamiento espín-órbita da lugar a una mezcla de los estados de espín en las funciones de onda de los electrones de conducción. De esta manera los estados son combinaciones lineales de ambos autoestados de espín con coeficientes que son funciones del momento  $\mathbf{k}$ . Usualmente una de las dos componentes en estas combinaciones lineales tiene amplitud mucho mayor que la otra, reteniendo una correspondencia clara con los estados de espín puros, y por lo tanto se denominan estados de espín *up* y espín *down* y se denotan por  $|\mathbf{k} \uparrow\rangle$  y  $|\mathbf{k} \downarrow\rangle$ . Sin embargo, dado que los estados de la banda de conducción no son estados puros de espín, aún potenciales de interacción que no dependan de los grados de libertad de espín pueden causar inversiones de espín en los electrones.

M. I. D'yakonov y V. I. Perel' establecieron en 1971 un mecanismo eficiente de relajación de espín en sistemas que no poseen simetría de inversión [5]. Sin esta simetría de inversión se rompe la degeneración de los estados de momento de los electrones con espín *up* y espín *down*. Este desdoblamiento de las bandas con diferente espín puede ser descrito introduciendo un campo magnético efectivo,  $\mathbf{B}(\mathbf{k})$ , dependiente del momento electrónico  $\mathbf{k}$ , alrededor

del cual el espín electrónico precede con frecuencia angular  $\Omega(\mathbf{k}) = \frac{e}{m}\mathbf{B}(\mathbf{k})$ . Debido al *scattering* de momento cada electrón precede entonces alrededor de un campo magnético fluctuante cuya magnitud y dirección cambia en la escala de tiempo de  $\tau_p$ . Como resultado de este proceso puede demostrarse que el tiempo de relajación de espín cumple que  $\tau_s \sim \tau_p^{-1}$ .

La diferencia más importante entre los mecanismos de Elliot-Yafet y D'yakonov-Perel' está en la dependencia con el tiempo de relajación de momento  $\tau_p$ , que resulta opuesta para ambos procesos. Por otra parte se observa, como tendencia general, que el mecanismo de Elliot-Yafet es relevante en semiconductores con pequeño *gap* y gran acoplamiento espín-órbita, mientras que el de D'yakonov-Perel' cobra mayor importancia para valores más grandes del *gap* y a altas temperaturas.

A estos dos mecanismos se agrega, en semiconductores *p*-dopados, un tercero propuesto por G. L. Bir, A. G. Aronov y G. E. Pikus en su trabajo de 1975 [8], y que lleva a la relajación de espín de los electrones de conducción a través del *scattering* con huecos. Este mecanismo es el dominante para bajas temperaturas en materiales fuertemente *p*-dopados.

Entre las estructuras semiconductoras de interés por su flexibilidad en la manipulación de las propiedades del espín de los estados electrónicos, se encuentran los pozos cuánticos en semiconductores del tipo II-VI y III-V, estudiados experimentalmente por Kikkawa *et al.* [3], Terauchi *et al.* [9], y otros (ref. [10],[17],[18],[19]).

Un hecho remarcable es que experimentalmente se ha encontrado que la presencia de un gas bidimensional de electrones en el pozo cuántico, proveniente de un *n*-dopado en las muestras estudiadas, aumenta, respecto de muestras no dopadas, cerca de tres órdenes de magnitud el tiempo de relajación de espín [3].

También han sido reportados recientemente estudios ([10],[11],[12]) en los que se consigue una sustancial supresión del mecanismo de D'yakonov-Perel' fabricando muestras en las que el plano del gas bidimensional es perpendicular al eje [110], pudiendo así cobrar mayor relevancia los otros mecanismos de relajación de espín, en particular el de Elliot-Yafet.

El presente trabajo tiene como objetivo calcular, desde un punto de vista microscópico, el tiempo de relajación de un desbalance inicial en las poblaciones de espín en pozos cuánticos fabricados con materiales semiconductores  $n$ -dopados del tipo III-IV. Dicho desbalance se supone originado por electrones fotoexcitados en las condiciones experimentales descritas anteriormente y se considera como mecanismo responsable de la relajación al de Elliot-Yafet inducido por el *scattering* coulombiano de los electrones de conducción con las impurezas del sistema. Los precitados cálculos se efectúan para el arsenuro de galio y arsenuro de galio con aluminio (GaAs-AlGaAs), el arsenuro de indio (InAs) y el antimonuro de indio (InSb). En el siguiente capítulo se presentan en detalle las hipótesis empleadas y los cálculos efectuados para obtener la expresión analítica del tiempo de relajación de espín en los sistemas mencionados anteriormente. En el Capítulo 3 se exhiben los resultados obtenidos en forma numérica a partir de dicha expresión, presentando la dependencia del tiempo de relajación de espín con los diferentes parámetros involucrados en éstos procesos, como la densidad de electrones donados, la densidad de desbalance de espín, la temperatura y la distancia del gas bidimensional de electrones a las impurezas. En el Capítulo 4 se analizan y se comparan estos resultados para los diferentes semiconductores estudiados y también se establece la comparación con resultados experimentales publicados en la literatura sobre el tema. Por último, en el Capítulo 5 se establecen las conclusiones del presente trabajo.

# Capítulo 2

## Cálculo del Tiempo de Relajación

En este capítulo se detallan los cálculos realizados para obtener una expresión del tiempo de relajación de espín en pozos cuánticos semiconductores  $n$ -dopados del tipo III-V mediante el mecanismo de Elliot-Yafet inducido por *scattering* de los electrones de conducción con las impurezas presentes en estos sistemas.

Como se esquematiza en la figura 2.1, en el sistema considerado, un gas bidimensional <sup>1</sup> de electrones  $n$ -donados ocupando estados en la banda de conducción, con densidad  $n_i$  y con polarización neta de espín nula (a), ve incrementada su densidad en una cantidad  $n_{ex}$ , debido a electrones provenientes de la banda de valencia, creados por un pulso de luz circularmente polarizada (b). Inmediatamente después de la creación del gas de electrones fotoexcitados predomina el mecanismo de recombinación entre electrones y huecos (c). Luego que este proceso ha tenido lugar aún queda en el sistema una densidad de desbalance de espín ocupando estados de la banda de con-

---

<sup>1</sup>En ocasiones se designará a los electrones presentes en el pozo cuántico como ‘gas bidimensional de electrones’, si bien se trata estrictamente de un ‘gas *cuasi*-bidimensional’, dado que el pozo tiene un ancho finito  $a$ .

ducción del tipo  $|\mathbf{k} \uparrow\rangle$  (d).

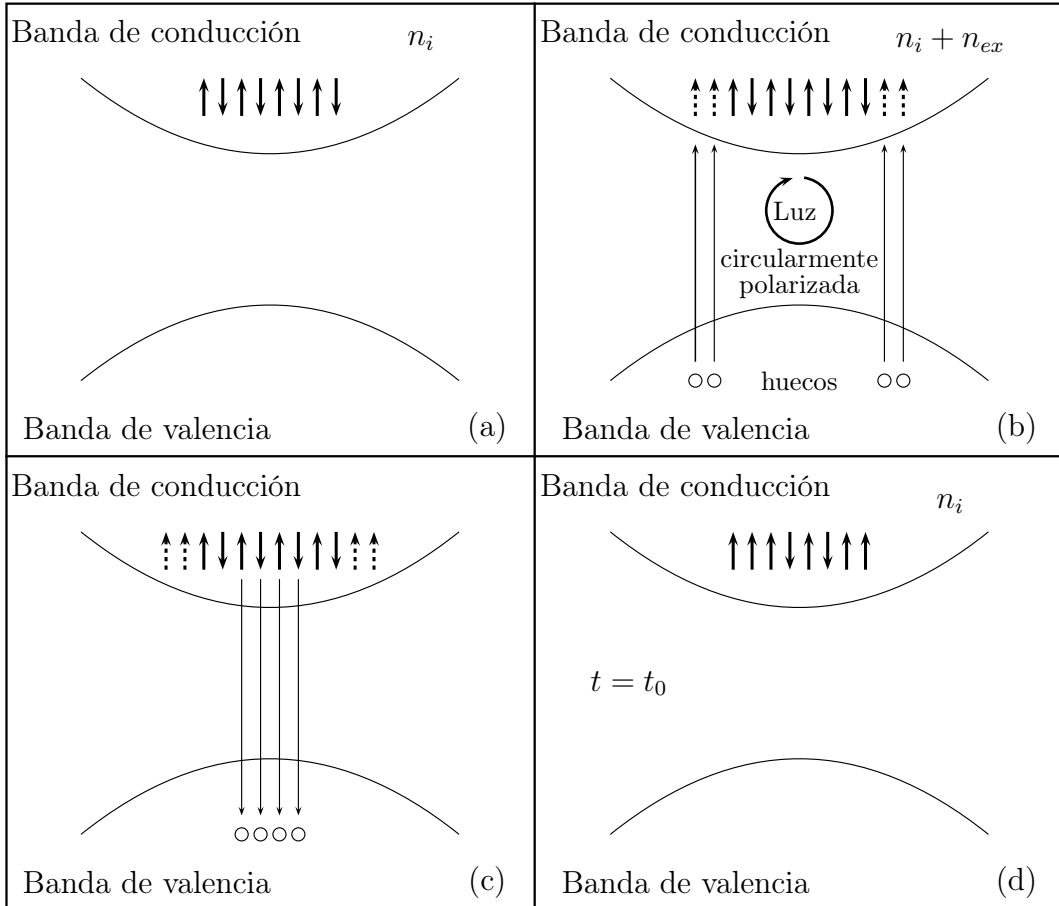


Figura 2.1: Esquema del proceso mediante el cual es creado un desbalance en las poblaciones de espín de los electrones de conducción. La explicación detallada de este proceso se encuentra en la página precedente.

Se supondrá en los cálculos que siguen que en esta etapa ya se ha alcanzado el equilibrio térmico en ambas poblaciones de espín y, por lo tanto, se pueden describir mediante las respectivas funciones de distribución de Fermi-Dirac con temperatura común  $T$ .

## 2.1. Tiempo de Relajación de Espín

Se define para cualquier tiempo  $t$ , la densidad bidimensional de desbalance de espín como

$$n_d(t) \equiv n_{\uparrow}(t) - n_{\downarrow}(t), \quad (2.1)$$

donde  $n_{\uparrow}(t)$  y  $n_{\downarrow}(t)$  son, respectivamente, las densidades de las poblaciones con espín *up* y *down* en el instante  $t$ . En las condiciones anteriormente mencionadas, las densidades iniciales de las poblaciones de espín, a un tiempo  $t_0$ , luego de producidas las recombinaciones entre electrones y huecos, están dadas por

$$n_{\uparrow}(t_0) = \frac{1}{2}n_i + \frac{1}{2}n_{ex}, \quad (2.2)$$

para los electrones con espín *up*, y

$$n_{\downarrow}(t_0) = \frac{1}{2}n_i - \frac{1}{2}n_{ex}, \quad (2.3)$$

para los electrones con espín *down*.

Se sigue entonces que el desbalance inicial en las poblaciones de espín en el pozo cuántico,  $n_d(t_0)$  está dado por  $n_{ex}$ .

Denotando, como es habitual ([2],[14],[16]), con  $T_1$  al tiempo de relajación de espín, se define

$$\frac{1}{T_1} \equiv -\frac{1}{n_d} \frac{dn_d}{dt}. \quad (2.4)$$

Como en esta etapa del proceso no hay más recombinaciones electrón-hueco ni tampoco excitaciones hacia la banda de conducción, se cumple que

$$n_{\uparrow}(t) + n_{\downarrow}(t) = n_i = cte, \quad (2.5)$$



lo cual, junto a (2.1), permite reescribir la definición anterior en la siguiente forma

$$\frac{1}{T_1} = -\frac{1}{n_d} \frac{d(n_\uparrow - n_\downarrow)}{dt} = -\frac{2}{n_d} \frac{dn_\uparrow}{dt}. \quad (2.6)$$

Es entonces necesario contar con una expresión para el  $dn_\uparrow/dt$  producido por el *scattering* de los electrones del gas bidimensional con las impurezas presentes en el sistema.

Para ello se comienza considerando la tasa de variación temporal de  $N_\uparrow$ , el número de electrones en la banda de conducción con espín *up*. Dicha tasa está dada por

$$\frac{dN_\uparrow}{dt} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \left\{ f_\downarrow(k') [1 - f_\uparrow(k)] T_{\mathbf{k}'\downarrow \rightarrow \mathbf{k}\uparrow} - f_\uparrow(k) [1 - f_\downarrow(k')] T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow} \right\}, \quad (2.7)$$

donde  $f_\sigma(\mathbf{k})$  es la función de distribución de Fermi-Dirac para las poblaciones con proyección  $\sigma$  de espín en el eje  $z$  a temperatura  $T$ , mientras que  $T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow}$  y  $T_{\mathbf{k}'\downarrow \rightarrow \mathbf{k}\uparrow}$  son las probabilidades de transición entre estados de espín opuesto debidas al *scattering* con las impurezas. La suma se hace sobre todos los posibles estados iniciales y finales de momento de los portadores.

Observando que  $T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow} = T_{\mathbf{k}'\downarrow \rightarrow \mathbf{k}\uparrow}$ , la expresión (2.7) se puede poner en la forma

$$\frac{dN_\uparrow}{dt} = - \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [f_\uparrow(k) - f_\downarrow(k')] T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow}. \quad (2.8)$$

La probabilidad de transición entre los diferentes estados de espín se obtiene utilizando la bien conocida *Regla de Oro* de Fermi, la cual establece que

$$T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta[E_{n'}(\mathbf{k}') - E_n(\mathbf{k})] |\langle n'\mathbf{k}' \downarrow | V_i | n\mathbf{k} \uparrow \rangle|^2, \quad (2.9)$$

donde  $E_n(\mathbf{k})$  es la energía electrónica correspondiente al momento bidimensional  $\mathbf{k}$  en la  $n$ -ésima sub-banda. El elemento de matriz que aparece en (2.9) conecta estados de espín opuesto a través del potencial  $V_i$  creado por las impurezas donoras ionizadas y que es el causante del *scattering* electrónico-impurezas.

Desafortunadamente el *scattering* debido a muchas impurezas es difícil de calcular debido a la interferencia entre ondas dispersadas por impurezas vecinas. Sin embargo, en el caso aquí considerado de muestras de tamaño macroscópico, es usualmente posible ignorar tales efectos y asumir que el *scattering* debido a cada impureza individual es independiente de las demás.

En ese caso la probabilidad de transición dada en (2.9), puede escribirse como

$$T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow} = N_i \frac{2\pi}{\hbar} \delta[E_{n'}(\mathbf{k}') - E_n(\mathbf{k})] |\langle n'\mathbf{k}' \downarrow | V | n\mathbf{k} \uparrow \rangle|^2, \quad (2.10)$$

donde  $N_i$  es el número de impurezas presentes en la heteroestructura y  $V$  es el potencial de interacción de *una impureza*.

Reemplazando (2.10) en la expresión (2.8) para  $dN_{\uparrow}/dt$ , y dividiendo luego por el área del gas bidimensional se obtiene entonces la expresión buscada para  $dn_{\uparrow}/dt$

$$\begin{aligned} \frac{dn_{\uparrow}}{dt} = & -n_i \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [f_{\uparrow}(k) - f_{\downarrow}(k')] \\ & \times \delta[E_{n'}(\mathbf{k}') - E_n(\mathbf{k})] |\langle n'\mathbf{k}' \downarrow | V | n\mathbf{k} \uparrow \rangle|^2, \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde  $n_i$  es la densidad bidimensional de impurezas presentes en el sistema.

A fin de calcular el elemento de matriz presente en (2.11), es necesario especificar las formas de los estados electrónicos en el pozo y del potencial de interacción. En el primer caso se utilizarán las funciones de onda que surgen

del modelo de bandas de Kane [20], mientras que en el segundo caso se trata del potencial coulombiano de los donores ionizados apantallado por el gas bidimensional de electrones.

## 2.2. Estados Electrónicos

Como se ha mencionado anteriormente la interacción espín-órbita en los semiconductores del tipo III-V resulta en funciones de onda de Bloch para los electrones en la banda de conducción que son ‘mezclas’ de ambos estados de espín. La expresión de tales funciones de onda puede obtenerse mediante la aproximación  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ , suponiendo que los estados electrónicos en la banda de conducción cumplan que  $\hbar^2 k^2 / 2m^* \ll E_g$ , siendo  $E_g$  la energía del *gap* entre las bandas de valencia y de conducción. En éste caso, considerando solamente las tres bandas superiores de valencia y la primera banda de conducción, la parte periódica en la red de Bravais de las funciones de Bloch,  $u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r})$ , adopta la forma [20]

$$|u_{\mathbf{k},\sigma}\rangle = |s, \sigma\rangle + i \left( \frac{E_F}{E_g} \frac{3E_g + 2\Delta}{3(E_g + \Delta)} \right)^{\frac{1}{2}} \times \left[ \frac{\mathbf{k} \cdot |\mathbf{R}, \sigma\rangle}{k_F} + \frac{2i\Delta}{2\Delta + 3E_g} \frac{\mathbf{S} \cdot (\mathbf{k} \times |\mathbf{R}, \sigma\rangle)}{\hbar k_F} \right], \quad (2.12)$$

donde  $\Delta$  es la energía de separación entre las bandas de valencia debido al acoplamiento espín-órbita,  $|\mathbf{R}\rangle$  denota al vector ( $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ ) correspondiente a las funciones de onda de las bandas de valencia y  $\mathbf{S}$  es el operador de espín. En estas funciones de onda también aparecen por razones prácticas  $E_F$  y  $k_F$  que son, respectivamente, la energía de Fermi del gas de electrones y el módulo del vector de onda asociado a la misma, aunque, como es de esperar en una descripción de partícula única, es posible simplificarlas entre sí.

En la expresión (2.12) puede observarse que para vectores de onda  $\mathbf{k}$  tales que  $k/k_F \ll 1$ , se tiene que  $|u_{\mathbf{k},\sigma}\rangle \approx |s, \sigma\rangle$ , de manera que las funciones de onda conservan las simetrías de los orbitales del tipo  $|s\rangle$  siendo además autoestados de espín. A medida que aumenta el valor de  $k$ , comienza a tener mayor relevancia el segundo término de (2.12), en el cual aparecen componentes con simetrías de orbitales de tipo  $|p\rangle$  debidas al acoplamiento  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$  con las bandas de valencia. Además el operador  $\mathbf{S}$  ‘mezcla’ diferentes estados de espín, provocando que la función de onda total no sea más autofunción de la proyección de espín  $S_z$ .

Es relativamente sencillo comprobar que las  $|u_{\mathbf{k},\sigma}\rangle$  satisfacen que

$$\langle u_{\mathbf{k}',\sigma} | u_{\mathbf{k},\sigma} \rangle \approx 1, \quad (2.13)$$

cuando ambos electrones tienen espines paralelos, mientras que, cuando los espines son opuestos

$$\langle u_{\mathbf{k}'\downarrow} | u_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle = \left( \frac{E_F}{E_g} \right) \left[ \frac{\Delta(\Delta + 2E_g)}{(E_g + \Delta)(2\Delta + 3E_g)} \right] \frac{k_{0z} |\mathbf{k}' - \mathbf{k}|}{k_F^2}. \quad (2.14)$$

En esta expresión  $k_{0z}$  es algún número de onda característico en la dirección  $z$ , que se ha tomado perpendicular al plano del gas bidimensional de electrones.

Para un gas cuasi-bidimensional de electrones localizado en un pozo cuántico como el que se presenta en la figura 2.1, en la que una capa de GaAs no dopado de espesor  $a$  se encuentra rodeada a ambos lados por capas de AlGaAs  $n$ -dopadas y donde las impurezas se distribuyen en dos monocapas paralelas a una distancia  $d$  de las heterojunturas, las funciones de onda adoptan la siguiente forma

$$\psi_{n,\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z) = \langle \mathbf{r}, z | n\mathbf{k}\sigma \rangle = \sqrt{L} u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z) \varphi_n(z) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (2.15)$$

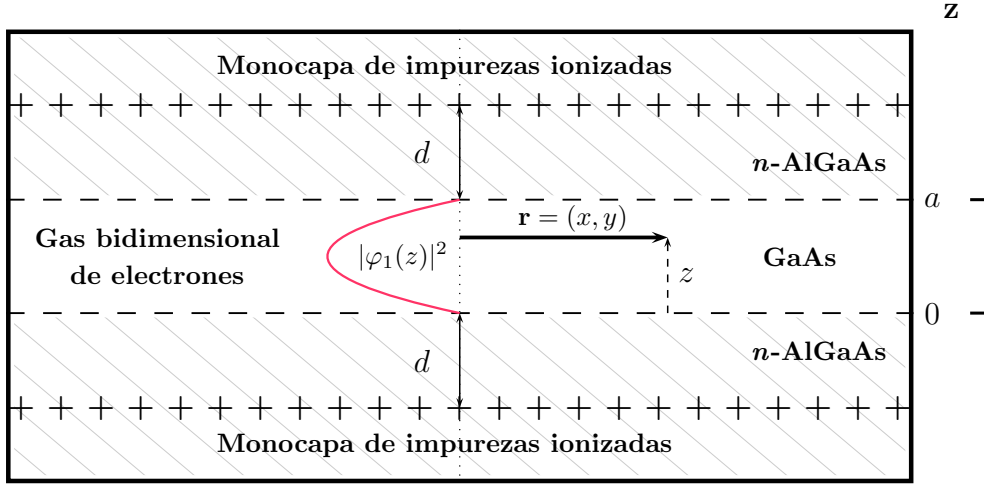


Figura 2.2: Configuración utilizada para el cálculo del tiempo de relajación de espín.

donde  $\mathbf{r} = (x, y)$  representa el vector posición bidimensional paralelo al plano del gas,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  es el análogo en el espacio de vectores de onda, y  $\varphi_n(z)$  es la  $n$ -ésima función de onda correspondiente al pozo de potencial unidimensional en la coordenada  $z$ . El factor  $\sqrt{L}$  proviene de la normalización de la función de onda, siendo  $L$  la longitud característica de la muestra en la dirección  $z$ . La normalización de éstas funciones de onda se detalla en el Apéndice A.

En el presente trabajo se aproximará el pozo de potencial por un pozo infinito de ancho  $a$ . En consecuencia las  $\varphi_n(z)$  estarán dadas por

$$\varphi_n(z) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi z}{a}\right) & \text{si } 0 \leq z \leq a, \\ 0 & \text{en otro caso.} \end{cases} \quad (2.16)$$

## 2.3. Potencial de *Scattering*

El potencial de interacción usado en los cálculos es el potencial electrostático producido por los donores y apantallado por el propio gas de electrones. Es importante remarcar que el apantallamiento no es tan efectivo aquí como en el *bulk*, ya que las líneas de campo no están confinadas al plano del gas bidimensional.

Si una impureza se encuentra a una distancia  $|d|$  del plano de un gas estrictamente bidimensional como se muestra en la figura 2.2(a), el potencial no-apantallado en dicho plano es

$$V(\mathbf{r}, z = 0) = \frac{e^2}{\epsilon\sqrt{r^2 + d^2}}. \quad (2.17)$$

Para los cálculos que siguen, es conveniente introducir la transformada bidimensional de Fourier de este potencial de interacción

$$\begin{aligned} \tilde{V}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{A} \int_A d^2r V(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \\ &= \frac{2\pi e^2 \exp(-q|d|)}{A\epsilon q}, \end{aligned} \quad (2.18)$$

donde  $A$  es el área del gas bidimensional.

En el caso aquí considerado el gas de electrones confinado en el pozo no es estrictamente bidimensional, de modo que la expresión anterior se transforma en

$$\tilde{V}(\mathbf{q}, z) = \frac{2\pi e^2 \exp[-q(z + |d|)]}{A\epsilon q}, \quad (2.19)$$

para un punto situado una distancia  $z$  dentro del pozo (figura 2.2(b)).

En la aproximación de Thomas-Fermi el apantallamiento de este potencial de interacción se introduce a través de una función dieléctrica  $\epsilon_{TF}(q)$ , dada

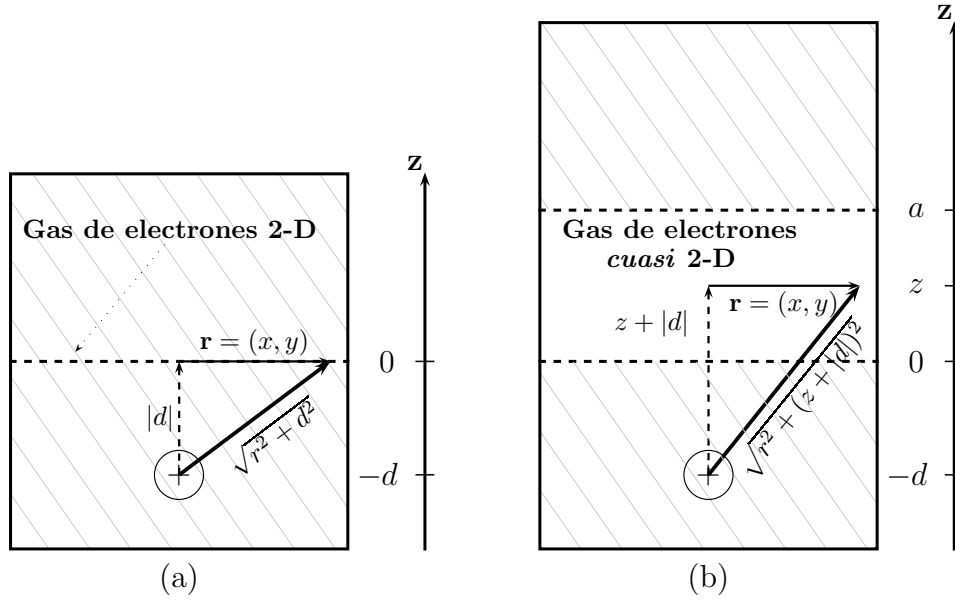


Figura 2.3: Esquema para el cálculo del potencial de interacción de un donador ionizado con el gas de electrones para: (a) gas estrictamente bidimensional, y (b) un gas cuasi-bidimensional.

por (ref. [13]):

$$\epsilon_{TF}(q) = 1 + \frac{q_{TF}}{q}, \quad (2.20)$$

donde  $q_{TF}$  es el número de onda de apantallamiento de Thomas-Fermi que es igual a  $2/a_B^*$  ( $a_B^*$  : radio de Bohr efectivo).

Dividiendo la expresión (2.19) por esta función dieléctrica se tiene finalmente que la transformada bidimensional del potencial de interacción apantallado,  $\tilde{V}_{ap}(\mathbf{q}, z)$ , es

$$\tilde{V}_{ap}(\mathbf{q}, z) = \frac{2\pi e^2}{A\epsilon} \frac{\exp[-q(z + |d|)]}{q + q_{TF}}. \quad (2.21)$$

## 2.4. Elementos de Matriz

Conocidos tanto el potencial de interacción como las funciones de onda del gas de electrones, se procederá ahora a calcular los elementos de matriz de este potencial que aparecen en la expresión (2.10) para la probabilidad de transición  $T_{\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow}$ .

Para evaluar dichos elementos de matriz se considerará el caso donde tanto las variaciones de  $\varphi_n(z)$  como de  $V(\mathbf{r}, z)$  son pequeñas en la escala de la celda unidad. Utilizando entonces la periodicidad de las  $u_{\mathbf{k}\sigma}$  en la red de Bravais se puede escribir

$$\begin{aligned} \langle n'\mathbf{k}' \downarrow | V | n\mathbf{k} \uparrow \rangle &\equiv \int_{V_m} d^2r dz [\psi_{n'\mathbf{k}'\downarrow}^*(\mathbf{r}, z) V(\mathbf{r}, z) \psi_{n\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}, z)] \\ &\approx \frac{1}{A} \langle u_{\mathbf{k}'\downarrow} | u_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \int_{V_T} d^2r dz \{ \varphi_{n'}^*(z) \varphi_n(z) V(\mathbf{r}, z) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \} \quad (2.22) \\ &= \langle u_{\mathbf{k}'\downarrow} | u_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle \int_L dz \{ \varphi_{n'}^*(z) \tilde{V}(\mathbf{q}, z) \varphi_n(z) \} \end{aligned}$$

donde se ha definido  $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$  y se ha utilizado la definición de la transformada de Fourier bidimensional del potencial dada en (2.18). La integración en la primera igualdad de (2.22) se extiende sobre el volumen total de la muestra,  $V_m$ .

Considerando el caso donde los eventos de *scattering* se producen en la sub-banda con  $n = n' = 1$  (es decir que  $k_{0z} = \pi/a$ ), y teniendo en cuenta las expresiones (2.14), (2.16) y (2.21) para  $\langle u_{\mathbf{k}'\downarrow} | u_{\mathbf{k}\uparrow} \rangle$ ,  $\varphi_1(z)$  y  $\tilde{V}_{ap}(\mathbf{q}, z)$ , respectivamente, se tiene para el cuadrado del módulo del elemento de matriz la siguiente relación

$$\begin{aligned} |\langle n'\mathbf{k}' \downarrow | V | n\mathbf{k} \uparrow \rangle|^2 &= \frac{64\pi^8 e^4}{A^2 \epsilon^2} \left( \frac{E_F}{E_g} \right)^2 \left[ \frac{\Delta(\Delta + 2E_g)}{(E_g + \Delta)(2\Delta + 3E_g)} \right]^2 \\ &\times \left( \frac{q}{k_F^2} \right)^2 \frac{e^{-2q|d|} (1 - e^{-qa})^2}{a^4 q^2 (a^2 q^2 + 4\pi^2)^2 (q + q_{TF})^2}. \end{aligned} \quad (2.23)$$



En esta expresión, además, se ha efectuado el cálculo de la integral en la variable  $z$  que aparece en la (2.22) <sup>2</sup>

Por otra parte, utilizando propiedades de la delta de Dirac se tiene que

$$\delta[E_1(\mathbf{k}') - E_1(\mathbf{k})] = \frac{m^*}{\hbar^2 k'} \delta(k - k'), \quad (2.24)$$

siendo  $m^*$  la masa efectiva de la banda de conducción. Reemplazando entonces (2.23) y (2.24) en (2.11) y luego ésta última en (2.6), se tiene para el recíproco del tiempo de relajación de espín

$$\begin{aligned} \frac{1}{T_1} = & \frac{256\pi^9}{A^2\epsilon^2} \frac{n_i}{n_d} \frac{m^* e^4}{\hbar^3} \frac{1}{a^4 k_F^4} \left( \frac{E_F}{E_g} \right)^2 \left[ \frac{\Delta(\Delta + 2E_g)}{(E_g + \Delta)(2\Delta + 3E_g)} \right]^2 \\ & \times \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} [f_{\uparrow}(k) - f_{\downarrow}(k)] \delta(k - k') \frac{e^{-2q|d|}(1 - e^{-qa})^2}{(a^2 q^2 + 4\pi^2)^2 (q + q_{TF})^2}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

La conservación de la energía cinética de los electrones está expresada por el factor que contiene la delta de Dirac en la expresión anterior. Esto asegura que  $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$ . Entonces, como puede verse de la figura 2.3, el módulo del vector bidimensional  $\mathbf{q}$  satisface

$$q = |\mathbf{k} - \mathbf{k}'| = 2k \sin\left(\frac{\theta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}}{2}\right), \quad (2.26)$$

con  $\theta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}$  el ángulo que forman entre sí los vectores  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$ .

Pasando al continuo en la forma usual las sumas sobre  $\mathbf{k}$  y  $\mathbf{k}'$  de la expresión (2.25) e integrando en la variable  $k'$ , la expresión para el tiempo de relajación queda finalmente

---

<sup>2</sup>Para llegar a la forma de la expresión (2.23), se ha utilizado la siguiente igualdad para la integración en la coordenada  $z$ :

$$\int dz \sin^2\left(\frac{\pi z}{a}\right) e^{-qz} = -\frac{e^{-qz}}{2} \left[ \frac{1}{q} + \frac{a^2}{a^2 q^2 + 4\pi^2} \left( \frac{2\pi}{a} \sin\left(\frac{2\pi z}{a}\right) - q \cos\left(\frac{2\pi z}{a}\right) \right) \right].$$

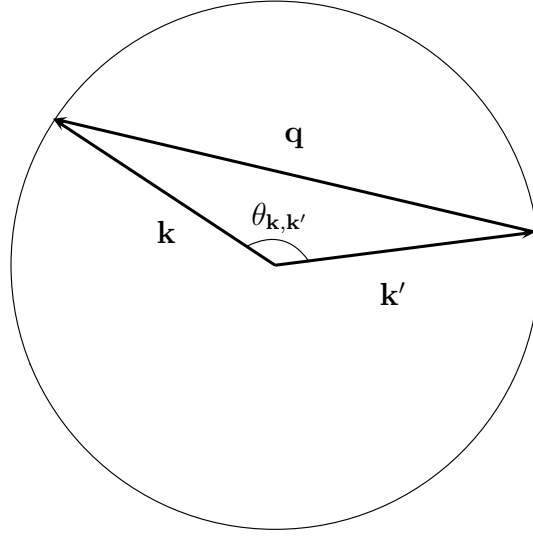


Figura 2.4: Esquema de los vectores de onda inicial y final. En este diagrama puede verse que el módulo de  $\mathbf{q}$  satisface  $q = 2k \sin(\theta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}/2)$ .

$$\frac{1}{T_1} = \frac{32\pi^6}{\epsilon^2} \frac{n_i}{n_d} \frac{m^* e^4}{\hbar^3} \frac{1}{a^4 k_F^4} \left( \frac{E_F}{E_g} \right)^2 \left[ \frac{\Delta(\Delta + 2E_g)}{(E_g + \Delta)(2\Delta + 3E_g)} \right]^2 \quad (2.27)$$

$$\times \int_0^\infty dk k [f_\uparrow(k) - f_\downarrow(k)] \int_0^{2\pi} d\theta' \frac{e^{-2q|d|}(1 - e^{-qa})^2}{(a^2 q^2 + 4\pi^2)^2 (q + q_{TF})^2},$$

en la que se ha tomado el eje polar en el espacio  $k'$  en la dirección del vector  $\mathbf{k}$  (*i.e.*,  $\theta' = \theta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ ) y se ha utilizado la simetría en la variable angular  $\theta$  del espacio  $k$ .

La forma explícita de las funciones de distribución de Fermi-Dirac para una población de espín con densidad  $n_\sigma$  es

$$f_\sigma(\mathbf{k}, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E(\mathbf{k}) - \mu_\sigma}{k_B T}\right) + 1}, \quad (2.28)$$

donde  $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ ,  $k_B$  es la constante de Boltzmann y  $\mu_\sigma$  el potencial químico, que, para el caso de un gas bidimensional de electrones está dado

por

$$\mu_{\sigma}(n_{\sigma}, T) = k_B T \ln \left[ \exp \left( \frac{4\pi\hbar^2 n_{\sigma}}{2m^* k_B T} \right) - 1 \right]. \quad (2.29)$$

La deducción de esta expresión para el potencial químico se detalla en el Apéndice 2.

# Capítulo 3

## Resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos en forma numérica para el tiempo de relajación de espín en GaAs, InAs e InSb a partir de la expresión (2.27) obtenida en el capítulo anterior.

En dicha expresión aparece una doble integración que fue llevada a cabo numéricamente por medio de la Regla de los Trapecios Extendida. Este algoritmo se implementó mediante rutinas escritas en `Matlab`.

La primera de éstas integrales involucra en su integrando a la expresión obtenida en el cálculo del elemento de matriz del potencial de *scattering* entre estados de los electrones en el pozo cuántico. Es por esto que esta primera integración resulta en una función del número de onda  $k$ , y depende en forma paramétrica de las características geométricas del sistema considerado (ancho del pozo y distancia del gas bidimensional a las impurezas).

La segunda integral tiene en cuenta parámetros tales como la densidad de impurezas,  $n_i$ , el desbalance de poblaciones de espín,  $n_{ex}$ , y la temperatura, a través de la diferencia entre las funciones de distribución de Fermi-Dirac para ambas poblaciones de espín.

Las características de la estructura de bandas, como la energía del *gap*

entre las bandas de valencia y conducción,  $E_g$ , y la energía de separación de las bandas de valencia debido al acoplamiento espín-órbita,  $\Delta$ , aparecen en el factor que antecede a las dos integrales mencionadas arriba y dependen de cada sistema en particular. Los valores para éstas cantidades junto con los de la constante dieléctrica del material considerado,  $\epsilon$ , la masa efectiva en la banda de conducción,  $m^*$  y el número de onda de apantallamiento de Thomas-Fermi figuran en la tabla 3.1.

Tabla 3.1: Parámetros característicos de los materiales estudiados

<b>Sistema</b>	$\epsilon$	$m^*/m_{e^-}$	$E_g$ ( <i>meV</i> )	$\Delta$ ( <i>meV</i> )	$q_{TF}$ ( <i>nm</i> <sup>-1</sup> )
<b>GaAs</b>	13.1	0.067	1519	341	0.2
<b>InAs</b>	15.1	0.022	420	380	0.055
<b>InSb</b>	16.8	0.015	240	810	0.0337

En el presente trabajo se estudia la dependencia del tiempo de relajación de espín con algunos de los parámetros anteriormente citados, a saber: la distancia a las impurezas, la densidad de impurezas, la densidad de desbalance de espín y la temperatura.

### 3.1. $T_1$ vs $d$

En primer lugar se determinó el comportamiento del tiempo de relajación de espín al variar la distancia  $d$  que separa las capas en las que se ubican las impurezas de los bordes del pozo en el que están confinados los electrones

de la banda de conducción. En la fig. 3.1 se presentan los resultados para los tres sistemas en forma conjunta para diferentes temperaturas y valores de densidad de dopaje.

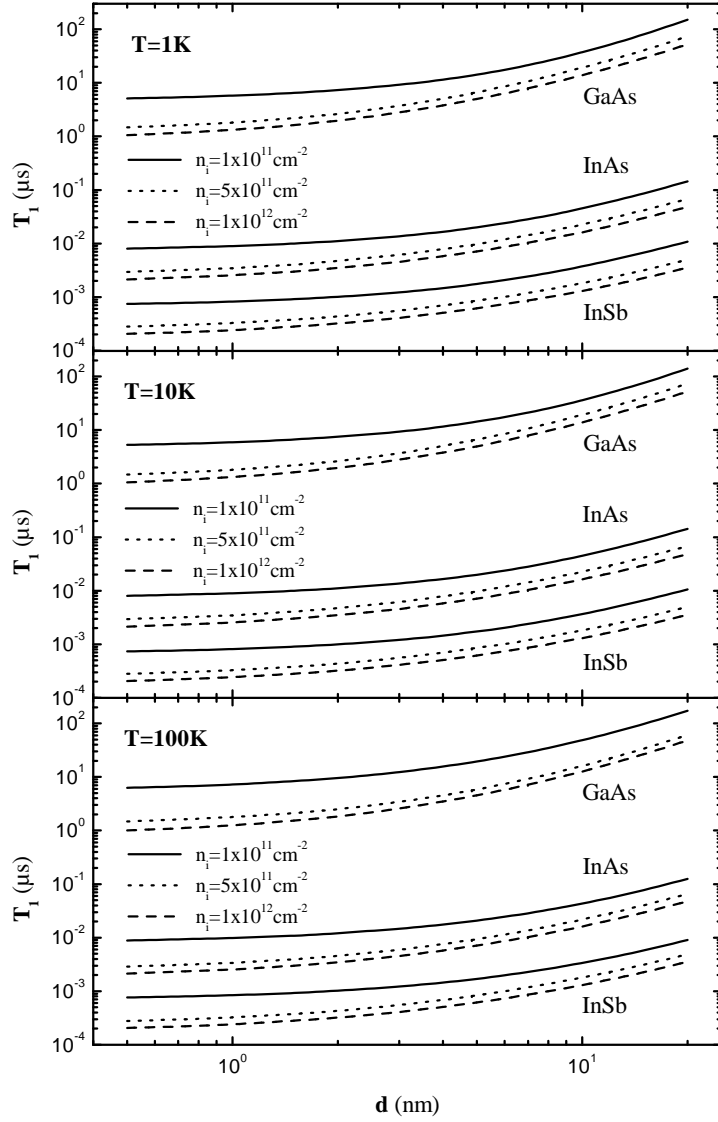


Figura 3.1: Tiempo de relajación de espín en función de la distancia a las impurezas en GaAs, InAs e InSb a temperaturas de  $1K$ ,  $10K$  y  $100K$  y diferentes valores de densidad de impurezas (Densidad relativa de desbalance de espín:  $n_{ex}/n_i = 0.1$ , ancho del pozo:  $a = 10 \text{ nm}$ ).

En dichos gráficos se observa que el tiempo de relajación de espín crece con la distancia a las impurezas en todos los materiales considerados y que, a valores fijos de  $d$ ,  $T_1$  es decreciente con la densidad de impurezas. Por otra parte también se puede apreciar los diferentes órdenes de magnitud que adopta  $T_1$  para los tres sistemas considerados, siendo éstos típicamente de  $10^0 - 10^2 \mu s$  para GaAs,  $10^{-3} - 10^{-1} \mu s$  para InAs y  $10^{-4} - 10^{-2} \mu s$  para InSb.

En las figuras 3.2 a 3.5, se exhiben en forma más detallada los resultados anteriores para cada uno de los tres sistemas considerados. En todos ellos se observa que la curva correspondiente al valor de  $n_i = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  presenta tiempos de relajación claramente superiores a los correspondientes a los otros dos valores de  $n_i$  considerados.

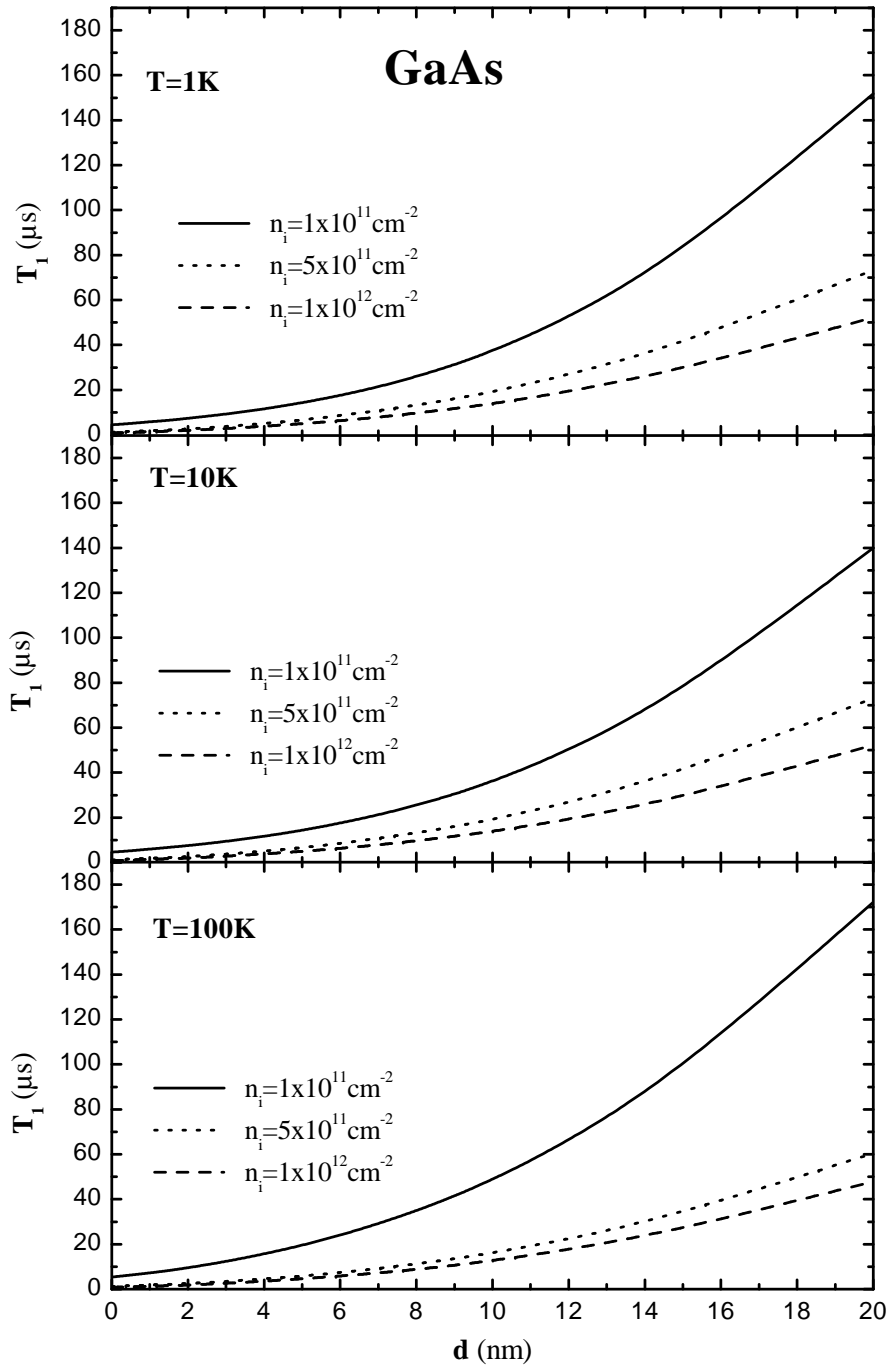


Figura 3.2: Tiempo de relajación de espín en GaAs en función de la distancia a las impurezas a temperaturas de  $1\text{K}$ ,  $10\text{K}$  y  $100\text{K}$  y distintos valores de  $n_i$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).



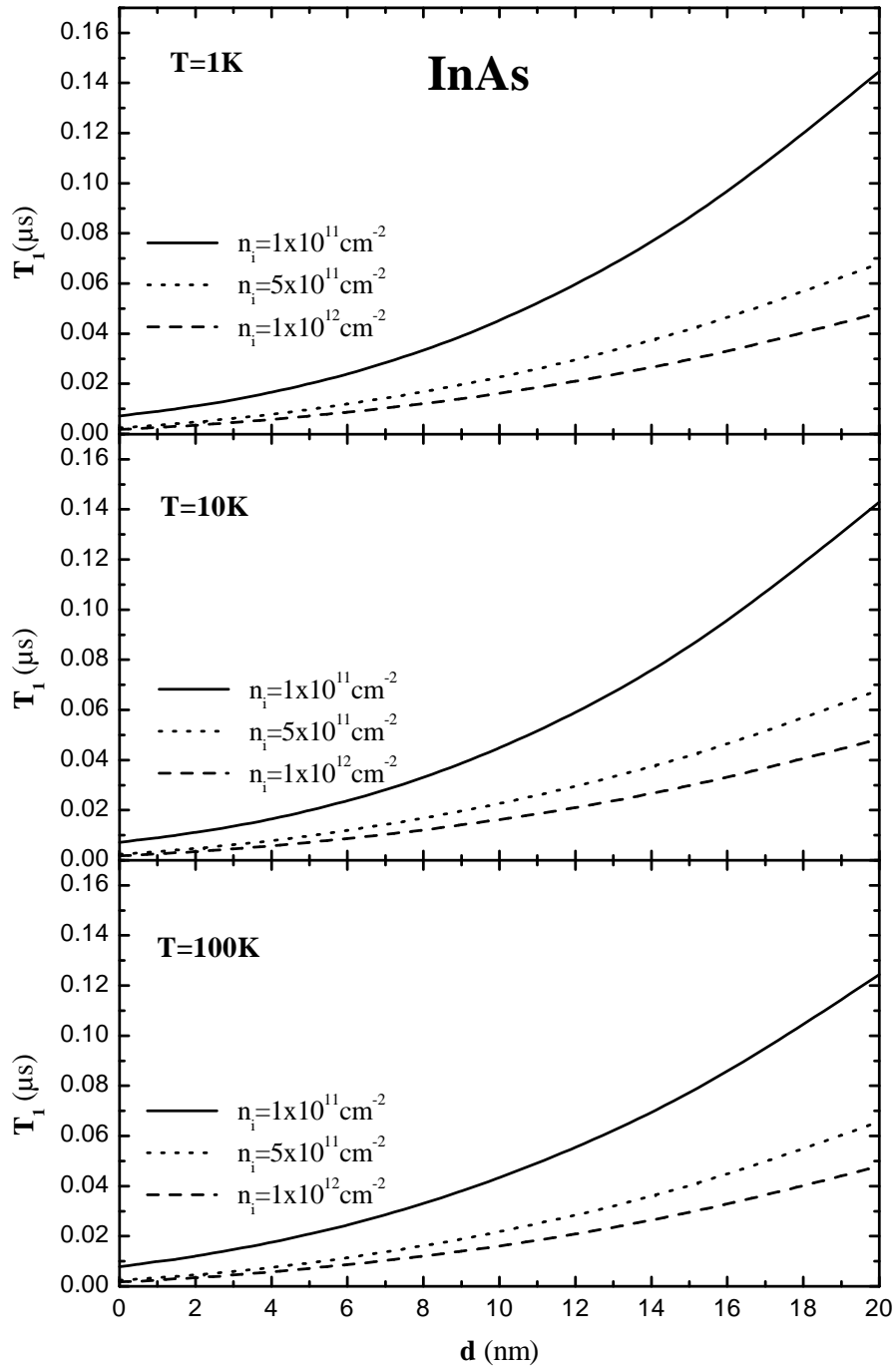


Figura 3.3: Tiempo de relajación de espín en InAs en función de la distancia a las impurezas a temperaturas de  $1\text{K}$ ,  $10\text{K}$  y  $100\text{K}$  y distintos valores de  $n_i$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

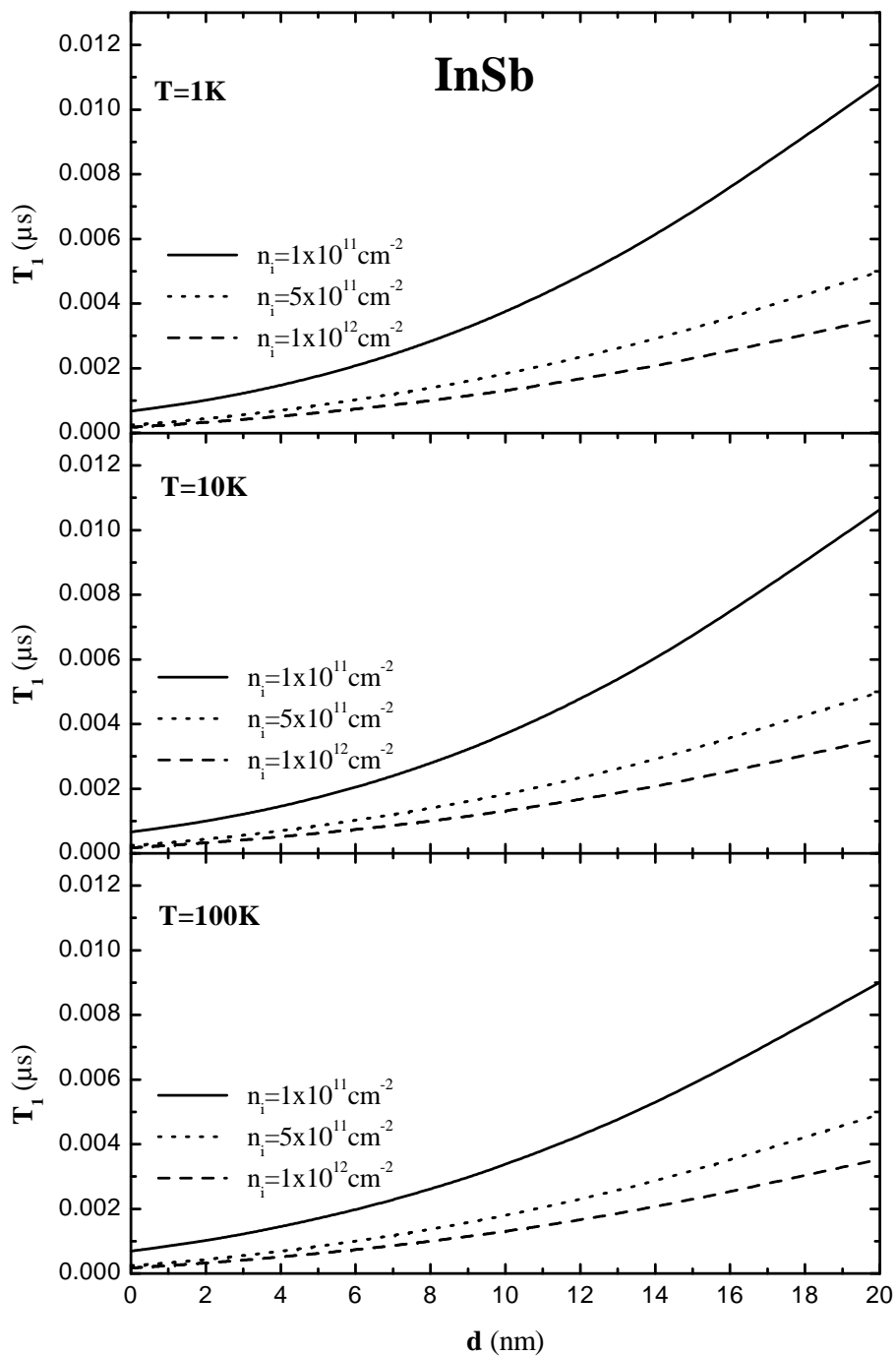


Figura 3.4: Tiempo de relajación de espín en InSb en función de la distancia a las impurezas a temperaturas de  $1K$ ,  $10K$  y  $100K$  y distintos valores de  $n_i$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

### 3.2. $T_1$ vs $n_i$

A continuación se presentan los resultados para el tiempo de relajación de espín en función de la densidad de electrones donados, o lo que es lo mismo, en función de la densidad de impurezas.

En las figuras 3.5, 3.6 y 3.7 se muestra la dependencia de  $T_1$  con  $n_i$  en cada uno de los materiales considerados, variando la distancia a las impurezas y la temperatura. El rango de densidades considerado se tomó desde  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  hasta  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , a fin de reproducir las condiciones experimentales de los trabajos citados en la Introducción.

Como característica general se observa en todos éstos gráficos el decrecimiento de  $T_1$  con  $n_i$ , y tal como se indicó en la sección 3.1, también aquí se puede apreciar el incremento de los valores de  $T_1$  con  $d$ . Es importante notar que al haberse tomado la densidad de electrones fotoexcitados relativa a  $n_i$  constante, el factor  $n_i/n_{ex}$  que aparece en la expresión (2.27) no interviene en la dependencia de  $T_1$  con la densidad de impurezas, debiéndose esta dependencia únicamente a las funciones de distribución de Fermi-Dirac incluidas en dicha expresión.

Por otra parte, es posible observar también que la dependencia de  $T_1$  con la temperatura  $T$  es muy débil en todos los casos, notándose sólo leves variaciones en las curvas correspondientes a  $T = 100K$ ,  $d = 5$  y  $10 \text{ nm}$  y a bajas densidades ( $n_i \lesssim 2 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ), respecto de aquéllas correspondientes a temperaturas menores. Estas variaciones son más notables en GaAs y en medida algo menor en InAs e InSb.

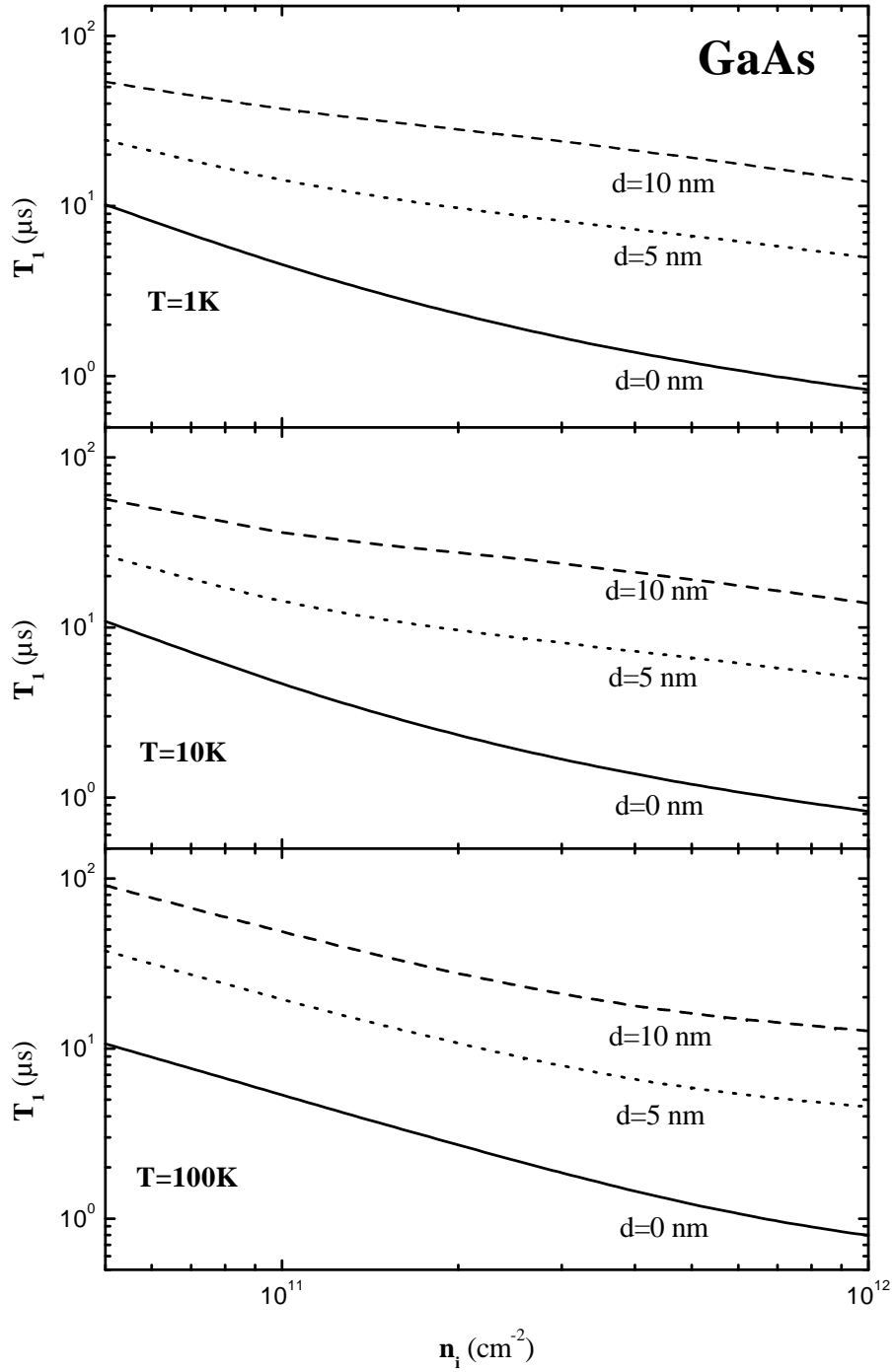


Figura 3.5: Tiempo de relajación de espín en GaAs en función de la densidad de impurezas para diferentes temperaturas y distancias a las impurezas ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10$  nm).

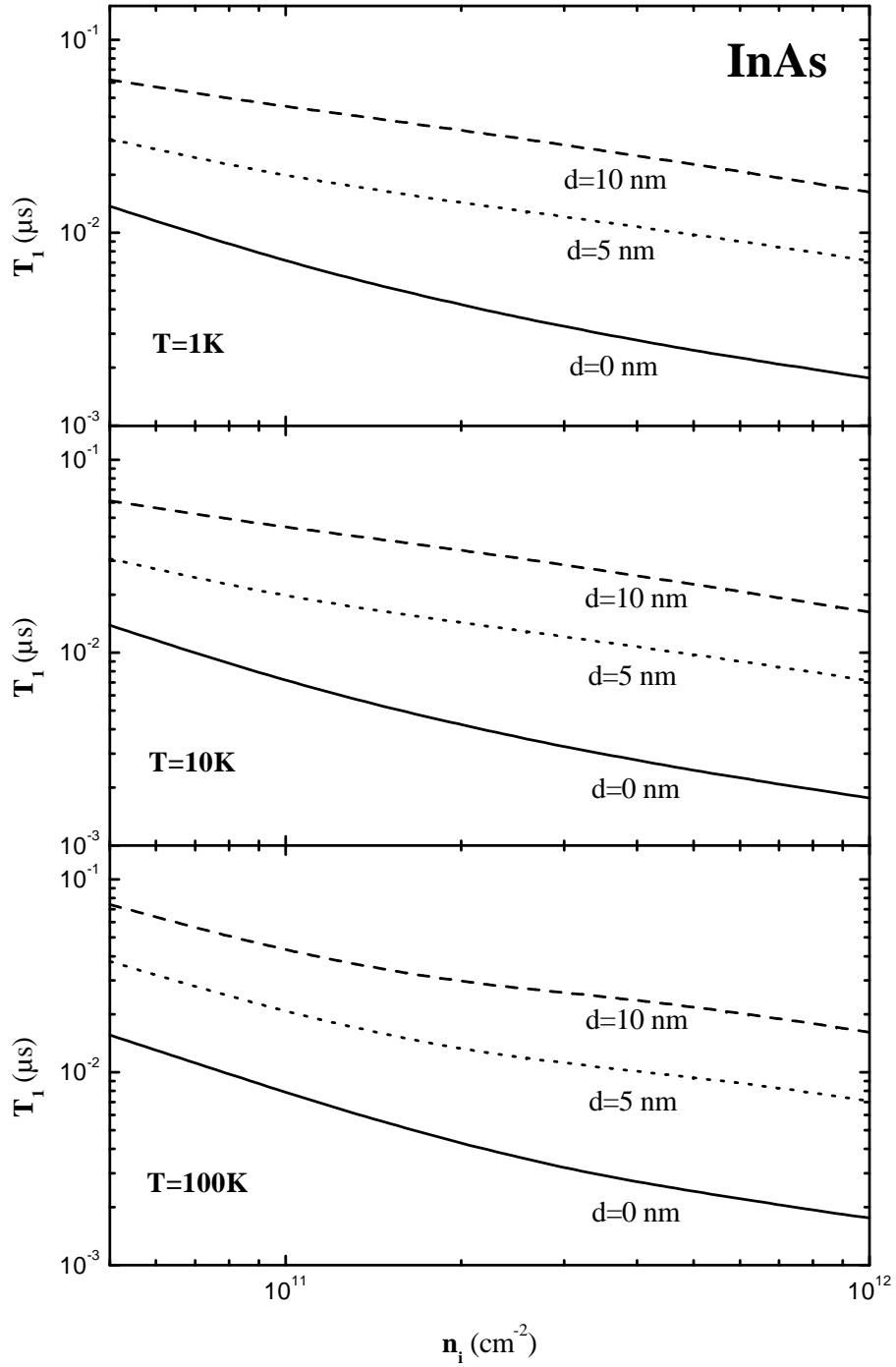


Figura 3.6: Tiempo de relajación de espín en InAs en función de la densidad de impurezas para diferentes temperaturas y distancias a las impurezas ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10\text{ nm}$ ).

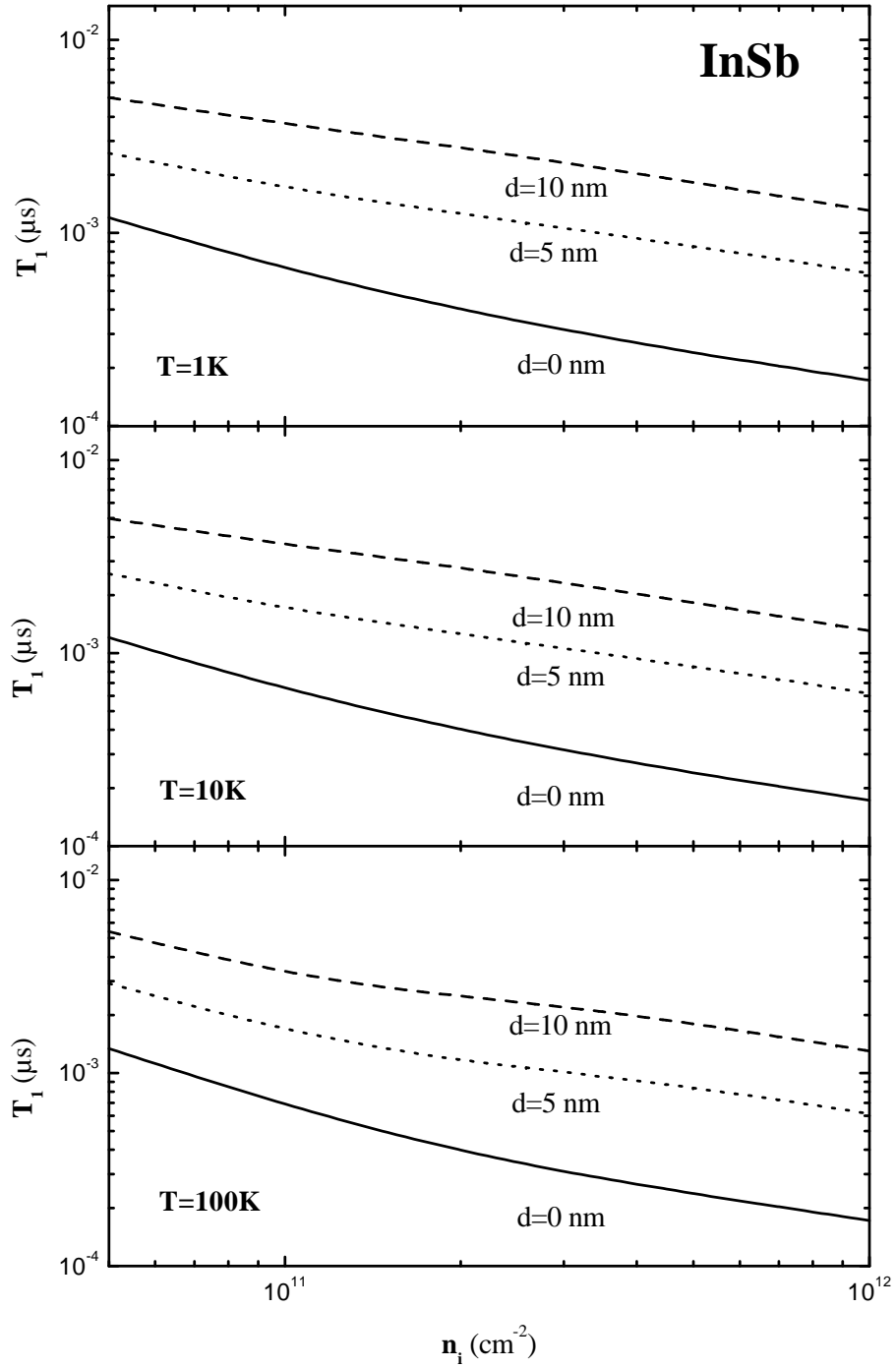


Figura 3.7: Tiempo de relajación de espín en InSb en función de la densidad de impurezas para diferentes temperaturas y distancias a las impurezas ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10$  nm).

Para temperaturas de  $1K$  y  $10K$  y distancia a las impurezas de  $5\text{ nm}$  y  $10\text{ nm}$  se aproximó la dependencia de  $T_1$  por una ley potencial de la forma  $T_1 \sim n_i^\beta$ . Los resultados de tales aproximaciones se encuentran detallados en la tabla 3.2.

Tabla 3.2: Exponentes de  $T_1 \sim n_i^\beta$

Sistema	d = 5nm		d = 10nm	
	$T = 1K$	$T = 10K$	$T = 1K$	$T = 10K$
<b>GaAs</b>	-0.49	-0.50	-0.44	-0.44
<b>InAs</b>	-0.46	-0.46	-0.45	-0.44
<b>InSb</b>	-0.46	-0.46	-0.45	-0.45

En la figura 3.8 se grafica, en forma conjunta para los tres materiales considerados, el tiempo de relajación en función de la densidad de impurezas a temperaturas de  $1, 10, 100$  y  $300K$ .

Si bien se observa en esta figura que la dependencia de  $T_1$  con  $n_i$  es similar en los tres semiconductores, los órdenes de magnitud que adopta el tiempo de relajación en cada material son distintos, existiendo aproximadamente una diferencia de tres órdenes entre los valores para el GaAs y el InAs, y de un orden de magnitud entre éste último y el InSb, coincidiendo con lo observado en la sección 3.1.

Nuevamente aquí es posible observar la débil dependencia de  $T_1$  con la temperatura, aún cuando ésta varía en dos órdenes de magnitud en los diferentes gráficos de la figura 3.8.

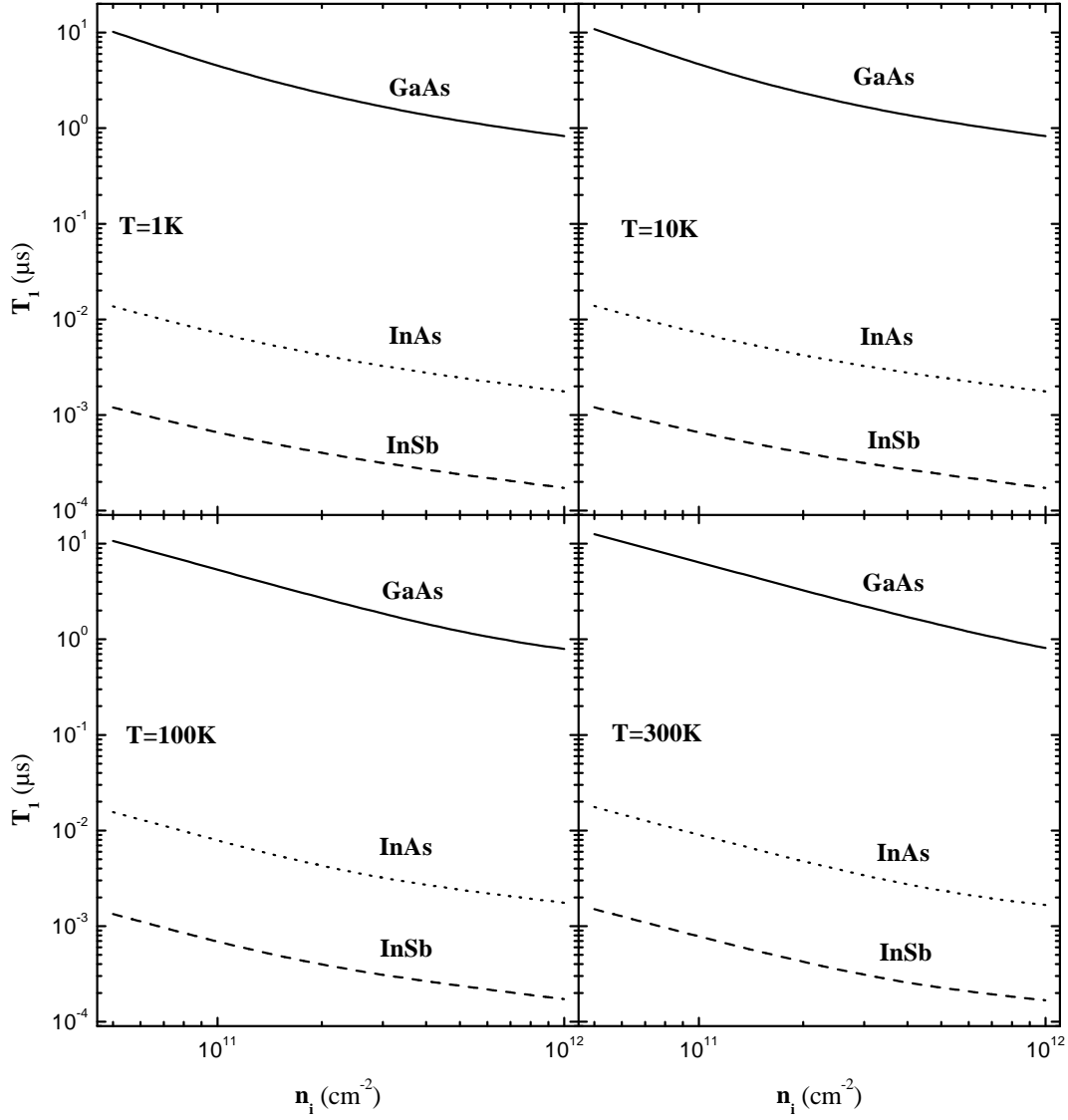


Figura 3.8: Tiempo de relajación de espín en GaAs, InAs e InSb en función de la densidad de impurezas para temperaturas de  $1K$ ,  $10K$ ,  $100K$  y  $300K$  ( $d = 0 \text{ nm}$ ,  $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

Para apreciar mejor esta última afirmación, se confeccionaron gráficos para cada uno de los materiales, donde las curvas de  $T_1$  vs  $n_i$  se calcularon a las temperaturas antedichas. Éstos gráficos se presentan en las figuras 3.9, 3.10 y 3.11.



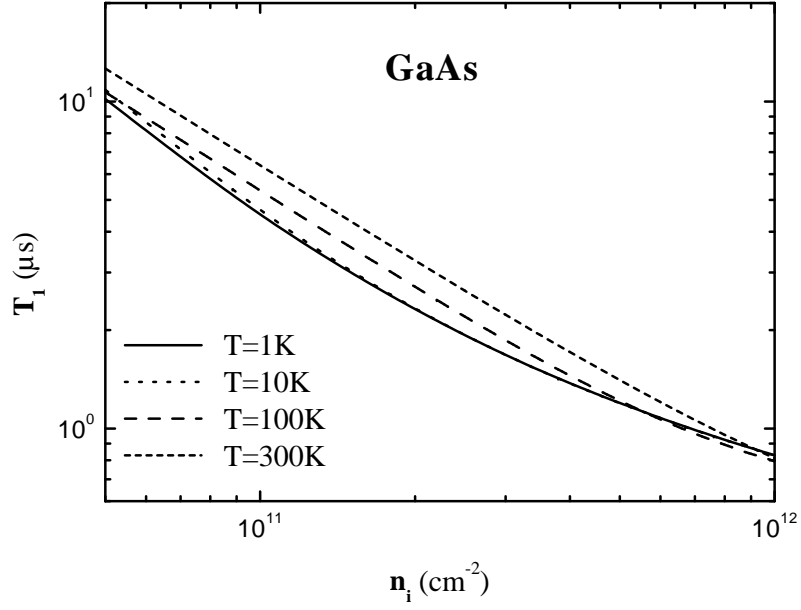


Figura 3.9: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de impurezas en GaAs a temperaturas de  $1\text{K}$ ,  $10\text{K}$ ,  $100\text{K}$  y  $300\text{K}$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $d = 0 \text{ nm}$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

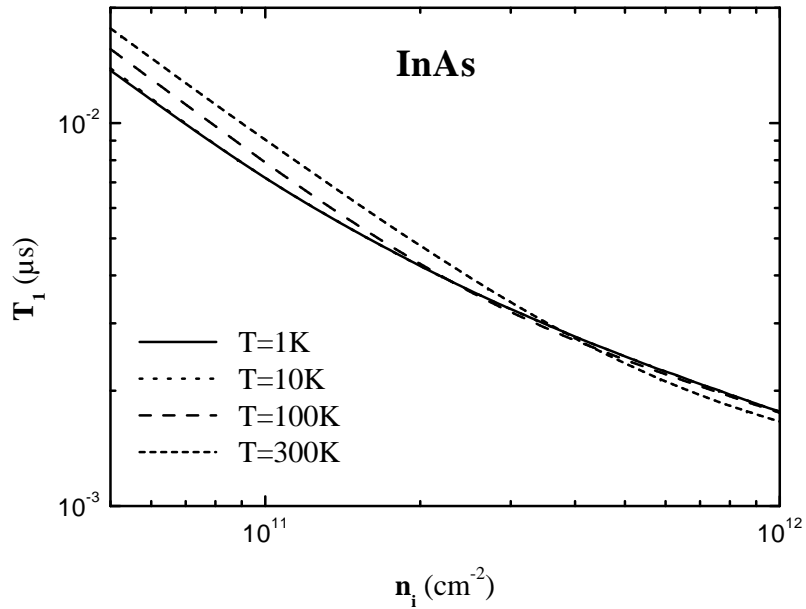


Figura 3.10: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de impurezas en InAs a temperaturas de  $1\text{K}$ ,  $10\text{K}$ ,  $100\text{K}$  y  $300\text{K}$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $d = 0 \text{ nm}$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

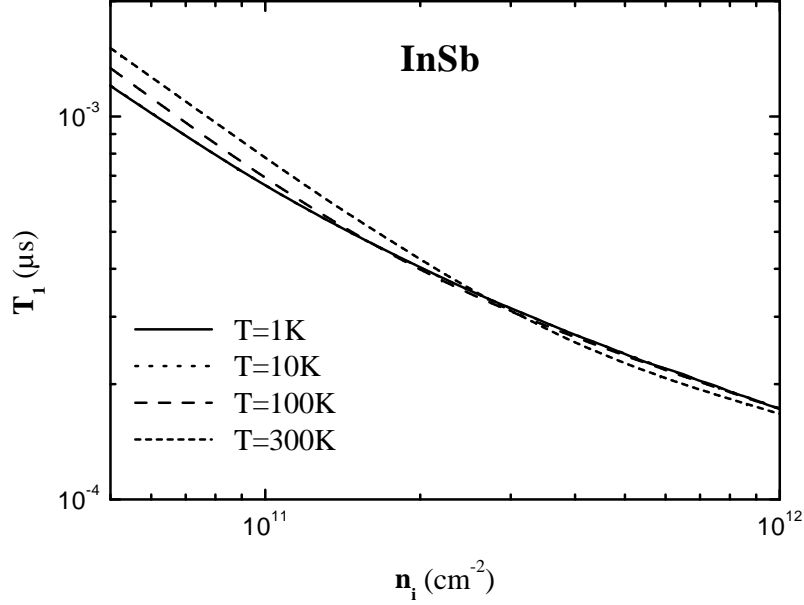


Figura 3.11: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de impurezas en InSb a temperaturas de  $1K$ ,  $10K$ ,  $100K$  y  $300K$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $d = 0 nm$ ,  $a = 10 nm$ ).

En todos éstos gráficos pueden distinguirse algunas características en común. En primer lugar las curvas correspondientes a temperaturas de  $1K$  y  $10K$  son prácticamente coincidentes para todo el rango de  $n_i$  considerado. Por otra parte también se observan en todos los casos que a densidades bajas los valores de  $T_1$  para las curvas correspondientes a altas temperaturas ( $100K$  y  $300K$ ) superan a los de las curvas correspondientes a bajas temperaturas ( $1K$  y  $10K$ ), mientras que para densidades mayores esta relación se invierte. Los valores aproximados de las densidades para las cuales se producen las intersecciones entre la curva con  $T = 1K$  y las curvas con  $T = 100K$  y  $T = 300K$ , denotadas por  $n_i^{(100K)}$  y  $n_i^{(300K)}$ , respectivamente, se han consignado en la tabla 3.3. En tercer lugar se puede mencionar que la disminución total de  $T_1$  en todo el rango considerado para  $n_i$  es de aproximadamente un orden de magnitud respecto del valor correspondiente a  $n_i = 5 \times 10^{10} cm^{-2}$ . Esto es, aproximadamente,  $10\mu s$  para GaAs,  $14ns$  para InAs y  $1.1ns$  para InSb;

aunque se observa un ligero incremento de estos valores con la temperatura.

Tabla 3.3: Valores aproximados (en  $cm^{-2}$ ) para  $n_i^{(100K)}$  y  $n_i^{(300K)}$

Sistema	$n_i^{(100K)}$	$n_i^{(300K)}$
<b>GaAs</b>	$5.5 \times 10^{11}$	$9.9 \times 10^{11}$
<b>InAs</b>	$2.3 \times 10^{11}$	$3.8 \times 10^{11}$
<b>InSb</b>	$1.6 \times 10^{11}$	$2.8 \times 10^{11}$

### 3.3. $T_1$ vs $T$

Como ya ha sido mencionado anteriormente en el presente trabajo, la dependencia con la temperatura encontrada para  $T_1$  es muy débil, llegando a ser prácticamente nula para temperaturas bajas. Este comportamiento se exhibe en las figuras 3.12, 3.13 y 3.14, donde se presenta el tiempo de relajación en función de la temperatura para distintos valores de densidades de impurezas en cada uno de los materiales considerados.

En el caso del GaAs, que se muestra en la figura 3.12, para densidades mayores que  $3 \times 10^{11} cm^{-2}$ ,  $T_1$  se mantiene independiente de  $T$  hasta los  $60K$  aproximadamente. Para el InAs (figura 3.13) esta situación se mantiene hasta los  $80K$  aproximadamente, mientras que para el InSb (figura 3.14) esta temperatura es de  $120K$ .

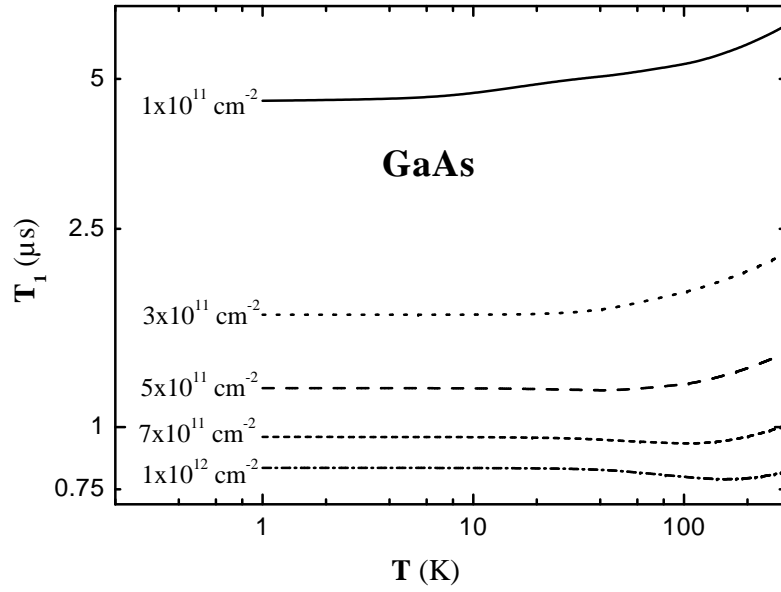


Figura 3.12: Tiempo de relajación de espín en función de la temperatura en GaAs para  $n_i = 1, 3, 5, 7, 10 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1, d = 0 \text{ nm}, a = 10 \text{ nm}$ ).

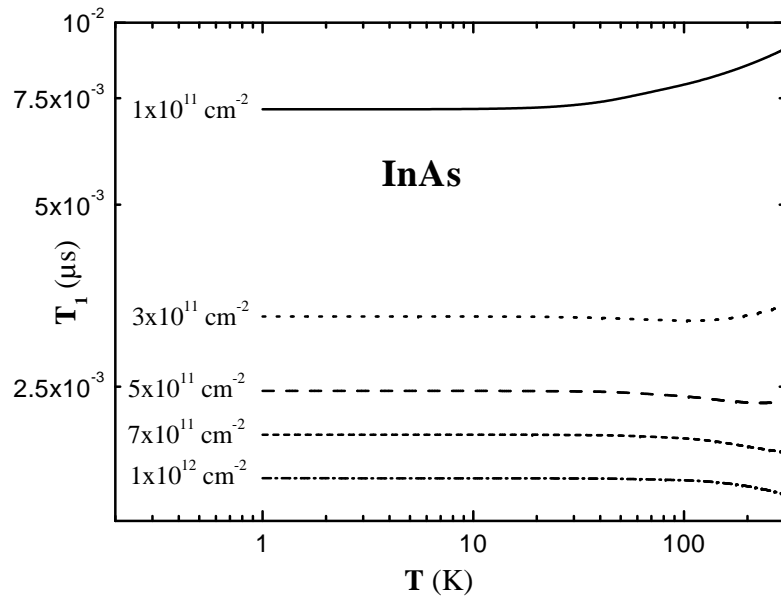


Figura 3.13: Tiempo de relajación de espín en función de la temperatura en InAs para  $n_i = 1, 3, 5, 7, 10 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1, d = 0 \text{ nm}, a = 10 \text{ nm}$ ).

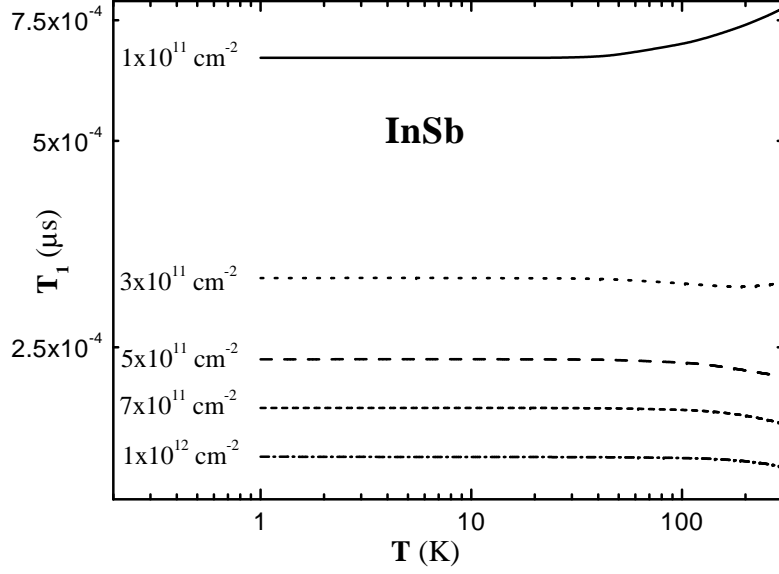


Figura 3.14: Tiempo de relajación de espín en función de la temperatura en InSb para  $n_i = 1, 3, 5, 7, 10 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  ( $n_{ex}/n_i = 0.1$ ,  $d = 0 \text{ nm}$ ,  $a = 10 \text{ nm}$ ).

A temperaturas mayores que las citadas para los distintos sistemas aparece una ligera dependencia de  $T_1$  con  $T$ , que para el GaAs se manifiesta como un incremento del tiempo de relajación a densidades  $\lesssim 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Para el InAs y el InSb, en cambio, el incremento de  $T_1$  con la temperatura se produce a densidades  $\lesssim 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , mientras que a densidades mayores que este valor el tiempo de relajación sufre una leve disminución con la temperatura.

### 3.4. $T_1$ vs $n_{ex}$

Por último se presentan los resultados de los cálculos del tiempo de relajación de espín en función de la densidad de electrones fotoexcitados,  $n_{ex}$ . Dichos cálculos se llevaron a cabo para una densidad de impurezas de  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y diversos valores de temperatura. El rango de valores de  $n_{ex}$  se tomó de tal manera que  $0.01 \leq n_{ex}/n_i \leq 0.5$ , o lo que es lo mismo,  $1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \leq n_{ex} \leq 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . Estos resultados se muestran para cada sistema en las figuras 3.15 (GaAs), 3.16 (InAs) y 3.17 (InSb).

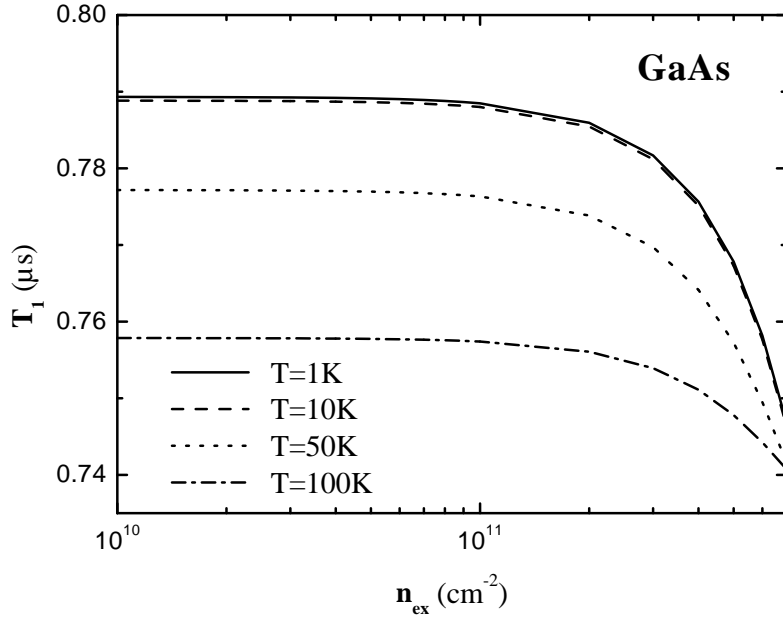


Figura 3.15: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de electrones fotoexcitados en GaAs a temperaturas de 1K, 10K, 50K y 100K ( $n_i = 1 \times 10^{12} cm^{-2}$ ,  $d = 0 nm$ ,  $a = 10 nm$ ).

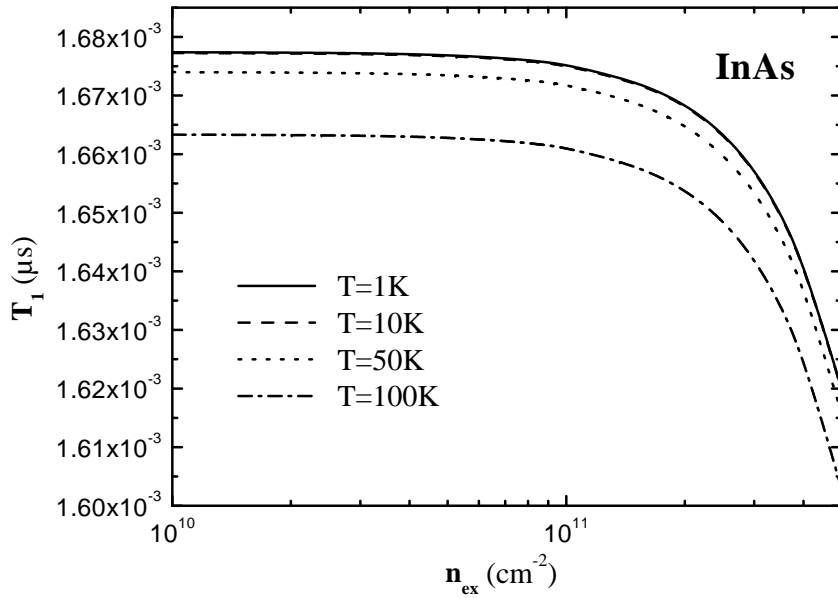


Figura 3.16: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de electrones fotoexcitados en InAs a temperaturas de 1K, 10K, 50K y 100K ( $n_i = 1 \times 10^{12} cm^{-2}$ ,  $d = 0 nm$ ,  $a = 10 nm$ ).

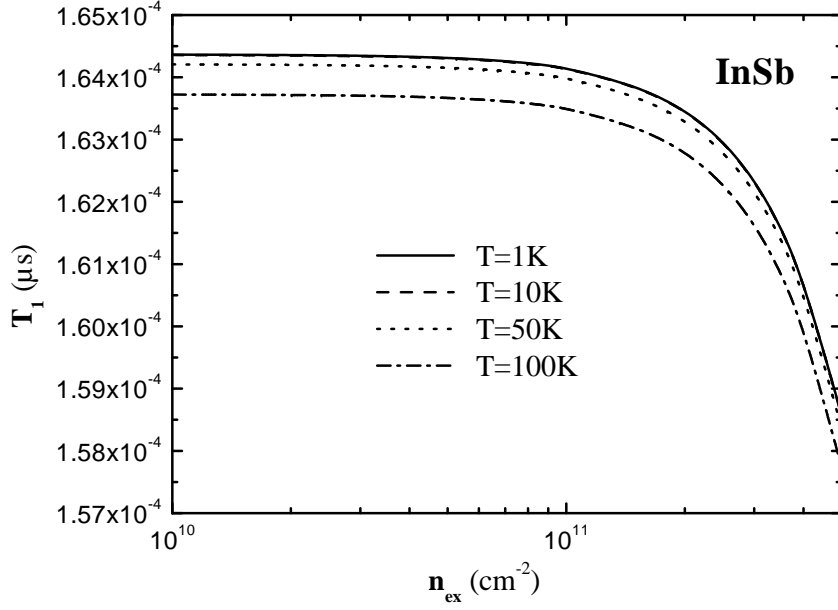


Figura 3.17: Tiempo de relajación de espín en función de la densidad de electrones fotoexcitados en InSb a temperaturas de  $1K$ ,  $10K$ ,  $50K$  y  $100K$  ( $n_i = 1 \times 10^{12} cm^{-2}$ ,  $d = 0 nm$ ,  $a = 10 nm$ ).

En todas estas curvas se observa que  $T_1$  se mantiene aproximadamente constante para valores de  $n_{ex} \lesssim 1 \times 10^{11} cm^{-2}$ , mostrando luego un marcado decrecimiento para densidades mayores que el citado valor. También aquí es posible constatar la escasa dependencia que exhibe  $T_1$  con la temperatura, sobre todo en las curvas correspondientes a  $T = 1$  y  $10K$ , las cuales prácticamente son coincidentes en cada uno de los materiales estudiados.

# Capítulo 4

## Análisis y Discusión

En el presente capítulo se desarrolla el análisis de los resultados presentados en el capítulo 3.

En primer lugar se establecen las temperaturas características para las poblaciones de espín en cada uno de los materiales estudiados. Luego se analiza con detalle la dependencia del tiempo de relajación de espín con la distancia a las impurezas, la densidad de electrones donados, la temperatura y la densidad de electrones fotoexcitados.

### 4.1. Temperaturas Características

La utilización de funciones de distribución de Fermi-Dirac en la expresión (2.27) para la inversa del tiempo de relajación de espín,  $1/T_1$ , se justifica comparando el rango de temperaturas utilizado en los cálculos con las temperaturas características de los sistemas considerados, *i.e.*, las temperaturas de Fermi de dichos sistemas.

Para una población bidimensional de electrones con proyección de espín  $\sigma$  en el eje  $z$  y densidad  $n_\sigma$ , su temperatura de Fermi está dada por



$$T_{F\sigma} = \frac{E_{F\sigma}}{k_B} = \frac{2\pi\hbar^2 n_\sigma}{m^* k_B}, \quad (4.1)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva de los electrones en la banda de conducción y se ha utilizado el límite de temperatura cero en la expresión (2.29) para el potencial químico  $\mu_\sigma(T)$ .

La ecuación (4.1) muestra entonces que la temperatura de Fermi crece linealmente con la densidad para el caso de poblaciones bidimensionales. Los valores de estas temperaturas para los diferentes materiales estudiados aparecen en la tabla 4.1 y han sido calculados para diferentes densidades de electrones donados.

Tabla 4.1: Temperaturas de Fermi para GaAs, InAs e InSb.

Sistema	$T_F$ (K)		
	$n_i = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$	$n_i = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$	$n_i = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$
<b>GaAs</b>	41.58	82.96	829.75
<b>InAs</b>	126.35	252.70	2527.00
<b>InSb</b>	185.31	370.62	3706.20

Dado que muchas veces se han utilizado para el cálculo de  $T_1$  temperaturas que verifican que  $T \lesssim T_F$ , la utilización de la estadística de Fermi-Dirac en la descripción de las dos poblaciones de espín resulta ser más apropiada que la de Maxwell-Boltzmann.

## 4.2. Dependencia con $d$

En la expresión (2.27) hallada para  $1/T_1$ , la información sobre la distancia  $d$  entre las impurezas ionizadas y el gas bidimensional de electrones se

encuentra únicamente en el factor  $\exp(-2qd)$  del integrando en la variable  $\theta'$ . Es claro entonces que la influencia de este parámetro sobre  $T_1$  es la de incrementar su valor al alejar las impurezas y disminuirlo al acercarlas. Este efecto se puede visualizar graficando el resultado de la integración en  $\theta'$  en función del número de onda  $k$ , para diferentes valores de  $d$ .

Denotando con  $I_d(k)$  a la integral en la variable  $\theta'$ :

$$I_d(k) \equiv \int_0^{2\pi} d\theta' \frac{e^{-2q|d|}(1 - e^{-qa})^2}{(a^2q^2 + 4\pi^2)^2(q + q_{TF})^2}, \quad (4.2)$$

la figura (4.1) muestra el gráfico de  $kI_d(k)$  vs  $k$  para valores de  $d$  de 0, 5, 10 y 20 nm en GaAs. Es posible observar allí la rápida disminución de  $kI_d(k)$  a medida que aumentan los valores de  $d$ , originando así el comportamiento exhibido por  $T_1$  en las figuras 3.1-3.4.

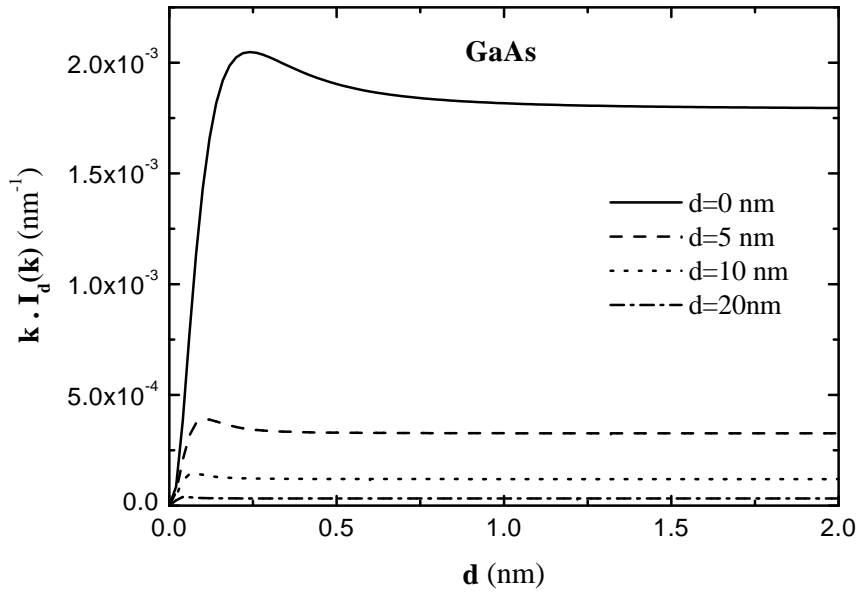


Figura 4.1: Gráfico de  $kI_d(k)$  para GaAs en función del número de onda  $k$  para  $d = 0, 5, 10$  y  $20$  nm ( $a = 10$  nm).

Otro hecho destacable que se aprecia en la figura 4.1 es el valor aproximadamente constante que adoptan estas curvas a partir de algún valor de  $k$  determinado (típicamente  $k \gtrsim 0.3 \text{ nm}^{-1}$  para  $d \gtrsim 5 \text{ nm}$  en GaAs).

Los curvas correspondientes para InAs e InSb, no presentadas aquí, tienen características completamente similares a las de la figura 4.1, dado que sólo difieren de ellas en el valor del número de onda de apantallamiento de Thomas-Fermi,  $q_{TF}$ .

### 4.3. Dependencia con $n_i$

En la expresión (2.27) la dependencia del tiempo de relajación de espín con la densidad de electrones donados proviene, en el caso que la razón entre  $n_{ex}$  y  $n_i$  se mantenga constante, únicamente de las funciones de distribución de Fermi-Dirac para las dos poblaciones de espín.

Como es bien conocido, a  $T = 0K$  estas funciones de distribución adoptan la siguiente forma

$$f_{\sigma}(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } k \leq k_{F_{\sigma}} \\ 0 & \text{si } k \geq k_{F_{\sigma}}, \end{cases} \quad (4.3)$$

donde  $k_{F_{\sigma}} = \sqrt{4\pi n_{\sigma}}$  para un gas bidimensional de electrones cuya densidad (bidimensional) es  $n_{\sigma}$ . Las funciones de distribución a  $T = 0K$  para ambas poblaciones de espín se muestran en la figura 4.2(a).

La diferencia entre ambas distribuciones,  $f_{\uparrow}(k) - f_{\downarrow}(k)$ , cumple entonces que

$$f_{\uparrow}(k) - f_{\downarrow}(k) = \begin{cases} 1 & \text{si } k_{F_{\downarrow}} \leq k \leq k_{F_{\uparrow}} \\ 0 & \text{en otro caso,} \end{cases} \quad (4.4)$$

tal como se muestra en la figura 4.2(b). El ancho de este ‘escalón’ está dado por

$$\Delta k = \sqrt{4\pi n_{\uparrow}} - \sqrt{4\pi n_{\downarrow}}. \quad (4.5)$$

Si, como se mencionó anteriormente, se toma  $n_{ex}/n_i \equiv \alpha = cte.$ , la expresión anterior para el ancho del escalón puede reescribirse como

$$\Delta k = \frac{2\alpha\sqrt{2\pi n_i}}{\sqrt{1+\alpha} + \sqrt{1-\alpha}}, \quad (4.6)$$

donde se han utilizado los valores de  $n_{\uparrow}$  y  $n_{\downarrow}$  dadas por las relaciones (2.2) y (2.3).

Entonces se desprende que en estas condiciones el ancho del escalón cumple  $\Delta k \sim \sqrt{n_i}$ .

Para el rango de valores de  $k$  tales que  $f_{\uparrow} - f_{\downarrow} \neq 0$ , la función  $kI_d(k)$  mencionada en el apartado anterior tiene una variación lenta para valores de  $d \gtrsim 5 \text{ nm}$  (figura 4.2(c)) de modo que la integral  $\int_0^{\infty} [f_{\uparrow} - f_{\downarrow}]kI_d(k)dk$  que aparece en (2.27) puede aproximarse como

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} [f_{\uparrow} - f_{\downarrow}]kI_d(k)dk &\approx cte \int_0^{\infty} [f_{\uparrow} - f_{\downarrow}]dk \\ &= cte \frac{2\alpha\sqrt{2\pi n_i}}{\sqrt{1+\alpha} + \sqrt{1-\alpha}}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Este resultado, que es válido a  $T = 0K$ , es aproximado para valores de  $T$  tales que  $T \ll T_F$ , y establece entonces que para estas temperaturas el tiempo de relajación de espín depende de la densidad de impurezas en la forma  $T_1 \sim n_i^{-0.5}$ .

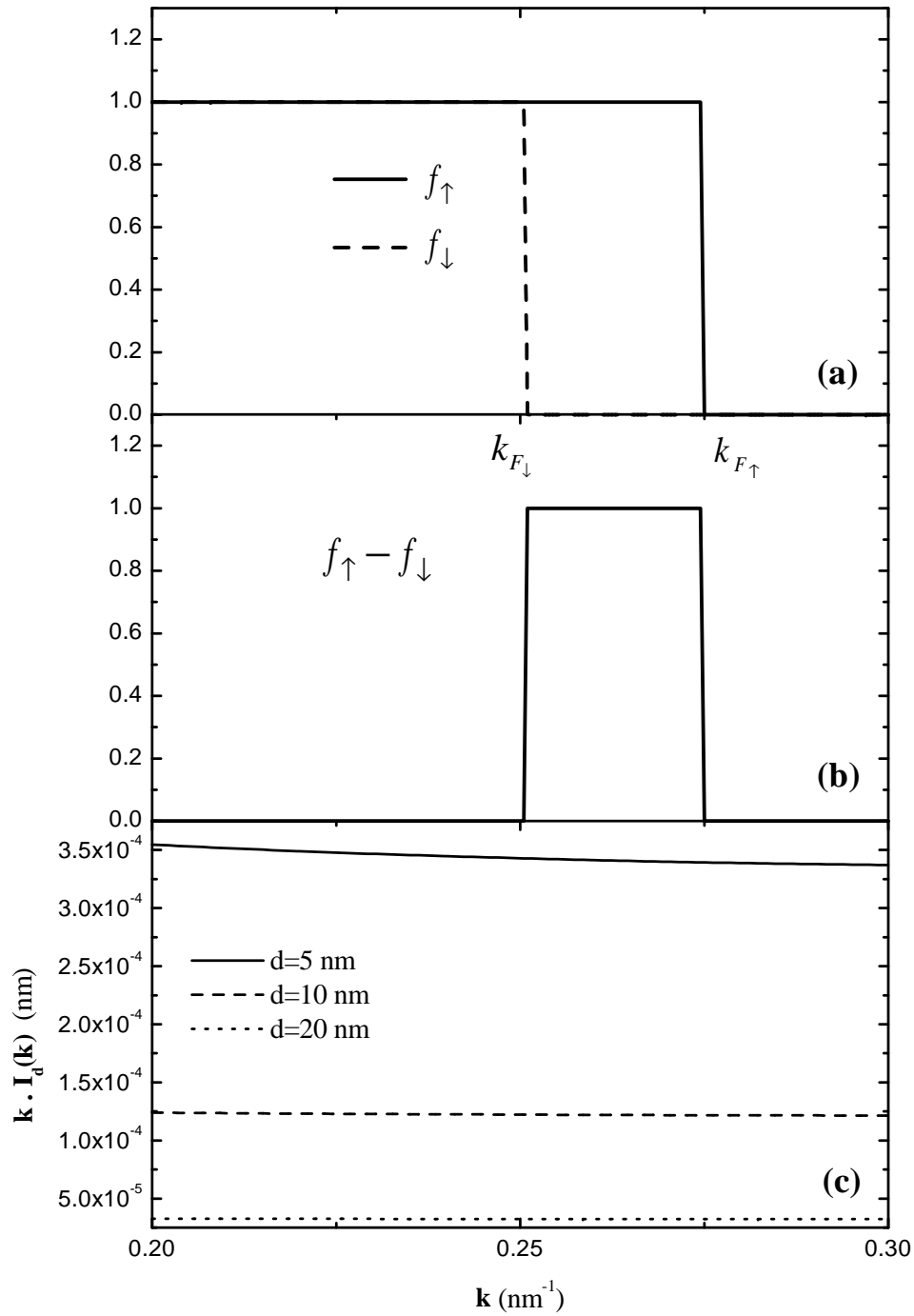


Figura 4.2: (a) Funciones de distribución de Fermi-Dirac a  $T = 0K$  correspondientes a las poblaciones de espín *up* ( $f_{\uparrow}$ ) y *down* ( $f_{\downarrow}$ ) en GaAs, para valores de  $n_i = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  y  $n_{ex} = 1 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ . (b) Diferencia entre ambas funciones de distribución. (c) Gráfico de  $kI_d(k)$  para  $d = 5, 10$  y  $20 \text{ nm}$  en GaAs.

Esta dependencia de  $T_1$  con  $n_i$  a bajas temperaturas puede compararse con los valores que figuran en la tabla 3.2 del capítulo anterior donde los exponentes de la aproximación  $T_1 \sim n_i^\beta$  son todos cercanos a  $-0.5$ .

A temperaturas mayores la integral  $\int_0^\infty [f_\uparrow - f_\downarrow] dk$  pierde esta dependencia con  $n_i$ , pero, aún así, es posible verificar numéricamente su crecimiento con la densidad de electrones donados, produciendo, de esta forma, el comportamiento observado para  $T_1$  (figuras 3.5 –3.11).

## 4.4. Dependencia con T

En todos los sistemas estudiados se observa una dependencia con la temperatura muy débil, sobre todo a bajas temperaturas (figuras 3.12 –3.14). Sin embargo a temperaturas mayores (típicamente  $T \gtrsim 30K$  en GaAs,  $T \gtrsim 50K$  en InAs y  $T \gtrsim 80K$  en InSb), el comportamiento del tiempo de relajación con la temperatura cambia, según el valor tomado para  $n_i$ , resultando decreciente para valores de  $n_i \gtrsim 7 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  para el GaAs y  $n_i \gtrsim 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  para el InAs y el InSb. A valores de  $n_i$  menores que los citados, en cambio, el tiempo de relajación crece con la temperatura.

Este comportamiento se explica nuevamente por la presencia de la diferencia entre las distribuciones de Fermi-Dirac para las dos poblaciones de espín. En la misma aproximación hecha en el párrafo anterior, donde se toma el valor de  $kI_d(k)$  aproximadamente constante en el rango donde  $f_\uparrow - f_\downarrow$  toma valores apreciables, se puede ver en forma numérica que el aumento de la temperatura lleva a que el valor de la integral  $\int_0^\infty [f_\uparrow - f_\downarrow] dk$  aumente para densidades  $n_i \gtrsim 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , provocando así la disminución de  $T_1$  con la temperatura. En cambio, a densidades más bajas, el rango de números de onda para los cuales  $f_\uparrow - f_\downarrow \neq 0$  ocurre para valores de  $k$  más pequeños

(análogamente a lo que pasa a  $T = 0K$ , ec.(4.6)), para los cuales la función  $kI_d(k)$  toma menores valores y varía más rápidamente (figura 4.1), llevando entonces a un aumento del tiempo de relajación dado por (2.27) con la temperatura.

## 4.5. Dependencia con $n_{ex}$

La dependencia de  $T_1$  con  $n_{ex}$  proviene de dos diferentes factores en la expresión (2.27): en primer lugar, de la diferencia entre las funciones de distribución de Fermi-Dirac y, en segundo lugar, del factor  $n_i/n_{ex}$ , que, a diferencia de los cálculos anteriores, no se tomó constante. A temperaturas  $T \ll T_F$  (lo que ocurre en casi todos los casos aquí considerados, salvo a  $T = 100$  y  $200K$  en GaAs), la integral  $\int_0^\infty [f_\uparrow - f_\downarrow]kI_d(k)dk$  resulta proporcional a  $\Delta k$ , tal como se mencionó en los apartados anteriores. En el presente caso es conveniente expresar el  $\Delta k$  dado por (4.5), como

$$\Delta k = \frac{n_{ex}}{\sqrt{\frac{n_i}{2} + \frac{n_{ex}}{2}} + \sqrt{\frac{n_i}{2} - \frac{n_{ex}}{2}}}, \quad (4.8)$$

por lo tanto la variación de  $T_1$  con  $n_{ex}$  en estas condiciones es

$$\begin{aligned} T_1 &\sim \frac{n_{ex}}{n_i} \Delta k = \frac{n_{ex}}{n_i} \frac{\sqrt{\frac{n_i}{2} + \frac{n_{ex}}{2}} + \sqrt{\frac{n_i}{2} - \frac{n_{ex}}{2}}}{n_{ex}} \\ &= \frac{\sqrt{\frac{n_i}{2} + \frac{n_{ex}}{2}} + \sqrt{\frac{n_i}{2} - \frac{n_{ex}}{2}}}{n_i}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Esta forma para la dependencia de  $T_1$  con  $n_{ex}$  es justamente la que se observa en las curvas de las figuras 3.15 –3.17 del capítulo 3. Como ejemplo de lo afirmado se puede calcular mediante (4.9) la variación relativa de  $T_1$  en el rango completo de  $n_{ex}$  considerado en dichas figuras, tomando como valor para  $n_i$  el consignado allí ( $n_i = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ), esto es, para valores de

$n_{ex}/n_i$  que van desde 0.01 hasta 0.5. La variación relativa de  $T_1$  así calculada es

$$\frac{T_1(0.5)}{T_1(0.01)} \approx 0.9659, \quad (4.10)$$

mientras que los valores obtenidos por el cálculo de la expresión (2.25) para los materiales analizados a diferentes temperaturas se presentan a continuación en la tabla 4.2

Tabla 4.2: Variación relativa de  $T_1$  en el rango  $0.01 \leq n_{ex}/n_i \leq 0.5$   
( $n_i = 1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ).

<b>Sistema</b>	<b><math>T_1(0.5)/T_1(0.01)</math></b>		
	$T = 1K$	$T = 50K$	$T = 100K$
<b>GaAs</b>	0.9728	0.9744	0.9867
<b>InAs</b>	0.9658	0.9652	0.9636
<b>InSb</b>	0.9648	0.9644	0.9634

Como se puede apreciar la concordancia de estos valores con el calculado en (4.10) se mantiene aún temperaturas relativamente elevadas.

## 4.6. Comparación con Experimentos

En esta sección se procederá a comparar los resultados obtenidos en el presente trabajo con algunos resultados, tanto teóricos como experimentales, que, en sistemas similares a los aquí considerados, han sido publicados en la literatura sobre el tema.



En primer lugar, y a fin de comparar con los resultados del trabajo de Ohno *et al.* [10], en el que se muestran mediciones del tiempo de relajación de espín en pozos cuánticos de GaAs efectuadas para diferentes valores de  $E_1$  (energía de confinamiento de los electrones en el pozo cuántico), se presenta en la figura 4.3, la curva obtenida para  $T_1$  en función de  $E_1$  a partir de la expresión (2.27). Este cálculo se hizo para valores de  $n_i = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $n_{ex} = 0.1n_i$ ,  $T = 300\text{K}$ , y distancia a las impurezas  $d = 5 \text{ nm}$ .

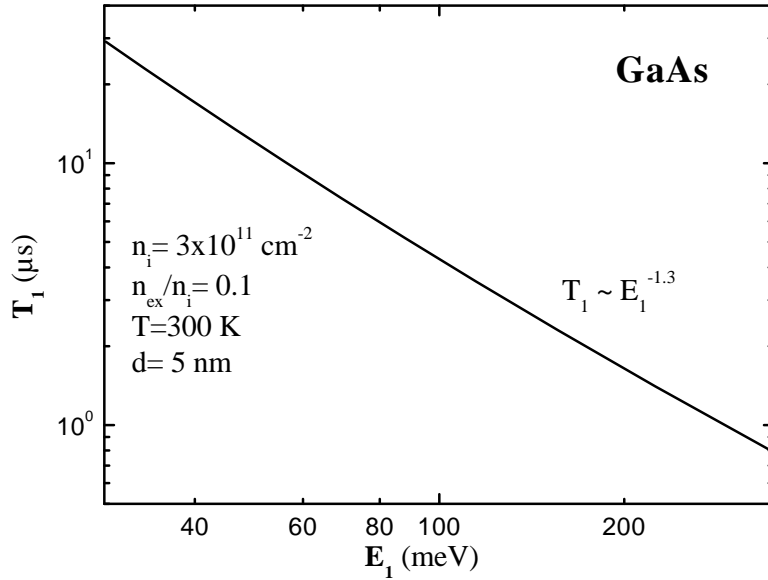


Figura 4.3: Tiempo de relajación de espín en GaAs a temperatura ambiente en función de la energía de confinamiento, para valores de  $n_i = 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  y  $n_{ex} = 3 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  (distancia a las impurezas:  $5 \text{ nm}$ ).

La energía de confinamiento para el primer nivel en un pozo infinito está dada por

$$E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m^* a^2}, \quad (4.11)$$

donde  $a$  denota el ancho del pozo infinito. Para el rango de energías de confinamiento consideradas en la figura 4.3, corresponden pozos cuyos anchos varían entre 5 y 15  $nm$ .

Si bien los resultados experimentales se obtuvieron en muestras no dopadas, contrariamente al presente trabajo en el que siempre se considera la presencia de impurezas donoras, es interesante observar que en el trabajo citado se encuentra mediante un ajuste de cuadrados mínimos que la dependencia de  $T_1$  con  $E_1$  sigue aproximadamente la ley  $T_1 \sim E_1^{-1}$ , mientras que en la figura 4.2 el mismo procedimiento da para el exponente de esta ley el valor algo menor de  $-1.3$ . A pesar de este comportamiento similar encontrado para el tiempo de relajación, es importante señalar la gran discrepancia en los valores de  $T_1$ , siendo de entre tres a cuatro órdenes de magnitud más grandes los hallados aquí que los reportados en el trabajo de Ohno.

Otro hecho destacable respecto de las muestras sobre las que se efectuaron estas mediciones es que se fabricaron tomando el eje  $[110]$  normal al plano del gas bidimensional, que tal como se mencionó en la Introducción, inhibe en gran medida el mecanismo de D'yakonov-Perel' (DP) de relajación de espín.

En el trabajo experimental de Terauchi *et al.*, ref. [9], se estudian pozos cuánticos en GaAs similares a los anteriores, sólo que esta vez fabricados en la dirección usual  $(100)$ , donde el mecanismo de DP es considerado el mecanismo dominante en la relajación de espín. Los tiempos de relajación obtenidos en este trabajo son del orden de las decenas de picosegundos para las muestras no dopadas y de los cientos de picosegundos para las muestras dopadas, notándose entonces la diferencia en el orden de magnitud de  $T_1$  respecto del trabajo citado en primer lugar. A su vez, en el estudio de  $T_1$  vs  $E_1$ , se

encuentra un comportamiento similar al predicho por el mecanismo de DP, el cual establece una relación del tipo  $T_1 \sim E_1^{-2}$ . Estos resultados entonces difieren, tanto cualitativa como cuantitativamente, de los presentados en el capítulo 3 y en la figura 4.3.

Otras mediciones sobre pozos cuánticos en GaAs/AlGaAs están recopiladas en la ref. [2]. Allí se reconoce al mecanismo de DP como el principal responsable de la relajación del espín en sistemas bidimensionales y también se alude a la débil dependencia del tiempo de relajación con la temperatura en pozos con  $a \lesssim 10 \text{ nm}$ , efecto que también ha sido mencionado en el capítulo anterior en referencia a los resultados allí presentados para  $T_1$  en función de la temperatura. Los datos consignados en el artículo citado para la dependencia de  $T_1$  con la energía de confinamiento, nuevamente coinciden con las predicciones teóricas del mecanismo de DP.

También resulta interesante la comparación de los resultados obtenidos en el presente trabajo con los correspondientes al tiempo de relajación de espín en el *bulk*. El trabajo de Tamborenea *et al.* citado en la ref. [14], es el que más se aproxima en el *bulk* a las condiciones utilizadas en el presente trabajo. En los resultados presentados para el *scattering* con impurezas, el trabajo citado encuentra una dependencia negativa de  $T_1$  con la densidad de electrones donados  $n_i$ , al igual que la que se observa en las figuras 3.5–3.11. Las curvas exhibidas en dicho artículo para la dependencia con la densidad  $n_{ex}$  de electrones fotoexcitados presentan, a bajas temperaturas ( $T \lesssim 20K$ ), un comportamiento similar a las curvas en las figuras 3.15–3.17, en las que no hay variaciones apreciables de  $T_1$  hasta un cierto valor de  $n_{ex}$  a partir del cual se produce un decrecimiento del tiempo de relajación. A temperaturas mayores, en cambio, las dos series de curvas difieren en su comportamiento, mostrando las de la referencia una dependencia prácticamente nula con  $n_{ex}$ ,

mientras que en las figuras mencionadas del capítulo 3 continúan mostrando el mismo comportamiento que a bajas temperaturas.

# Capítulo 5

## Conclusiones

Se han presentado los resultados del cálculo del tiempo de relajación de espín en pozos cuánticos semiconductores del tipo III-V mediante el mecanismo de Elliot-Yafet inducido por el *scattering* con impurezas empleando el modelo de bandas de Kane.

Se ha estudiado la dependencia del tiempo de relajación con la distancia de las impurezas ionizadas al pozo cuántico, la densidad de electrones donados, la densidad de desbalance de espín y la temperatura. El estudio se hizo para densidades de electrones donados variando desde  $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  hasta  $1 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , y para densidades de desbalance de espín desde  $0.01n_i$  hasta  $0.5n_i$ . Las temperaturas de los sistemas considerados se tomaron en el rango de  $1K$  a  $300K$  y se utilizaron funciones de distribución de Fermi-Dirac para describir las dos poblaciones de espín.

Los resultados muestran tiempos de relajación que son del orden del microsegundo para GaAs, del nanosegundo para el InAs y de un orden menor para el InSb.

La dependencia encontrada para el tiempo de relajación de espín con la distancia a las impurezas es cualitativamente la esperada, aumentando

sus valores a medida que las impurezas se alejan del gas bidimensional de electrones.

El tiempo de relajación de espín muestra en todas las condiciones consideradas una dependencia negativa con la densidad de electrones donados, cumpliendo aproximadamente a bajas temperaturas la relación  $T_1 \sim n_i^{-0.5}$  para valores de distancia a las impurezas mayores que  $5nm$ .

Se encontró, para cada material, valores de temperaturas debajo de las cuales no existe prácticamente variación del tiempo de relajación al variar  $T$ , mientras que para temperaturas superiores a las mencionadas se aprecia una muy débil dependencia de  $T_1$  con  $T$ . Esta casi total independencia del tiempo de relajación con la temperatura se debe probablemente al mecanismo de *scattering* considerado (*scattering* coulombiano), en contraste a lo que, por ejemplo, se esperaría en procesos de *scattering* electrón-fonón.

Para la dependencia con la densidad de desbalance de espín, se encontró que para bajas densidades de desbalance de espín, el tiempo de relajación es independiente de dicha magnitud, tornándose luego decreciente para densidades mayores. La relación funcional entre estas dos cantidades cumple para bajas temperaturas que  $T_1 \sim \sqrt{n_i + n_{ex}} + \sqrt{n_i - n_{ex}}$ .

En el caso más favorable para el mecanismo de Elliot-Yafet, donde el crecimiento de las muestras se efectúa con la dirección [110] perpendicular al plano del gas bidimensional, los valores obtenidos para el tiempo de relajación de espín son tres órdenes de magnitud mayores que los reportados en trabajos experimentales [10]. Estas diferencias podrían originarse tanto por la presencia de otros mecanismos de relajación mas eficientes en los sistemas estudiados (p. ej., la interacción de intercambio entre electrones y huecos), como así también por deficiencias en las aproximaciones hechas en los cálculos aquí presentados. De cualquier forma, es claro que el problema de la

relajación de espín en semiconductores y la caracterización de los mecanismos que la originan todavía no ha sido resuelto completamente, siendo aún un campo de intensa investigación.

# Apéndice A

## Normalización de las Funciones de Onda

La normalización de las funciones de onda utilizadas en el cálculo del tiempo de relajación de espín requiere que se cumpla

$$\int_V d^2r dz |\psi_{n,\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z)|^2 = 1, \quad (\text{A.1})$$

donde  $V$  es volumen total del sólido y las  $\psi_{n,\mathbf{k},\sigma}$  están dadas por

$$\psi_{n,\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z) = \langle \mathbf{r}, z | n\mathbf{k}\sigma \rangle = \alpha u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z) \varphi_n(z) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{A.2})$$

como se mencionó en el capítulo 2.

Las  $u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z)$  y las  $\varphi_n(z)$  están normalizadas al volumen y longitud en el eje  $z$  de la muestra, respectivamente, y  $\alpha$  es la constante de normalización a determinar.

Escribiendo explícitamente la condición (A.1) se tiene que

$$\langle n\mathbf{k}\sigma | n\mathbf{k}\sigma \rangle = |\alpha|^2 \int_V d^2r dz \varphi_n^*(z) u_{\mathbf{k},\sigma}^*(\mathbf{r}, z) \varphi_n(z) u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z). \quad (\text{A.3})$$



Utilizando la periodicidad de las  $u_{\mathbf{k},\sigma}$  en la red de Bravais, y suponiendo que la variación de las  $\varphi_n$  es pequeña en el tamaño de la celda unidad, la expresión (A.3) se puede escribir como

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k}\sigma | n\mathbf{k}\sigma \rangle &= |\alpha|^2 \sum_{\mathbf{R}_M} \varphi_n^*(z_M) \varphi_n(z_M) \\ &\times \int_v d^2r dz u_{\mathbf{k},\sigma}^*(\mathbf{r}, z) u_{\mathbf{k},\sigma}(\mathbf{r}, z), \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

siendo  $\{\mathbf{R}_M = (\mathbf{r}_M, z_M)\}$  el conjunto de vectores de la red de Bravais y la integración se extiende sobre una celda unidad, cuyo volumen se denota por  $V_{cu}$ .

Apelando nuevamente a la periodicidad de las  $u_{\mathbf{k},\sigma}$ , se tiene que la integral en (A.4) es igual a  $(1/N)\langle u_{\mathbf{k},\sigma} | u_{\mathbf{k},\sigma} \rangle = 1/N$ , siendo  $N$  el número total de celdas unidad en el sólido.

Pasando al continuo en la forma  $\sum_{\mathbf{R}_M} \frac{\Delta^2 r \Delta z}{V_{cu}} \longrightarrow (1/V_{cu}) \int_V d^2r dz$ , se tiene que

$$\begin{aligned} \langle n\mathbf{k}\sigma | n\mathbf{k}\sigma \rangle &= \frac{|\alpha|^2}{NV_{cu}} \int_V d^2r dz |\varphi_n(z)|^2 \\ &= \frac{|\alpha|^2}{V} A \int_L dz |\varphi_n(z)|^2, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

con  $A$  el área total del plano perpendicular al eje  $z$ , y la integración se extiende sobre la longitud total del sólido en la dirección  $z$ . Como las  $\varphi_n(z)$  están normalizadas a la unidad en dicha longitud y  $A/V = 1/L$  se tiene finalmente que

$$\langle n\mathbf{k}\sigma | n\mathbf{k}\sigma \rangle = \frac{|\alpha|^2}{L}. \quad (\text{A.6})$$

Este resultado, junto con (A.1), permite entonces determinar el valor de  $|\alpha|$ , obteniéndose así que

$$|\alpha| = \sqrt{L}, \tag{A.7}$$

que es el resultado utilizado en la expresión (2.15) del capítulo 2.

## Apéndice B

# Potencial Químico de un Gas de Electrones Bidimensional

En el caso de un gas bidimensional de electrones es posible obtener una expresión cerrada para  $\mu_\sigma(n_\sigma, T)$ , el potencial químico para la población con proyección de espín  $\sigma$  en el eje  $z$ .

Para ello se comienza escribiendo el número total de electrones presentes en el gas bidimensional con una determinada proyección de espín

$$N_\sigma = \sum_{\mathbf{k}} f_\sigma(\mathbf{k}, T). \quad (\text{B.1})$$

Pasando la suma al continuo en la forma usual se tiene que

$$N_\sigma = \frac{A}{4\pi^2} \int_{\Omega} d^2k f_\sigma(\mathbf{k}, T). \quad (\text{B.2})$$

Aquí  $A$  es el área del gas bidimensional y el dominio de integración,  $\Omega$ , se extiende sobre todo el espacio bidimensional de vectores de onda.

Utilizando coordenadas polares en  $\Omega$  y la expresión de las  $f_\sigma(\mathbf{k}, T)$  dada por (2.28) en el capítulo 2, la (B.2) puede escribirse como

$$\begin{aligned}
N_\sigma &= \frac{A}{4\pi^2} \int_0^\infty d\theta \int_0^{2\pi} dk k f_\sigma(\mathbf{k}, T) \\
&= \frac{A}{2\pi} \int_0^\infty dk k \left\{ \exp \left[ \frac{1}{k_B T} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \mu_\sigma \right) \right] + 1 \right\}^{-1},
\end{aligned} \tag{B.3}$$

donde, en la segunda igualdad, se ha efectuado la integración en la variable angular, ya que el integrando no depende de ella.

Para calcular la integral de la expresión anterior es conveniente introducir el cambio de variables dado por

$$x = \exp \left[ \frac{1}{k_B T} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \mu_\sigma \right) \right] + 1, \tag{B.4}$$

con esto, la expresión para  $N_\sigma$  queda

$$N_\sigma = \frac{m^* A k_B T}{2\pi \hbar^2} \int_{c+1}^\infty dx \frac{1}{x(x-1)} = \frac{m^* A k_B T}{2\pi \hbar^2} \ln \left( \frac{c+1}{c} \right), \tag{B.5}$$

donde se ha definido  $c \equiv \exp(-\mu_\sigma/k_B T)$ .

De esta última expresión es posible despejar el valor de  $\mu_\sigma(n_\sigma, T)$ , resultando entonces

$$\mu_\sigma(n_\sigma, T) = k_B T \ln \left[ \exp \left( \frac{2\pi \hbar^2 n_\sigma}{m^* k_B T} \right) - 1 \right], \tag{B.6}$$

en la que se ha puesto  $n_\sigma = N_\sigma/A$ .

# Bibliografía

- [1] D. D. Awschalom, D. Loss, y N. Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation*; Springer (2002)
- [2] I. Zutic, J. Fabian y S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- [3] J. M. Kikkawa, I. P. Smorchkova, N. Samarth y D. D. Awschalom, *Science* **277**, 1284 (1997).
- [4] J. M. Kikkawa y D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
- [5] M. I. D'Yakonov y V. I. Perel', *Sov. Phys. JETP* **33**, 1053 (1971).
- [6] R. J. Elliot, *Phys. Rev.* **96**, 266 (1954).
- [7] Y. Yafet en *Solid State Physics* ed. F. Seitz y D. Turnbull, Academic, NY, Vol. 14, pp. 1-98.
- [8] G. L. Bir, A. G. Aronov y G. E. Pikus, *Sov. Phys. JETP* **42**, 705 (1976).
- [9] R. Terauchi, Y. Ohno, T. Adachi, A. Sato, F. Matsukura, A. Tackeuchi y H. Ohno: *Jpn. J. Appl. Phys.* **38**, 2549 (1999).
- [10] Y. Ohno, R. Terauchi, T. Adachi, F. Matsukura y H. Ohno, *Phys. Rev. Lett.* **83**(20), 4196 (1999).

- [11] S. Döhrmann, D. Hägele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh y M. Oestreich, *Phys. Rev. Lett.* **93**(14), 147405 (2004).
- [12] O. Z. Karimov, G. H. John, R. T. Harley, W. H. Lau, M. E. Flatté, M. Henini y R. Airey, *Phys. Rev. Lett.* **91**(24), 246601 (2003).
- [13] J. H. Davies, *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*; Cambridge University Press (1998).
- [14] P. I. Tamborenea, M. A. Kuroda y F. L. Bottesi, *Phys. Rev. B* **68**, 245205 (2003).
- [15] M. A. Kuroda, *Tesis de Licenciatura*, Universidad de Buenos Aires (2002).
- [16] J. -N. Chazalviel, *Phys. Rev. B* **11**, 1555 (1975).
- [17] A. Tackeuchi, Y. Nishikawa y O. Wada, *Appl. Phys. Lett.* **68**(6), 797 (1996).
- [18] A. Tackeuchi, O. Wada y Y. Nishikawa, *Appl. Phys. Lett* **70**(9), 1131 (1997).
- [19] A. Malinowski, R. S. Britton, T. Grevatt, and R. T. Harley, *Spin relaxation in GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum wells*; *Phys. Rev. B* **62**(19), 13034 (2000).
- [20] W. Zawadski y W. Szymanska, *Elastic electron scattering in In-Sb type semiconductors*; *Phys. Status Solidi B* **45**, 415 (1971).