

# **Interacción espín-órbita en anillos cuánticos semiconductores delgados**

José Miguel Lia

[Mes y 2019]

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

TEMA: Interacción espín-órbita en anillos cuánticos semiconductores.

ALUMNO: LU N° 635/10

LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Pablo Ignacio Tamborenea

FECHA DE INICIACIÓN: Abril 2018

FECHA DE FINALIZACIÓN: ?

FECHA DE EXAMEN: ?

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor:

Jurado:

Director:

Jurado:

Profesor de Tesis de Licenciatura:

Jurado:

*A mis padres, José y Adriana.*



## Resumen

Este trabajo está dedicado a estudiar los efectos de la interacción espín-órbita en una banda de conducción isotropa y homogénea de un semiconductor anular plano, delgado y de escala nanométrica bajo la aproximación de masa efectiva. La interacción se modela a través de un término de acoplamiento lineal en el impulso cristalino que lo acopla con el espín del electron. El hamiltoniano del sistema bidimensional se aproxima a uno efectivo en una dimensión considerando los efectos de confinamiento producidos por la delgadez extrema del anillo. La ecuación de autovalores asociada a este hamiltoniano es tratada de forma analítica, proponiendo una factorización del autoestado en una parte escalar y otra espinorial, que desacopla la misma en una ecuación para cada una de éstas. Las soluciones a esta ecuación son estudiadas analíticamente y en algunos casos numéricamente, poniendo especial énfasis en los casos especiales que refieren a las interacciones ampliamente estudiadas de Rashba y Dresselhaus. Se observa que los resultados obtenidos en los casos para los que existen expresiones cerradas coinciden, a menos de definiciones en las constantes de acoplamiento, con aquellos conocidos en la literatura. Finalmente, para configuraciones que requieren un tratamiento numérico, se estudia la dependencia de las soluciones con variaciones en los parámetros y se esbozan interpretaciones de las mismas a través de su espectro de energías asociado y los valores medios de los impulsos angulares tomados sobre éstas. A partir de esto se estudió en mayor profundidad la forma en que la interacción modifica la banda alrededor del extremo considerado.



# Índice general

<b>Índice general</b>	<b>7</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>9</b>
1.1. Interacción espín-órbita . . . . .	9
1.2. Breve compendio de teoría del sólido cristalino . . . . .	12
1.2.1. Estructuras cristalinas . . . . .	12
1.2.2. Dinámica electrónica en un cristal . . . . .	15
1.3. Aproximación de función envolvente . . . . .	24
1.4. Interacción espín-órbita en sólidos cristalinos . . . . .	26
<b>2 Modelo estudiado</b>	<b>29</b>
<b>3 Estudio del problema de autovalores</b>	<b>35</b>
3.1. Factorización . . . . .	35
3.2. Estudio de la ecuación factorizada . . . . .	37
3.2.1. Factor espinorial $\chi(\phi)$ . . . . .	37
3.2.2. Factor escalar $f(\phi)$ . . . . .	42
<b>4 Estudio de las soluciones</b>	<b>45</b>
4.1. Configuración general . . . . .	45
4.2. Configuración con Rashba y Dresselhaus . . . . .	47
4.2.1. Interacciones por separado . . . . .	52
4.2.2. Configuración de banda libre . . . . .	58
4.2.3. Configuración $ \alpha  =  \beta $ . . . . .	59
<b>5 Conclusiones</b>	<b>63</b>
<b>Apéndice</b>	<b>65</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>67</b>



## Introducción

### 1.1. Interacción espín-órbita

Durante los años en los que experimentos como el de Stern y Gerlach (1922) y el de Philipps y Taylor (1927) [1], comenzaban a revelar la presencia de un tipo de interacción magnética que disputaba la completitud de la teoría cuántica desarrollada hasta el momento, Uhlenbeck y Goudsmith [2] retomaron la idea de Compton de que «[...] el electrón, rotando sobre su eje como un pequeño giróscopo, probablemente sea la última partícula magnética.» [3], con el objetivo de resolver las dificultades [4] que surgían al intentar interpretar y explicar cuantitativamente algunos aspectos de los espectros de emisión de elementos como el hidrógeno y los metales alcalinos (similares al hidrógeno en el sentido de que son portadores de un único electrón de valencia que en frecuencias ópticas es capaz de responder espectroscópicamente) [1]. Uno de estos aspectos estaba relacionado con la separación en dobletes observada en algunas líneas ópticas. Propuestas como la de Sommerfeld, que consistía en incorporar correcciones relativistas a la masa de los electrones en relación a la velocidad de su órbita [1], reproducían los resultados experimentales en algunos casos; pero se argumentaba que no podían dar cuenta de esta observación en todos, pues para los átomos alcalinos se conocía que estas correcciones no podían ser apreciables [1].

Precedidos pues por la idea de «partícula magnética» de Compton [3], Uhlenbeck y Goudsmith incorporaron por entonces la rotación intrínseca del electrón sobre su eje, y la capacidad de comportarse como un dipolo magnético que esta inducía en él, para concluir que los dobletes observados en los espectros, particularmente en los de rayos X

[2], aparecían debido a la orientación relativa del eje de esta rotación, el *spin*, respecto del plano de la órbita del electrón. En otras palabras, el momento magnético generado por la rotación del electrón interactuaba con el campo magnético de su propio átomo [1]. La imagen de una carga en rotación no impedía, sin embargo, la aplicación de la antigua teoría de Wilson-Sommerfeld a la cuantización del movimiento rotatorio. Los autores, en efecto, observaron que si el *spin* correspondía a «un cuanto de rotación» [2], el impulso angular en dirección perpendicular al plano de la órbita estaría dado por  $(1/2)h/2\pi$ . Para los átomos alcalinos, monovalentes, e hidrogenoides en general; esta conclusión puede modelarse y entenderse a través de un esquema semiclásico [1] basado en la descripción atómica de Bohr, en la imagen del impulso angular de *spin* como debida a una rotación del electrón y en la consecuente suposición de que la misma no produce la emisión de radiación [3]. En este esquema, el electrón rotante permanece en reposo y observa al núcleo atómico (de carga  $Ze$ , con  $Z$  el número atómico) trazar en derredor de él una órbita con velocidad opuesta a la suya en el sistema de laboratorio (fig. 1.1). Desde su

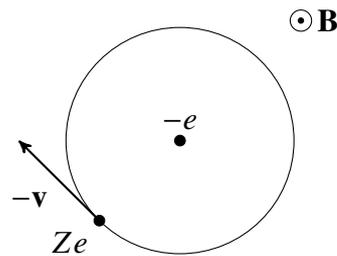


Figura 1.1: Esquema basado en la descripción atómica de Bohr. El electrón de valencia, de carga  $-e$ , permanece en reposo mientras el núcleo orbita a su alrededor con velocidad opuesta  $-v$ , generando al hacerlo un campo magnético  $\mathbf{B}$ .

perspectiva, entonces, el electrón observa una corriente de la forma

$$\mathbf{J} = -Ze \frac{\mathbf{v}}{c}; \quad (1.1)$$

y consecuentemente la aparición del campo magnético generada por la misma

$$\mathbf{B} = \mathbf{J} \times \frac{\mathbf{r}}{r^3} = -\frac{Ze}{c} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E}, \quad (1.2)$$

siendo  $\mathbf{E}$  el campo eléctrico generado por la carga nuclear  $Ze$  [1, 5]. La presencia del campo  $\mathbf{B}$ , externo para el dipolo  $\mathbf{m}$  asociado al impulso angular  $\mathbf{S}$  que adquiere el electrón

al rotar sobre su eje, produce una cupla [2] o torque sobre el mismo que puede escribirse como [5]

$$\mathbf{N} = \mathbf{m} \times \mathbf{B} = \frac{g_S \mu_B}{c \hbar} \mathbf{S} \times \mathbf{B}; \quad (1.3)$$

donde  $g_S$  es una constante,  $\mu_B = e/mc$  y  $m$ ,  $c$  y  $\hbar$  la masa del electrón en vacío, la velocidad de la luz en vacío y la constante reducida de Planck, respectivamente. El hecho de que la cupla sea, por su forma funcional, perpendicular a  $\mathbf{S}$  en todo momento, indica que el movimiento del vector  $\mathbf{S}$  se desarrolla sobre una esfera de radio  $S = |\mathbf{S}|$  constante. Este tipo de movimiento respecto de  $\mathbf{B}$  es conocido como *precesión de Larmor* [1]. La fuerza ejercida por el campo sobre el dipolo  $\mathbf{m}$  puede obtenerse a partir de la cupla (1.3) e interpretarse como proveniente de un potencial [5] que representa la energía vinculada a la orientación del mismo respecto del campo [1]

$$\mathbf{F}_B = \nabla \times \mathbf{N} = \nabla (\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}) = \nabla \left( \frac{g_S \mu_B}{c \hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} \right). \quad (1.4)$$

Por otra parte, el campo eléctrico nuclear  $\mathbf{E}$  ejerce sobre el electrón una fuerza  $\mathbf{F}_E = -e\mathbf{E}$ , central, pues proviene del potencial Coulombiano  $V(r)$  del núcleo [1]; y, por tanto,

$$\mathbf{F}_E = -\nabla V(r) = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\mathbf{r}}{r}; \quad (1.5)$$

lo que permite expresar el campo  $\mathbf{B}$  sentido por el electrón como

$$\mathbf{B} = -\frac{\mathbf{v}}{c} \times \mathbf{E} = \frac{\mathbf{v}}{c} \times \frac{\mathbf{F}}{e} = -\frac{1}{emc} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{p} \times \frac{\mathbf{r}}{r} = \frac{1}{emcr} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L}; \quad (1.6)$$

si se identifica el impulso lineal  $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$  y el angular  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ . A partir de esta relación y de la expresión de  $\mathbf{F}_B$  es posible deducir la expresión de la energía potencial asociada a esta interacción en el sistema donde el electrón se halla en reposo. La transformación al sistema donde es el electrón el que orbita fue llevada a cabo apropiadamente por Thomas [4], a quien es debida la forma final

$$E = -\frac{1}{2} \frac{g_S \mu_B}{\hbar} \mathbf{S} \cdot \mathbf{B} = \frac{g_S}{2m^2 c^2 \hbar} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (1.7)$$

Es importante mencionar que, si bien las concepciones de la época [6] (las de Parson [7], Compton y otros) y el desarrollo de Uhlenbeck, Goudsmith, Thomas y otros fueron hitos importantes para explicar algunas observaciones experimentales de entonces [1] (e.g., la *estructura fina* [2] de algunos átomos); la noción de *spin* era distinta a la actual.

Hoy es sabido que el *spin* es una propiedad intrínseca del electrón y no existe analogía clásica alguna [1, 8]. A pesar de esta diferencia sustancial, la expresión final de Thomas (1.7) puede aplicarse actualmente para aproximar la descripción de esta interacción en el átomo cuando los efectos relativistas no sean significativos. Su validez en este sentido está sustentada en el hecho de que la misma puede obtenerse a través del término de Pauli [9, 10] que proviene de aproximar la ecuación cuántico-relativista de Dirac [8] en su límite clásico no relativista:

$$\frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (1.8)$$

En la descripción efectiva de los sólidos cristalinos, la interacción espín-órbita se introduce tomando como punto de partida la forma de la ec. (1.8). Sin embargo, esta inclusión no se hace directamente sobre el hamiltoniano del cristal sino sobre uno aproximado, que considera usualmente una única banda y la describe alrededor de uno de sus extremos. A esta aproximación se la conoce en la literatura como *aproximación de masa efectiva* o *de función envolvente* [10].

Las razones que motivan este tratamiento de la interacción en cristales se clarifican si se estudia primero aquellas que dan origen a la aproximación de masa efectiva. Para esto, resulta conveniente rever previa y brevemente los fundamentos de la teoría sobre la cual esta última se basa; como sigue en la próxima sección.

## 1.2. Breve compendio de teoría del sólido cristalino

### 1.2.1. Estructuras cristalinas

Los sólidos en estado cristalino se caracterizan principalmente por estar constituidos de numerosas copias idénticas de una misma unidad fundamental, ordenadas espacialmente siguiendo una estructura periódica particular [11]. Estas unidades pueden verse como conjuntos abstractos de átomos, que pueden ser de una misma especie, como sucede en los metales puros (e.g., los alcalinos, de los grupos I y II de la tabla periódica, como el Li, Na, K, etc.), o por moléculas u otros grupos de átomos cuya replicación espacial con alguna periodicidad reproduzca la estructura completa del material. En los elementos puros, la ubicación espacial de cada átomo corresponde, idealmente, a un centro de

equilibrio respecto del cual éste se desplaza oscilatoriamente, por excitación térmica, mecánica o de otro tipo [11].

Los conceptos de periodicidad espacial y de unidad replicada son abstraídos en la descripción de un cristal ideal (infinito, en particular) y ambas nociones reemplazadas por las de *red* y *base*, respectivamente [11]. La red refiere a un conjunto infinito de puntos discretos que, dispuestos en el espacio, representan las ubicaciones de las réplicas de la base (o unidad fundamental), y forman un arreglo periódico cuya orientación relativa a cualquier punto en él es independiente de la elección del mismo [12]. Este tipo de redes, que satisfacen relaciones estructurales de periodicidad y de orientación entre sus puntos, son conocidas como *redes de Bravais* [12]. Las restricciones a la orientación pueden entenderse si se nota que son necesarias para garantizar que los puntos de la red (i.e., las ubicaciones) sean totalmente equivalentes. Un ejemplo en el que esto no sucede es la red conocida como “panal de abejas” o *honeycomb* [12], en la que los puntos del arreglo periódico comprenden los vértices de hexágonos regulares yuxtapuestos. Es posible notar, construyéndola, que la orientación del arreglo depende del vértice elegido (fig. 1.2) y, por tanto, los puntos no son equivalentes.

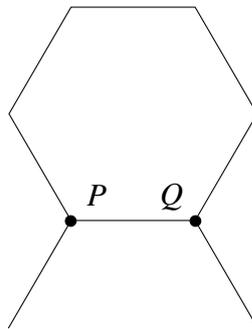


Figura 1.2: Esquema reducido de la red “panal de abejas”. La orientación de la red respecto del punto  $P$  es vista como aquella del punto  $Q$  pero rotada en  $180^\circ$  [12].

Las nociones de red de Bravais y base esbozadas anteriormente pueden precisarse matemáticamente. Una red de Bravais en  $m$  dimensiones puede definirse como el conjunto de vectores  $\mathbf{R}$  en  $\mathbb{R}^m$  generados por combinaciones lineales enteras de un conjunto de generadores de  $\mathbb{R}^m$ ,  $\{\mathbf{a}_i\}_{1 \leq i \leq m}$  (llamados *vectores primitivos* [12]); es decir, todos aquellos de la forma,

$$\mathbf{R} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + \dots + n_m \mathbf{a}_m; \quad (1.9)$$

con los  $n_i \in \mathbb{Z}$ ,  $1 \leq i \leq m$ . La condición sobre los  $n_i$  confiere a este conjunto de vectores la propiedad de ser cerrado ante la adición de sus elementos. Esto indica que cualquier traslación rígida (realizada en abstracto) de la red cristalina (i.e., incluyendo las réplicas de la base) por un vector  $\mathbf{R}$  produce una descripción equivalente de la misma [11, 12].

De manera similar, la noción base puede precisarse definiendo primero aquella de *celda primitiva* [12]. Una celda primitiva queda definida como un volumen (área o segmento, dependiendo de la dimensión  $m$ ) que, mediante traslaciones por los vectores de la red, llena el espacio sin dejar vacíos ni superponerse con otras traslaciones de sí mismo, y que contiene exactamente un punto de la misma [12] (la contribución de los puntos ubicados sobre vértices o superficies a la cuenta es subdividida en la cantidad de vértices o superficies que los contienen). Las celdas primitivas, entonces, preservan la simetría de traslación de la red, en el sentido de que producen descripciones equivalentes al ser trasladadas por los vectores  $\mathbf{R}$ . Así, la base puede tomarse como un conjunto (en principio, finito) de puntos dentro de la celda cuyas ubicaciones son descritas por vectores  $\mathbf{r}$  de la forma

$$\mathbf{r} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + \dots + x_m \mathbf{a}_m; \quad (1.10)$$

con  $0 \leq x_i < 1$ ,  $1 \leq i \leq m$ . Nuevamente, la red “panal de abejas” de la fig. 1.2 provee un ejemplo, pero esta vez de estructura cristalina. En efecto, agrupando los vértices de a pares en forma apropiada, es posible mostrar [12] que este arreglo es describible como una red de Bravais hexagonal subyacente a una base compuesta por dos elementos (fig. 1.3). Esta estructura aparece en diversos materiales [13] y ejemplarmente en el intensamente estudiado grafeno [14, 15], cuya base comprende únicamente átomos de carbono.

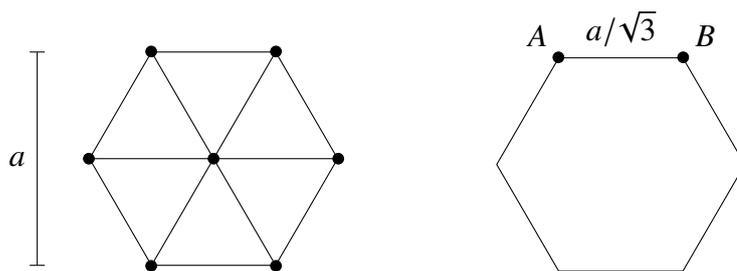


Figura 1.3: Interpretación de la red “panal de abejas”. La periodicidad subyacente sigue el arreglo de una red de Bravais hexagonal de lado  $a$  (izquierda), mientras que la base está constituida por los elementos  $A$  y  $B$ , separados una distancia  $a/\sqrt{3}$  (derecha). Para una capa de grafito (grafeno),  $a \approx 2.46 \text{ \AA}$  [14].

Finalmente, es importante mencionar que la descripción idealizada de los sólidos cristalinos permite comenzar a comprender algunas de las propiedades experimentalmente observadas, como la conducción (o falta de ella) eléctrica y térmica, entre otras. Sin embargo, es igualmente importante destacar que los apartamientos de estas condiciones ideales son muchas veces necesarios para explicar otras propiedades también experimentalmente observadas [12].

### 1.2.2. Dinámica electrónica en un cristal

En algunos sólidos (llamados *covalentes*) como los metales puros (e.g., Na [12]), el orden de magnitud de las distancias entre los átomos en un cristal es similar extensión espacial característica de las funciones de onda que describen sus niveles electrónicos externos. Esta proximidad provoca el solapamiento de tales niveles atómicos y distorsiona la estructura espacial que tendrían si los átomos estuvieran aislados. La distorsión provoca el desdoblamiento de los estados en otros nuevos, de mayor o menor energía respecto de los primigenios (*antiligantes* y *ligantes*, respectivamente [11]), que involucran necesariamente más de un átomo [11, 12]. La extensión espacial de las funciones de onda asociadas a estos estados determina el grado de localización de los electrones en los mismos y depende, fundamentalmente, de las distancias entre los átomos involucrados en el solapamiento [11]. En este sentido, es posible trazar una distinción entre los enlaces *covalentes* o dirigidos [11], en donde los electrones se encuentran mayormente localizados entre átomos vecinos próximos; y aquellos que describen la deslocalización de los electrones, que ocurre cuando la extensión espacial de la función de onda abarca varios átomos, algunos tan distantes que la escala de su separación se vuelve mucho mayor que la distancia interatómica. Este último es conocido como *enlace metálico* [11].

Por su parte, los electrones de las capas internas de cada átomo en el material se encuentran más fuertemente ligados a sus respectivos núcleos y son ligeramente afectados por presencia de otros átomos a su alrededor. Las funciones de onda que describen los estados de estos electrones en el cristal no son, por tanto, significativamente diferentes a aquellas del átomo aislado [12]. Esto es importante particularmente en el estudio de la dinámica de los electrones externos (o *de valencia* [11, 12]), pues permite aproximar el detalle de la estructura interna de los átomos por unidades de carga neta positiva, los *iones* [11, 12], formados por los electrones internos y los núcleos (fig. 1.4).

La distinción precisa entre electrón externo e interno viene dada por la configuración electrónica del átomo. En la tabla periódica, los primeros están relacionados con el período y los últimos con el grupo. Un ejemplo es el de los metales alcalinos del grupo I que poseen, precisamente, un único electrón de valencia (e.g., el K cuya configuración electrónica es  $[\text{Ar}] 4s^1$ ).

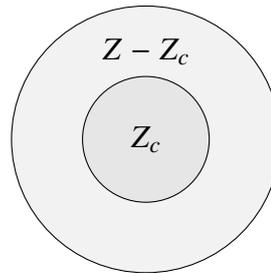


Figura 1.4: Esquema [11, 12] de un ion. Del total  $Z$  de electrones presentes en el átomo,  $Z_c$  forman el ion junto al núcleo atómico. Los electrones de valencia  $Z - Z_c$  se encuentran en las capas externas y, en presencia de otros átomos, pueden formar enlaces o desligarse del núcleo y moverse libremente por el cristal [11].

Una descripción más o menos precisa de la dinámica de los electrones de valencia involucraría considerar no sólo las interacciones de ellos con los iones sino también aquellas de origen coulombianas entre sí mismos. No es difícil imaginar la dificultad que puede implicar la resolución este problema, aún en esta forma relativamente simplificada, aunque más no sea por la cantidad de pares de electrones [11] de este tipo que pueden estar presentes en una muestra macroscópica de un cristal (esto puede verse tomando nuevamente un metal alcalino de valencia uno como ejemplo y observando que en una tal muestra, el número de átomos, y por tanto de electrones, es del orden del número de Avogadro,  $10^{24}$ ). Las simplificaciones son, entonces, necesarias para obtener algún modelo que resulte tratable, al menos numéricamente. De las muchas que pueden mencionarse, dos son particularmente importantes. Una proviene de observar que los iones de la red, siendo notablemente más masivos que los electrones de valencia, se desplazan de sus posiciones de equilibrio mucho más lentamente de lo que se mueven estos últimos [12, 16]; en particular, es sabido [12] que la relación cuantitativa entre las velocidades de ambos movimientos puede alcanzar los tres órdenes de magnitud. Es entonces posible suponer, como aproximación, que la respuesta de los electrones al desplazamiento de los iones es rápida y no afecta notablemente el estado de los mismos [12]; o que el

desplazamiento de los iones no es apreciable y, por tanto, que están en reposo en sus respectivas posiciones de equilibrio [16]. Esta aproximación es conocida como *adiabática* [11, 12] o de Born-Oppenheimer [16]. Otra simplificación de importancia refiere a las interacciones coulombianas entre electrones y consiste en reemplazar el efecto propio de cada interacción sobre cualquier electrón, por el neto o promediado de todas ellas en conjunto. Esto reduce efectivamente el problema de muchos cuerpos a uno efectivo de un cuerpo, suponiendo a los electrones no libres pero sí *independientes* unos de otros [12], e ignorando en consecuencia las correlaciones entre ellos [16].

Un posible modelo que resume estas hipótesis supone a los electrones de valencia inmersos en un potencial efectivo  $U(\mathbf{r})$  de un cuerpo, en principio desconocido, que contiene las contribuciones de las interacciones de un electrón dado con sus pares y los iones, y que satisface la periodicidad espacial de la red de Bravais (tridimensional) subyacente:

$$U(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = U(\mathbf{r}); \quad (1.11)$$

donde  $\mathbf{R}$  es un vector de la red de Bravais.

La dinámica vendrá dada entonces por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, y los estados descritos por ésta serán combinaciones lineales de los estacionarios, que están dados por

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E_\psi \psi(\mathbf{r}); \quad (1.12)$$

donde  $\mathcal{H} = p^2/2m + U(\mathbf{r})$  es el hamiltoniano de un cuerpo,  $m$  la masa del electrón,  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  el operador impulso y  $E_\psi$  es la energía asociada a la función de onda  $\psi(\mathbf{r})$ .

La periodicidad del potencial efectivo  $U$  y la invariancia del operador impulso ante traslaciones constantes permiten convertir el problema de autovalores (1.12) en uno que involucre los coeficientes del desarrollo de Fourier del potencial y de la autofunción por averiguar  $\psi$  [12]. Proponiendo, entonces,

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{q}} c_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}; \quad (1.13)$$

y escribiendo

$$U(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{K}} U_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}, \quad (1.14)$$

con los  $U_{\mathbf{K}}$  dados [12] por

$$U_{\mathbf{K}} = \frac{1}{v} \int_{\mathcal{V}} d\mathbf{r} e^{-\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}), \quad (1.15)$$

donde  $v$  es el volumen de la celda primitiva de la estructura; e insertando ambas expansiones en la ec. (1.12), se obtiene [12] la ecuación equivalente

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} q^2 - E_{\psi} \right) c_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{K}} U_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{q}-\mathbf{K}} = 0. \quad (1.16)$$

La expansión del potencial de la ec. (1.14) en conjunto con la periodicidad del mismo muestran en particular que los vectores  $\mathbf{K}$  deben satisfacer para cualquier  $\mathbf{R}$  en la red de Bravais, la relación

$$\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} = 2n\pi, \quad (1.17)$$

con  $n \in \mathbb{Z}$ . Puesto que los  $\mathbf{K}$  son vectores, es posible escribirlos en términos de algún conjunto de generadores  $\{\mathbf{b}_i\}_{1 \leq i \leq 3}$  a través de combinaciones lineales, tal y como sucedía con los  $\mathbf{R}$  y los vectores primitivos  $\{\mathbf{a}_i\}_{1 \leq i \leq 3}$ , y mostrar [11, 12] entonces que la condición (1.17) es equivalente a

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = \delta_{ij}, \quad (1.18)$$

con  $\delta_{ij}$  la delta de Kronecker. Esta expresión induce una forma funcional para cada generador  $\mathbf{b}_i$  en términos de los vectores primitivos [12], y permite concluir que el conjunto de ellos  $\{\mathbf{b}_i\}_{1 \leq i \leq 3}$  define asimismo una red de Bravais. A esta red se la conoce como *red recíproca*, respecto de la red generada por los  $\{\mathbf{a}_i\}_{1 \leq i \leq 3}$  [11, 12].

La información sobre los coeficientes  $c_{\mathbf{q}}$  provista por la ec. (1.16) junto al hecho de que los vectores  $\mathbf{K}$  forman una red de Bravais puede utilizarse para extraer una propiedad importante sobre la autofunción  $\psi$ , a partir de su expansión (1.13). Sin pérdida alguna de generalidad, los vectores  $\mathbf{q}$  pueden expresarse en términos de los  $\mathbf{K}$  como

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{G}, \quad (1.19)$$

con  $\mathbf{G}$  en la red recíproca y  $\mathbf{k}$  un vector que, expresado en términos de los generadores  $\{\mathbf{b}_i\}_{1 \leq i \leq 3}$ , satisface condiciones similares a las que cumplen los  $\mathbf{r}$  que determinan, en la red de Bravais *directa* (por oposición a *recíproca*) las posiciones en la celda unidad de los componentes de la base. Precisamente, esto es,

$$\mathbf{k} = y_1 \mathbf{b}_1 + y_2 \mathbf{b}_2 + y_3 \mathbf{b}_3, \quad (1.20)$$

con  $0 \leq y_1, y_2, y_3 < 1$ . El vector  $\mathbf{k}$ , entonces, pertenece a una celda unidad en el espacio recíproco formado por los  $\mathbf{K}$ . Al igual que en el caso de la red directa, la celda unidad no es única [11, 12] y en particular puede elegirse de forma que tenga las mismas simetrías que la red de Bravais [12]. A estas celdas se las conoce como *celda de Wigner-Seitz* [12] en la red directa; y *primera zona de Brillouin* [11, 12] en la recíproca.

La expresión (1.19) inserta en la ecuación (1.16) permite reescribir [12] esta última como

$$\left( \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 - E_\psi \right) c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} + \sum_{\mathbf{K}'} U_{\mathbf{K}'-\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}'} = 0. \quad (1.21)$$

Esta forma revela que la ec. (1.16) acopla únicamente coeficientes  $c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}$  cuyos índices vectoriales difieran del vector  $\mathbf{k}$  de la primera zona de Brillouin en vectores de la red recíproca  $\mathbf{K}$  [12]. En otras palabras, el vector  $\mathbf{k}$  entra en la ec. (1.21) como un parámetro, en el sentido de que la misma no vincula coeficientes indizados por distintos vectores en la primera zona de Brillouin y, por tanto, no expresa un único sistema acoplado sino una familia de sistemas de ecuaciones de igual estructura e independientes entre sí [12]. Esta última propiedad permite inferir que, dado un  $\mathbf{k}$  en la primera zona de Brillouin, la función de onda generada por los coeficientes  $c_{\mathbf{k}-\mathbf{K}}$  se escribe [12] como

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (1.22)$$

donde  $\mathbf{G}$  es un vector de la red recíproca y, por construcción,

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} c_{\mathbf{k}-\mathbf{G}} e^{-i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.23)$$

es una función periódica en la red directa.

Es importante notar que la discusión anterior tanto como las conclusiones de la misma están fundadas esencialmente en las nociones de red de Bravais y la periodicidad espacial del potencial  $U$ , heredada por el hamiltoniano  $H$ , y por tanto no dependen de una forma particular de este último [12]. El importante resultado que describe la forma general de las autofunciones (1.22) se lo conoce como *Teorema de Bloch* [11, 12].

La forma de las autofunciones (1.22) dada por la última igualdad y en especial la propiedad de periodicidad de  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , permiten extraer información cualitativa sobre el comportamiento de las mismas. La longitud característica de variación de  $u_{\mathbf{k}}$  viene dada esencialmente por su periodicidad, y por tanto es del orden de las distancias entre las

céldas de la red, o los átomos en los casos de materiales puros, por ejemplo. Para el factor modulador  $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  la situación es distinta, pues para conocer las escalas involucradas es necesario imponer alguna condición sobre los vectores  $\mathbf{k}$ . Es razonable, entonces, apartarse un poco de la idealización del cristal y, en particular, flexibilizar la condición de extensión infinita de la estructura cristalina, suponiéndola formada por un número  $N$  macroscópico de celdas primitivas e introduciendo la idea de que sus bordes ligan la red consigo misma y de forma periódica. Esta descripción se precisa en la condición sobre las autofunciones  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}); \quad (1.24)$$

siendo  $N_i \in \mathbb{N}$ ,  $1 \leq i \leq 3$  y  $N_1 N_2 N_3 = N$ , el número total de celdas. Este requisito, conocido como *condiciones de contorno de Born-von Kármán* [12], no afecta en absoluto a la función  $u_{\mathbf{k}}$ , dada su periodicidad, pero sí restringe los vectores  $\mathbf{k}$  [12] a la forma

$$\mathbf{k} = \frac{m_1}{N_1} \mathbf{b}_1 + \frac{m_2}{N_2} \mathbf{b}_2 + \frac{m_3}{N_3} \mathbf{b}_3, \quad (1.25)$$

con  $0 \leq m_i \leq N_i$  y  $m_i \in \mathbb{N}_0$ . La limitación sobre los valores de  $m_i$  produce la discretización de la primera zona de Brillouin y proporcionan escalas de longitud asociadas a los  $\mathbf{k}$ . Lejos de los bordes de zona (i.e.,  $m_i \ll N_i$ ), por ejemplo, la longitud de onda típica del factor modulador  $\lambda = 2\pi/|\mathbf{k}| \sim L$ , con  $L$  la longitud característica de la muestra. A menos de factores constantes, entonces, la escala de variación espacial del factor modulador en la (1.22) es más extensa que la de  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , lo que cualitativamente puede resumirse como que un período del factor modulador abarca más de un período del factor periódico, que tiene la periodicidad de la red subyacente [11].

Nada se ha dicho aún sobre los autovalores  $E_{\psi}$ , que son las energías asociadas a los estados  $\psi_{\mathbf{k}}$ . Observando la estructura del sistema de ecuaciones (1.21) que las determinan, es posible argumentar [12] que para cada vector en la primera zona de Brillouin existirá un conjunto numerable de valores para  $E_{\mathbf{k}}$  que pueden o no ser todos distintos. Esto puede verse notando que el sistema (1.21), con las mismas condiciones de contorno periódicas es, en algún sentido, una forma generalizada del problema del gas de electrones libres y no interactuantes en una caja. Este conjunto de conjunto de energías  $E_{n\mathbf{k}}$  para un mismo  $\mathbf{k}$ , se conoce como *banda* [11, 12] y, en particular, el índice  $n$  como *índice de banda* [12]. Es posible asimismo mostrar [11, 12], en forma general y partiendo de las propiedades de las autofunciones  $\psi_{\mathbf{k}}$  que el espectro  $E_{n\mathbf{k}}$  es periódico en el espacio

recíproco; o, más precisamente, que si  $\mathbf{G}$  es un vector de la red recíproca, entonces  $E_{n\mathbf{k}}$  satisface la igualdad

$$E_{n(\mathbf{k}+\mathbf{G})} = E_{n\mathbf{k}}. \quad (1.26)$$

Esta relación indica, en consecuencia, que el espectro queda completamente determinado por su estructura en la primera zona de Brillouin. A modo de ejemplo, puede estudiarse el caso en que los electrones de valencia están inmersos en una red de Bravais unidimensional (cuyo segmento primitivo es de longitud  $a$ ) y sujetos a potencial constante (o, equivalentemente, nulo) que, como tal, es un caso particular de potencial periódico. Un fragmento de la estructura de bandas resultante se muestra en la figura 1.5.

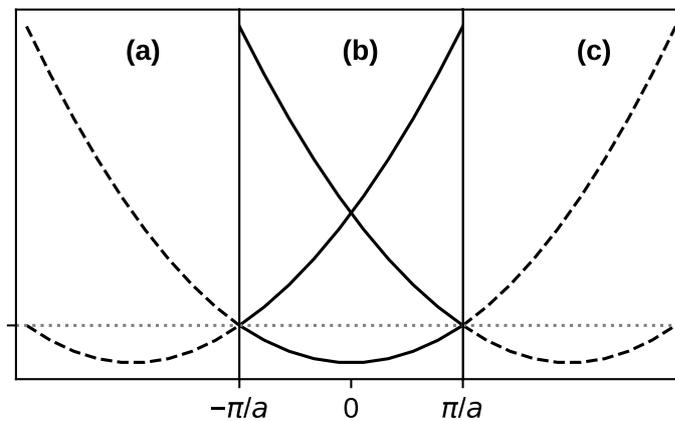


Figura 1.5: Diagrama esquemático de la estructura de bandas  $E_{n\mathbf{k}}$  para un electrón sujeto a un potencial periódico constante y unidimensional. El gráfico de en medio (b) muestra las bandas en la primera zona de Brillouin, mientras que los gráficos laterales (a) y (c), con curvas en líneas de guiones, muestran el carácter periódico de las mismas y la forma en que se extienden a las zonas contiguas en el espacio recíproco. La curva transversal a las tres columnas indica los puntos de degeneración en los bordes de zona que, por acción de un potencial no constante apropiado, pueden romperse generando zonas (*gaps* [11, 12]) de energía sin estados electrónicos.

Un aspecto notable de este ejemplo es la presencia de degeneración, o puntos en la primera zona de Brillouin en donde las bandas se entrecruzan. La existencia de degeneración no es, sin embargo, propia del ejemplo sino que depende de las características del potencial de la red [11, 12]. El ejemplo es fundamental para clarificar este aspecto, pues puede tomarse como punto de partida para estudiar, a través de teoría de perturbaciones, la distorsión que la adición de términos no constantes al potencial produce sobre

la estructura parabólica de las bandas y, en particular, comprender las circunstancias en las que se produce la ruptura de las degeneraciones [11, 12]. Asimismo, este tratamiento permite mostrar cómo el levantamiento de algunas degeneraciones en puntos específicos de la primera zona de Brillouin conlleva la aparición de brechas o *gaps* entre las bandas, que corresponden a energías para las cuales no existen estados electrónicos. En el diagrama esquemático de la fig. 1.5, esto ocurre especialmente en los bordes de zona (los extremos  $\pm\pi/a$ ). La importancia de los *gaps* (fig. 1.6) es difícil de sobreestimar, pues los mismos son conceptualmente fundamentales en la categorización de los materiales en los tres grandes grupos de *metales*, *semiconductores* y *aislantes* [11, 12].

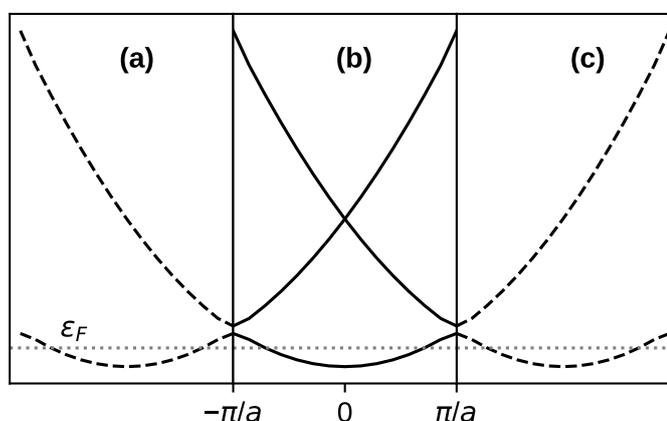


Figura 1.6: Esquema de la estructura de bandas en un cristal unidimensional provisto de un potencial  $U(\mathbf{r})$  no constante pero tenue. Los puntos donde se entrecruzaban las bandas en la fig. 1.5 ahora están separados, mostrando la presencia de *gaps*. La línea punteada en gris muestra una posible ubicación del nivel de Fermi  $\epsilon_F$ , en este caso de un metal.

El concepto de *gap*, sin embargo, no categoriza por sí mismo un material. Es necesario considerar asimismo la forma en que los electrones de valencia ocupan los estados disponibles en el cristal. En este proceso, el principio de exclusión de Pauli es fundamental y la densidad de electrones disponibles, provistos por cada celda (que puede o no constar de un único átomo como en el caso de los metales alcalinos) es importante para comprender la forma en que esta ocupación de niveles ocurre. Un concepto que incluye estas consideraciones es el de *energía de Fermi*, que puede definirse como la energía  $\epsilon_F$  del estado que es ocupado por el (o los) electrones más energéticos a una temperatura  $T = 0$  K [12]. La energía de Fermi define, asimismo, una escala de temperatura

$T_F = \epsilon_F/k_B$ , con  $k_B$  la constante de Boltzmann; que depende de la densidad electrónica, y en muchos casos (especialmente en los metales puros) alcanza órdenes de magnitud mucho mayores (e.g.,  $10^4$  K [17]) que las temperaturas ambiente típicas de  $\approx 300$  K [17]. Esto simplifica notoriamente el estudio de propiedades como la conductividad [11] o el calor específico [12] de los materiales, entre otras; y particularmente la construcción del estado fundamental del conjunto de electrones, pues permite suponer, como muy buena aproximación, que los efectos de excitación térmica no son apreciables, salvo apenas en la vecindad de  $\epsilon_F$  [17]. La ubicación, en energía, del nivel de Fermi en la estructura de bandas da información acerca de si los electrones más energéticos tienen niveles de energía próximos o no. En tres dimensiones, la descripción puede ser compleja [12], pero en una dimensión algunas de estas complicaciones se desvanecen. Suponiendo, entonces, un cristal unidimensional y basando la discusión en un esquema como el de las figs. 1.5 y 1.6, puede comprenderse cualitativamente que, en los metales, el nivel de Fermi se halla en el rango energético de una o varias bandas [12] (fig. 1.6); mientras que en los aislantes y semiconductores, puede encontrarse dentro de un *gap* o coincidir en algunos puntos con el borde de una banda. Las bandas de menor energía en estos últimos están totalmente llenas [11, 12].

En los metales, los estados desocupados cuyas energías son superiores pero cercanas al nivel de Fermi permiten a los electrones más energéticos responder ante estímulos eléctricos y térmicos [11], lo que posibilita la circulación de los electrones delocalizados en el material (e.g., la existencia *corriente* eléctrica). Por el contrario, en los aislantes la separación energética entre estos electrones y los próximos estados disponibles (i.e., el orden de magnitud de un *gap*) supera ampliamente las energías típicas de estos estímulos y por tanto los mismos no conducen. Los semiconductores, en cambio, constituyen casos intermedios en los que esta separación no es tan pronunciada. Esto permite a algunos de los electrones de valencia más energéticos adoptar estados de conducción, principalmente por excitación térmica cuando el material se encuentra a temperaturas moderadas [11]. La densidad electrónica de conducción en estos últimos es menor a la de un metal a una misma temperatura pero no tan menor como la de un aislante en las mismas condiciones. La figura 1.7 esquematiza la diferencia entre estos tres tipos de materiales.

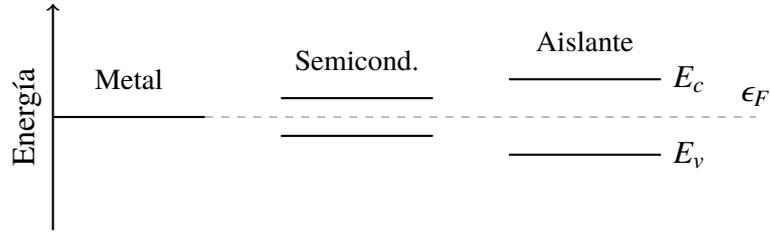


Figura 1.7: Esquema simplificado (basado en [11]) que explicita una de las principales diferencias entre los metales, semiconductores y aislantes. Los primeros carecen de un *gap* entre los últimos niveles ocupados por electrones (a  $T = 0$ ) y los niveles vacíos; mientras que en los últimos, estos están separados por una región de energías sin estados disponibles. Esta diferencia distingue las bandas de valencia de las de conducción, cuyos bordes se esquematizan por las energías  $E_v$  y  $E_c$ , respectivamente.

### 1.3. Aproximación de función envolvente

Una hipótesis central de la descripción desarrollada en la sección anterior radica en la periodicidad espacial irrestricta del cristal. Esta periodicidad requiere no sólo que el material sea homogéneo en su composición sino también que el mismo carezca de bordes o limitación espacial alguna. Por esto, al considerar apartamientos tanto en la pureza del semiconductor (e.g., mediante la inclusión de impurezas sustitutivas [10]) o en su geometría (e.g., suponiéndola limitada en el espacio), esta periodicidad absoluta reflejada en el potencial del cristal  $U(\mathbf{r})$  se pierde [10].

Así, el problema (1.12) es modificado por la inclusión de un potencial  $V(\mathbf{r})$  ajeno al cristal, en el sentido de que modela el apartamiento considerado; y toma la forma

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + U(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}) = \epsilon \Psi(\mathbf{r}); \quad (1.27)$$

que es pues más difícil de abordar. Para simplificar esta ecuación, un método frecuentemente utilizado, que aprovecha la teoría desarrollada para el cristal puro, se basa principalmente en suponer que el número de celdas primitivas  $N$  del mismo 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. Partiendo de esta hipótesis y expresando el autoestado buscado  $\Psi(\mathbf{r})$  como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n,i} C_n(\mathbf{R}_i) W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i); \quad (1.28)$$

en términos de las funciones de Wannier [10-12]

$$W_n(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_j} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (1.29)$$

con  $n$  el índice que numera las bandas y  $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  la función de Bloch de la banda  $n$ ; es posible mostrar [10] que la variable  $\mathbf{R}$  y el impulso cristalino  $\mathbf{k}$  pueden asociarse a operadores que guardan entre sí relaciones de conmutación similares a las del impulso  $\mathbf{p}$  y el operador posición  $\mathbf{r}$  verdaderamente continuo; es decir,

$$\mathbf{R} \leftrightarrow i \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \quad \text{y} \quad \mathbf{k} \leftrightarrow -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}. \quad (1.30)$$

Estas permiten transformar el hamiltoniano del cristal puro en un operador que actúe sobre las funciones de Wannier si se observa que la definición de las mismas permite calcular

$$(W_n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i), H_0 W_{n'}(\mathbf{r}, \mathbf{R}_i)) = \delta_{ij} \delta_{nn'} E_n(\mathbf{k}) \leftrightarrow \delta_{ij} \delta_{nn'} E_n \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right) \quad (1.31)$$

donde  $(\cdot, \cdot)$  es el producto interno en el espacio de Hilbert y  $E_n(\mathbf{k})$  es precisamente la banda  $n$  [10]. A partir de esta asociación y proponiendo la expansión (1.28) es posible transformar la ec. (1.27) en una ecuación de ondas para los coeficientes  $C_n(\mathbf{R})$ ,

$$E_n \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \right) C_n(\mathbf{R}) = \epsilon C_n(\mathbf{R}); \quad (1.32)$$

que son conocidos asimismo como *funciones envolventes*.

El potencial puede agregarse en esta aproximación si se supone que la variación del mismo es casi imperceptible dentro de cada celda unidad (i.e., es casi constante) [10]; es decir,

$$a_0 |\nabla V(\mathbf{r})| \ll V(\mathbf{r}) \quad (1.33)$$

donde  $a_0$  es una longitud característica de la celda (e.g., la longitud del vector primitivo más largo). De esta hipótesis, entonces, puede suponerse buena la aproximación

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{R}) + (\mathbf{r} - \mathbf{R}) \cdot \nabla V(\mathbf{R}) + O(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|^2) \approx V(\mathbf{R}); \quad (1.34)$$

y, por tanto, puede incluirse el potencial en la ec. (1.32) considerando sólo el término de orden cero  $V(\mathbf{R})$  [10].

Finalmente, si se supone que los estados estudiados son los próximos a un extremo de energía de la banda; y que la misma es, en derredor de éste, isótropa y homogénea respecto del impulso  $\mathbf{k}$ , puede adicionarse a lo discutido la aproximación

$$E_n(\mathbf{k}) \approx E_n(\mathbf{K}_0) + \frac{1}{2m_n^*}(\mathbf{k} - \mathbf{K}_0)^2 \rightarrow E_n(\mathbf{K}_0) + \frac{1}{2m_n^*} \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \mathbf{K}_0 \right)^2 \quad (1.35)$$

que permite escribir

$$\left[ \frac{1}{2m_n^*} \left( -i \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} - \mathbf{K}_0 \right)^2 + V(\mathbf{R}) \right] C_n(\mathbf{R}) = (\epsilon - E_n(\mathbf{K}_0)) C_n(\mathbf{R}) \quad (1.36)$$

donde  $m_n^*$  es la *masa efectiva* [10] de la banda  $n$  en el punto  $\mathbf{K}_0$ .

## 1.4. Interacción espín-órbita en sólidos cristalinos

La interacción espín-órbita puede introducirse, de forma general, al hamiltoniano de la banda en la aproximación de masa efectiva a través un término derivado de la ec. (1.8) (cf. §1.1) y expresado en términos del impulso cristalino  $\mathbf{k}$ :

$$H_{\text{SO}} \propto (\nabla U(\mathbf{r}) \times \mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (1.37)$$

No obstante, esta expresión rara vez es utilizada directamente. En efecto, en algunos casos [9, 10, 18], particularmente en aquellos que modelan sistemas reales, esta forma es nuevamente aproximada, teniendo en cuenta, por ejemplo, las propiedades geométricas de la estructura cristalina del material.

Dos de las formas reducidas usualmente consideradas son las de Bychkov-Rashba [19] y Dresselhaus [20]. La primera fue estudiada en estructuras bidimensionales planas, y está íntimamente ligada a la ausencia de simetría de inversión espacial debida en algunos casos al confinamiento de las cargas en el material. La segunda, de forma similar, es debida a la ausencia de esta simetría ya no por efectos de confinamiento sino por propiedades geométricas en volumen de la estructura cristalina. Ambas surgen en una multiplicidad de configuraciones y son por tanto ampliamente estudiadas [18, 21]. El hamiltoniano de Rashba es lineal en el impulso  $\mathbf{k}$  [19]

$$H_{\text{SO}}^{(\text{R})} \propto (\vec{\sigma} \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{z} = \sigma_y k_x - \sigma_x k_y; \quad (1.38)$$

mientras que el de Dresselhaus en general involucra términos de mayor orden. Al tratar con estructuras de baja dimensión, sin embargo, es posible deducir de este último expresiones lineales, basadas en propiedades del potencial confinante [22]. La utilizada en este trabajo es recurrente en la literatura, especialmente cuando se tratan sistemas bidimensionales [23, 24], y toma la forma

$$H_{\text{SO}}^{(\text{D})} = \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y); \quad (1.39)$$

donde, al igual que en la expresión (1.38), los subíndices  $x$  e  $y$  indican componentes cartesianas, y  $\hat{z}$  es el versor cartesiano perpendicular al plano  $xy$ .

La expresión completa (1.37) puede interpretarse, más generalmente, como la acción de un campo efectivo dependiente del impulso  $\mathbf{k}$

$$\vec{\Omega}(\mathbf{k}) \propto \nabla U(\mathbf{r}) \times \mathbf{k}; \quad (1.40)$$

sobre el espín de la carga, que tiende a orientarlo en su dirección, en analogía con el efecto Zeeman [1]. Esta perspectiva ayuda a interpretar geoméricamente la interacción [21, 25] y sus efectos, especialmente en los casos lineales (1.38) y (1.39). Para el caso de Rashba es posible concluir en particular que el efecto tiende a orientar el espín en dirección perpendicular al impulso, pues el campo  $\vec{\Omega}(\mathbf{k})$ , como operador, es ortogonal a este último en todo momento.



## Modelo estudiado

El modelo tratado considera un anillo cuántico constituido por un semiconductor anular delgado, plano y caracterizado por los radios externo  $a$  e interno  $a' \lesssim a$  (fig. 2.1).

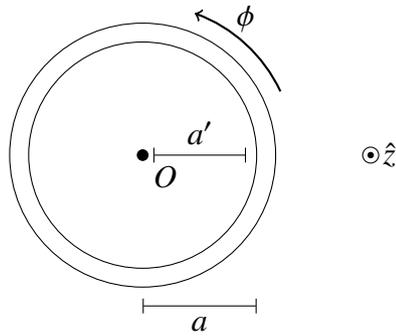


Figura 2.1: Esquema del anillo cuántico (QR) estudiado. El semiconductor se encuentra en la región delimitada por los radios  $a$  y  $a' \lesssim a$ . Los bordes que la definen se suponen totalmente reflejantes, confinan a los electrones de conducción y transforman el semiconductor en un pozo cuántico efectivo de profundidad infinita [10].

Los bordes que delimitan la región anular se suponen perfectamente reflejantes para los electrones en el semiconductor; en particular para los de conducción, que pueden, por tanto, suponerse espacialmente confinados a la región anular y afectados por un potencial de tipo *hard wall* de simetría cilíndrica descriptible como

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} +\infty & r \leq a' \\ 0 & a' < r < a \\ +\infty & r \geq a \end{cases} \quad (2.1)$$

donde  $r$  es la coordenada radial en un sistema polar plano con origen en el punto  $O$  de la fig. 2.1.

El sistema se supone a  $T = 0$ , y del semiconductor únicamente se considera una banda de conducción en la aproximación de masa efectiva y dopada remotamente con un electrón. Se supone, más aún, que ésta presenta un mínimo de energía en el centro de la primera zona de Brillouin (punto  $\Gamma = \mathbf{k} = 0$  de la red recíproca) y que su estructura en derredor del mismo es homogénea e isotrópica respecto del impulso cristalino  $\mathbf{k}$ ; i.e.,

$$E_{c\mathbf{k}} - E_{c\Gamma} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}; \quad (2.2)$$

con  $m^*$  la masa efectiva. Los estados de conducción  $\Psi(\mathbf{r})$  pueden desarrollarse entonces en términos de las funciones de Wannier  $W(\mathbf{r})$  asociadas la banda [10] como

$$\Psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N \psi(\mathbf{R}_n) W(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n); \quad (2.3)$$

donde  $\{\mathbf{R}_n\}_{1 \leq n \leq N}$  los vectores de la red cristalina que describen la estructura del semiconductor; y  $\psi(\mathbf{R}_n)$  funciones *envolventes* que, en este caso, son autofunciones del hamiltoniano efectivo derivado de (2.2),

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

La interacción espín-órbita puede incluirse directamente en esta aproximación, a través de la adición de un término  $H_{SO}$  apropiado al hamiltoniano  $H_0$ , que en este trabajo se supone lineal en el impulso  $\mathbf{k} = -i\nabla$  y de la forma

$$H_{SO} = \begin{pmatrix} k_x & k_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix} \quad (2.5)$$

donde  $k_x = -i\partial_x, k_y = -i\partial_y$  son componentes cartesianas de  $\mathbf{k}$  referidas al sistema polar con centro en  $O$  (fig. 2.1); y  $\sigma_x, \sigma_y$  matrices de Pauli. Las constantes de acoplamiento  $\alpha_{ij} \in \mathbb{R}, i, j \in \{x, y\}$ , pueden reescribirse convenientemente como

$$\begin{aligned} \alpha_{xx} &= \beta + \delta_{xx} & \alpha_{xy} &= \alpha \\ \alpha_{yx} &= -\alpha + \delta_{yx} & \alpha_{yy} &= -\beta; \end{aligned} \quad (2.6)$$

siendo  $\delta_{xx}, \delta_{yx} \in \mathbb{R}$  nuevas constantes; de forma que el término  $H_{SO}$  revele los acoplamientos de Rashba  $H_R$  y Dresselhaus  $H_D$  para geometrías planas [19-21, 23],

$$H_R = \alpha(k_x\sigma_y - k_y\sigma_x) \quad (2.7)$$

$$H_D = \beta(k_x\sigma_x - k_y\sigma_y), \quad (2.8)$$

con  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ . De esta forma,  $H_{SO}$  es conformado por la adición de estas dos interacciones de importancia y un término que considera apartamientos respecto de las mismas; es decir,

$$H_{SO} = H_R + H_D + (\delta_{xx}k_x + \delta_{yx}k_y)\sigma_x. \quad (2.9)$$

La geometría anular del semiconductor, reflejada en la simetría del potencial confinante (2.1), sugiere transformar el hamiltoniano total  $H = H_0 + H_{SO}$  a un sistema de coordenadas planas polares. Esto puede hacerse de muchas formas. La utilizada en este consiste en reexpresar el operador impulso  $\mathbf{k}$  en términos de los operadores

$$\partial^\pm \doteq \partial_x \pm i\partial_y = e^{\pm i\phi} \left( \partial_r \pm \frac{i}{r} \partial_\phi \right); \quad (2.10)$$

y escribir

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \alpha(\partial^+ S^- - \partial^- S^+) - i\beta(\partial^+ S^+ + \partial^- S^-) + [\Delta^* \partial^- - \Delta \partial^+] (S^+ + S^-); \quad (2.11)$$

donde  $S^\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$  son los operadores escalera en el espacio de espín, la constante  $\Delta \doteq (\delta_{yx} + i\delta_{xx})/2$ , y se considera la región  $a' < |\mathbf{r}| < a$  donde el potencial (2.1) es constante.

La ecuación de autovalores que determina las envolventes  $\psi(\mathbf{r})$ ,

$$H\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}) \quad (2.12)$$

puede reducirse en complejidad y llevarse a una forma tratable suponiendo que la región anular es sumamente delgada  $a'/a \approx 1$ , aunque no exactamente nula. Para potenciales como el considerado, puede argumentarse [26] que la energía proveniente del confinamiento en la dirección radial es mayor que la asociada al movimiento acimutal y que esta diferencia aumenta con la estrechez de la región. Estas consideraciones pueden resumirse en un procedimiento que aproxime el hamiltoniano total  $H = H_0 + H_{SO}$  por uno unidimensional  $H_\phi$  que describa las contribuciones acimutales de menor energía. El

método consiste en aislar el potencial y los términos radiales en el laplaciano del resto del hamiltoniano y tratar este último término como una perturbación respecto del primero. El término aislado es puramente radial, pues lo es el potencial confinante (2.1), y por tanto sus autofunciones son separables en modos radiales  $R(r)$  y acimutales. Si se supone razonablemente que las contribuciones a la envolvente  $\psi(\mathbf{r})$  provenientes del ancho finito de la región anular (i.e.,  $a' \neq a$ ) son adecuadamente aproximables por el modo radial más bajo  $R_0(r)$ , es posible tomar  $H_\phi$  como el valor medio de los términos restantes calculado sobre este modo [26]; es decir,

$$H_\phi = \left\langle -\frac{\hbar^2}{2m^*r^2} \partial_\phi^2 + H_{\text{SO}} \right\rangle_{R_0}. \quad (2.13)$$

Es posible mostrar [26], por medio de argumentos muy generales, que los valores medios sobre las dependencias radiales en la expresión (2.13) son, en el límite  $a' \rightarrow a$ , independientes de la forma del potencial confinante y, por tanto, de la estructura del modo  $R_0(r)$ . Tomando, entonces, la aproximación de anillo casi unidimensional, se obtienen las expresiones

$$\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{R_0} = \frac{1}{a^2}, \quad \text{y} \quad \langle \partial^\pm \rangle_{R_0} = e^{\pm i\phi} \left( -\frac{1}{2a} \pm \frac{i}{a} \partial_\phi \right); \quad (2.14)$$

las cuales permiten interpretar los operadores  $\partial^\pm$  así aproximados como de subida y bajada cuando actúan sobre el subconjunto de autoestados univaluados en el anillo

$$\{\ell_m(\phi) \doteq e^{im\phi} : m \in \mathbb{Z}\} \quad (2.15)$$

de la proyección  $L_z = -i\hbar\partial_\phi = \hbar(\mathbf{r} \times \mathbf{k})_z$  del impulso angular orbital efectivo  $\mathbf{L}$ ; esto es,

$$\partial^\pm \ell_m \propto \ell_{m\pm 1}. \quad (2.16)$$

A partir de las expresiones (2.14)  $H_\phi$  resulta, reordenando previamente sus términos de forma conveniente,

$$\begin{aligned} H_\phi = & -\epsilon_0 \partial_\phi^2 + [(\alpha - \Delta)S^- - (\Delta + i\beta)S^+] \frac{e^{i\phi}}{a} \left( i\partial_\phi - \frac{1}{2} \right); \\ & + [(\alpha - \Delta^*)S^+ - (\Delta^* - i\beta)S^-] \frac{e^{-i\phi}}{a} \left( i\partial_\phi + \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (2.17)$$

con  $\epsilon_0 \doteq \hbar^2/2m^*a^2$ . Esta expresión puede llevarse a la forma compacta

$$H_\phi = -\epsilon_0 \partial_\phi^2 + F \partial_\phi + \frac{1}{2} (\partial_\phi F); \quad (2.18)$$

a través de un nuevo operador  $F(\phi)$  definido como

$$F(\phi) \doteq \frac{i}{a} \left\{ e^{i\phi} [(\alpha - \Delta)S^- - (\Delta + i\beta)S^+] + e^{-i\phi} [(\alpha - \Delta^*)S^+ - (\Delta^* - i\beta)S^-] \right\}; \quad (2.19)$$

que es anti-hermitiano  $F = -F^\dagger$  y, respecto de su argumento, periódico en  $2\pi$ .

Finalmente, aunando las discusiones precedentes, el problema a tratar consiste en resolver la ecuación de autovalores asociada a  $H_\phi$

$$\left[ -\epsilon_0 \partial_\phi^2 + F \partial_\phi + \frac{1}{2} (\partial_\phi F) \right] \Phi(\phi) = \varepsilon \Phi(\phi), \quad (2.20)$$

y obtener los espinores  $\Phi(\phi)$ , que caracterizan el factor acimutal de las envolventes  $\psi(\mathbf{r}) = R_0(r)\Phi(\phi)$ ; y sus respectivas energías asociadas, que describen cómo la interacción espín-órbita (SO) modifica la estructura de la banda de conducción considerada alrededor de su mínimo.



## Estudio del problema de autovalores

La organización de este capítulo tiene como objetivo mostrar la existencia de una factorización al problema de autovalores (2.20) que permite separarlo en dos sistemas lineales, desacoplados, de ecuaciones diferenciales ordinarias que pueden integrarse numéricamente en algunos casos y resolverse analíticamente en otros.

### 3.1. Factorización

La propuesta consiste en suponer que los espinores autoestados de  $H_\phi$ ,  $\Phi(\phi)$ , son construibles como productos de un factor escalar,  $f(\phi)$ , que toma valores en  $\mathbb{C}$ , y otro con estructura de espinor,  $\chi(\phi)$ ; esto es,

$$\Phi(\phi) = f(\phi)\chi(\phi); \quad (3.1)$$

Insertando esta forma en la ec. (2.20) se obtiene la ecuación equivalente,

$$\varepsilon_0(f''\chi + 2f'\chi' + f\chi'') - F(f'\chi + f\chi') + \left(-\frac{1}{2}(\partial_\phi F) + \varepsilon\right) f\chi = 0; \quad (3.2)$$

donde, por simplicidad, las derivadas respecto de  $\phi$  se denotan con primas.

Tanto la estructura como las propiedades de ambos factores  $f(\phi)$  y  $\chi(\phi)$  no están restringidas más que por el requisito razonable de que resulten funciones suaves de su argumento y la particular condición de que su producto resulte univaluado en el anillo (i.e., periódico en  $2\pi$ ). Esta libertad permite, en general, elegir al menos uno de ellos de forma conveniente y dejar al otro ajustarse a las restricciones que traiga consigo tal elección.

Reordenando términos en la ec. (3.2) y agrupando aquellos que contienen primeras derivadas de  $f$ , se obtiene

$$\epsilon_0(f''\chi + f\chi'') + (2\epsilon_0\chi' - F\chi)f' - Ff\chi' + \left(-\frac{1}{2}(\partial_\phi F) + \varepsilon\right)f\chi = 0. \quad (3.3)$$

Los términos entre paréntesis que multiplican a  $f'$  sugieren una ecuación para el espinor  $\chi$ , independiente del factor escalar  $f$ ,

$$\chi' = \frac{1}{2\epsilon_0}F\chi. \quad (3.4)$$

Tomando esta expresión como condición para  $\chi$  y suponiendo que  $\chi'$  es suave en el intervalo  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ , es posible deducir

$$\chi'' = \frac{1}{2\epsilon_0}(F'\chi + F\chi') = \frac{1}{2\epsilon_0}\left(F'\chi + \frac{1}{2\epsilon_0}F\chi\right) = \frac{1}{2\epsilon_0}F'\chi + \frac{1}{4\epsilon_0^2}F\chi, \quad (3.5)$$

que reduce la ec. (3.3) a la forma factorizada

$$\left[\left(-\frac{1}{4\epsilon_0}F^2 + \varepsilon\right)f + \epsilon_0 f''\right]\chi = 0. \quad (3.6)$$

El operador

$$F^2 = \frac{2|\Gamma|}{a^2}\cos(2\phi + \phi_\Gamma) - \frac{|\alpha - \Delta|^2 + |\Delta + i\beta|^2}{a^2}; \quad (3.7)$$

con  $\Gamma \doteq (\alpha - \Delta)(\Delta + i\beta)$  y  $\phi_\Gamma = \text{Arg } \Gamma$ ; es proporcional a la identidad en el espacio de espín como consecuencia de las relaciones  $S^+S^+ = S^-S^- = 0$  y  $\{S^+, S^-\} = 1$ . Esta propiedad es extremadamente importante pues permite interpretar la expresión entre corchetes en la ec. (3.6) como una ecuación escalar equivalente que involucra únicamente a  $f(\phi)$

$$\left(-\frac{|\Gamma|}{2a^2\epsilon_0^2}\cos(2\phi + \phi_\Gamma) + \frac{|\alpha - \Delta|^2 + |\Delta + i\beta|^2}{4a^2\epsilon_0^2} + \frac{\varepsilon}{\epsilon_0}\right)f + f'' = 0; \quad (3.8)$$

siempre que, por supuesto, se sostenga la hipótesis razonable de que  $\chi(\phi)$  no se anula idénticamente; i.e.,  $\chi \neq 0$ .

No hay que perder de vista, sin embargo, que la separación efectiva de la ec. (2.20) en los sistemas de las ecs. (3.4) y (3.8) no implica que ambos factores sean mutuamente independientes. De hecho, ambos aún están vinculados por la energía  $\varepsilon$  que entra en la ec. (3.8) como un parámetro sin mayor restricción que ser real, y cuya determinación vendrá dada por la condición de periodicidad que  $\Phi(\phi)$  debe satisfacer en el anillo. Esta última, como se mencionó, involucra necesariamente ambos factores.

## 3.2. Estudio de la ecuación factorizada

### 3.2.1. Factor espinorial $\chi(\phi)$

La ec. (3.4) queda completamente determinada por los parámetros que definen  $H_\phi$ , a diferencia de la ecuación para el factor escalar  $f(\phi)$  que posee la energía como un parámetro libre y por determinar. Este aspecto de (3.4) es importante pues la convierte en característica de la configuración elegida para el problema de autovalores (2.20). Para estudiarla conviene remarcar previamente que el espinor  $\Phi(\phi)$  buscado, autoestado de  $H_\phi$  debe resultar univaluado en el anillo y, por tanto, debe ser que:

$$f(\phi)\chi(\phi) = \Phi(\phi) = \Phi(\phi + 2\pi) = f(\phi + 2\pi)\chi(\phi + 2\pi). \quad (3.9)$$

La posibilidad de satisfacer esta ecuación dependerá en buena medida de las propiedades de los espinores  $\chi(\phi)$ , pues el factor escalar es ligeramente adaptable dentro del margen permitido por las restricciones a su grado de libertad: la energía.

Una cualidad importante de la ec. (3.4) es su semejanza con la ecuación de Schrödinger en mecánica cuántica. Puesto que el operador  $F$  es anti-hermitiano  $F = -F^\dagger$  para todo punto  $\phi$  en el anillo, esta ecuación puede escribirse como

$$i\frac{d\chi}{d\phi} = \frac{i}{2\epsilon_0}F\chi. \quad (3.10)$$

donde  $iF/2\epsilon_0$  es ahora un operador hermitiano. Si se interpreta entonces este operador como un hamiltoniano y se indentifica la coordenada acimutal con el tiempo, es posible aplicar la teoría desarrollada para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo al estudio de la ec. (3.10). A partir de esta interpretación es posible inferir la expresión formal para sus soluciones si se observa que éstas describen, en cada punto del anillo, el estado de espín de un electrón:

$$\chi(\phi) = U(\phi)\chi(0) \quad (3.11)$$

donde  $\chi(0)$  es un espinor constante y  $U(\phi)$  es el operador de “evolución” angular en  $\phi$  que, como su par temporal, satisface la ec. (3.10) y puede escribirse en términos de un operador de ordenamiento  $\mathcal{T}_\phi$  [27], aquí en  $\phi$ :

$$U(\phi) = \mathcal{T}_\phi \exp\left(\int_0^\phi F(\phi') d\phi'\right). \quad (3.12)$$

El hecho de que las soluciones a la ec. (3.10) representen estados de espín 1/2 muestra adicionalmente que el espacio de Hilbert generado por las mismas es de dimensión dos. Asimismo, para cada punto de observación en el anillo,  $U(\phi)$  puede interpretarse como una matriz en  $\mathbb{C}^{2 \times 2}$ .

La periodicidad de  $F$ , por otra parte, permite tratar el problema de la ec. (3.10) en el marco de la teoría de Floquet para sistemas de ecuaciones diferenciales periódicas [28, 29] y deducir, a través de la misma, que el operador de evolución  $U(\phi)$  satisface

$$U(\phi + 2\pi) = U(\phi)U(2\pi). \quad (3.13)$$

Si se considera la forma (3.11) y se eligen convenientemente  $\chi(0)$  y  $\rho \in \mathbb{C}$  como un par autovector-autovalor de  $U(2\pi)$ , es entonces posible deducir que la ec. (3.10) admite un tipo particular de soluciones  $\chi_\rho(\phi)$ , conocidas como *pseudoperiódicas* [29, 30], que cuentan con la propiedad

$$\chi_\rho(\phi + 2\pi) = U(\phi + 2\pi)\chi_\rho(0) = U(\phi)U(2\pi)\chi_\rho(0) = U(\phi)\rho\chi_\rho(0) = \rho\chi_\rho(\phi). \quad (3.14)$$

La unitariedad del operador  $U(\phi)$  en el anillo permite deducir que las soluciones así construídas forman, en cada punto del mismo, una base del espacio de Hilbert para los estados de espín del electrón. Para ver esto, es conveniente observar primero que  $U(\phi)$  preserva las relaciones de ortonormalidad entre los vectores  $\chi(0)$  pertenecientes a distintos estados de la forma (3.11). Si se considera luego que  $U(2\pi)$  es también unitaria y por tanto diagonalizable, es entonces posible construir, a partir de una base ortonormal generada por sus autovectores, estados de la forma (3.11) que resulten ortogonales punto a punto en el anillo; es decir:

$$\begin{aligned} \chi_\rho(\phi)^\dagger \chi_{\rho'}(\phi) &= [U(\phi)\chi_\rho(0)]^\dagger [U(\phi)\chi_{\rho'}(0)] \\ &= \chi_\rho(0)^\dagger U(\phi)^\dagger U(\phi)\chi_{\rho'}(0) = \chi_{\rho'}(0)^\dagger \chi_\rho(0) = \delta_{\rho\rho'}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

La interpretación de  $U(\phi)$  en cada punto como una matriz de dimensión finita permite aplicar la fórmula de Jacobi [citation needed] al cálculo del determinante de  $U(2\pi)$  para deducir que el producto de sus (dos) autovalores  $\rho_\pm$  satisface

$$\rho_+\rho_- = \det U(2\pi) = \exp\left(\int_0^{2\pi} \text{Tr } F(\phi') \, d\phi'\right) = 1; \quad (3.16)$$

pues  $\text{Tr } S^\pm = 0$  y por tanto  $\text{Tr } F(\phi) = 0$ . La conjunción entre esta relación y la propiedad  $|\rho_\pm| = 1$ , que satisfacen ambos módulos debido a la unitariedad de  $U(2\pi)$ ; permite escribir

$$\rho_\pm = e^{2\pi i(\pm\mu + n_\pm)} \quad (3.17)$$

con  $n_\pm \in \mathbb{Z}$ , y  $0 \leq \mu \leq 1/2$  obtenible a partir del módulo del argumento principal de  $\rho_\pm$ ,  $\pm 2\pi\mu = \text{Arg } \rho_\pm$ . Los exponentes  $i(\pm\mu + n_\pm)$  son conocidos como *exponentes de Floquet* [29] y, respectivamente, son equivalentes entre sí en el sentido de que generan los mismos *multiplicadores de Floquet*  $\rho_\pm$  a través de sus respectivas partes fraccionarias  $\pm\mu$ . El valor de  $\mu$ , por otra parte, es característico del sistema (3.10) [29], pues proviene de  $U(2\pi)$ , que a su vez depende de  $H_\phi$  y por tanto de las constantes que intervienen en su definición. Así, las soluciones pseudoperiódicas ortogonales dependen fundamentalmente de  $\mu$  y pueden denotarse  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$ .

La ec. (3.10) también puede estudiarse siguiendo un camino alternativo, que parte asimismo de interpretarla como una ecuación de Schrödinger. En efecto, si se expresa el operador  $F$  en términos de las matrices de Pauli  $\sigma_x$  y  $\sigma_y$ , expandiendo los operadores escalera  $S^\pm$  en su definición, se obtiene la ecuación equivalente

$$i\chi' = \mathbf{n} \cdot (\sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y})\chi; \quad (3.18)$$

con  $\mathbf{n}$  un vector cartesiano de componentes reales definidas como

$$\begin{aligned} n_x &\doteq -\frac{1}{2a\epsilon_0} [|\alpha - \Delta| \cos(\phi + \phi_{\alpha,\Delta}) - |\Delta + i\beta| \cos(\phi + \phi_{\beta,\Delta})] \\ n_y &\doteq -\frac{1}{2a\epsilon_0} [|\alpha - \Delta| \sin(\phi + \phi_{\alpha,\Delta}) + |\Delta + i\beta| \sin(\phi + \phi_{\beta,\Delta})] \end{aligned} \quad (3.19)$$

siendo  $\phi_{\alpha,\Delta} \doteq \text{Arg}(\alpha - \Delta)$  y  $\phi_{\beta,\Delta} \doteq \text{Arg}(\Delta + i\beta)$ .

La expresión (3.18) sugiere una forma funcional general para las soluciones del sistema (3.4), que consiste en combinaciones lineales de los autoestados del operador  $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$  punto a punto,  $\chi_{\hat{n},\pm}(\phi)$ ; es decir,

$$\chi(\phi) = g_+(\phi)\chi_{\hat{n},+} + g_-(\phi)\chi_{\hat{n},-}. \quad (3.20)$$

Los coeficientes a determinar  $g_+(\phi)$  y  $g_-(\phi)$  dependen, al igual que los  $\chi_{\hat{n},\pm}$ , del punto de observación en el anillo. Los autoestados  $\chi_{\hat{n},\pm}$ , por otra parte, pueden expresarse convenientemente en términos de los autoestados  $\sigma_z \xi_{\uparrow,\downarrow} = \pm \xi_{\uparrow,\downarrow}$ , a través de la aplicación

de una rotación sobre los últimos que los orienten en la dirección de los primeros [27]. Esta transformación se compone, punto a punto, de una rotación sobre un eje contenido en el plano del anillo (e.g.,  $xy$ ) y otra sobre un eje contenido en un plano perpendicular a este último (e.g.,  $xz$ ). La primera es de ángulo fijo  $\pi/2$  pues el vector  $\mathbf{n}$  está contenido en el plano del anillo (i.e.,  $n_z \equiv 0$ ) y, por tanto, cualquier rotación respecto de éste es independiente de  $\phi$  [27]. La segunda, por el contrario, depende del punto de observación y es de ángulo

$$\tan \gamma = \frac{n_y}{n_x} = \frac{|\alpha - \Delta| \sin(\phi + \phi_{\alpha, \Delta}) + |\Delta + i\beta| \sin(\phi + \phi_{\beta, \Delta})}{|\alpha - \Delta| \cos(\phi + \phi_{\alpha, \Delta}) - |\Delta + i\beta| \cos(\phi + \phi_{\beta, \Delta})}. \quad (3.21)$$

Los autoestados del operador  $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$ , con  $\vec{\sigma} \doteq \sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y}$  adoptan, entonces, la forma funcional [27]

$$\begin{aligned} \chi_{\hat{n}, \pm}(\phi) &= \exp\left(-i\frac{\gamma}{2}\sigma_z\right) \exp\left(-i\frac{\pi}{4}\sigma_y\right) \xi_{\uparrow, \downarrow} \\ &= \exp\left(-i\frac{\gamma}{2}\sigma_z\right) \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \xi_{\uparrow} + \xi_{\downarrow}) \\ &= \exp\left(-i\frac{\gamma}{2}\right) \frac{1}{\sqrt{2}} (\pm \xi_{\uparrow} + e^{i\gamma} \xi_{\downarrow}). \end{aligned} \quad (3.22)$$

Insertando la propuesta (3.20) en la ec. (3.18) y recordando que los autovalores asociados a los autoestados  $\chi_{\hat{n}, \pm}$  de  $\mathbf{n} \cdot \vec{\sigma}$  son [27], respectivamente,  $\pm|\mathbf{n}|$  se obtiene finalmente el sistema

$$\frac{d}{d\phi} \begin{pmatrix} g_+ \\ g_- \end{pmatrix} = -i \begin{pmatrix} |\mathbf{n}| & \frac{\gamma'}{2} \\ \frac{\gamma'}{2} & -|\mathbf{n}| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_+ \\ g_- \end{pmatrix}; \quad (3.23)$$

en el que las primas denotan, como antes, derivadas respecto de  $\phi$ .

La ortonormalidad punto a punto (3.15) puede utilizarse para dar formas paramétricas a los  $g_{\pm}(\phi)$  en estos casos, aunque el sistema (3.23) sea aún más difícil de integrar que el original (3.4) en virtualmente la totalidad de los mismos. Proponiendo, entonces, una solución de este tipo escrita en la forma (3.20),

$$\chi_{\mu}(\phi) = \frac{e^{-i\gamma/2}}{\sqrt{2}} \{ [g_+(\phi; \mu) - g_-(\phi; \mu)] \xi_{\uparrow} + e^{i\gamma} [g_+(\phi; \mu) + g_-(\phi; \mu)] \xi_{\downarrow} \} \quad (3.24)$$

y siendo que los espinores  $\xi_{\uparrow, \downarrow}$  son ortonormales, la propiedad (3.15) se traduce en la igualdad

$$|g_+(\phi; \mu) - g_-(\phi; \mu)|^2 + |g_+(\phi; \mu) + g_-(\phi; \mu)|^2 = 2; \quad (3.25)$$

a partir de la cual los coeficientes  $g_{\pm}(\phi; \mu)$  pueden suponerse parametrizados como

$$\begin{aligned} g_+(\phi; \mu) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\vartheta_-(\phi; \mu)} \cos(\phi + \phi_0) + e^{i\vartheta_+(\phi; \mu)} \operatorname{sen}(\phi + \phi_0) \right] \\ g_-(\phi; \mu) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left[ e^{i\vartheta_+(\phi; \mu)} \operatorname{sen}(\phi + \phi_0) - e^{i\vartheta_-(\phi; \mu)} \cos(\phi + \phi_0) \right]; \end{aligned} \quad (3.26)$$

en términos de dos funciones reales  $\vartheta_{\pm}(\phi; \mu)$  a determinar, que aportan las fases que distinguen uno de otro; y  $\phi_0$ , que está vinculado a la amplitud de las proyecciones sobre  $\xi_{\uparrow, \downarrow}$  de los autovectores  $\chi_{\rho}(0)$  de la matriz  $U(2\pi)$ , a partir de los cuales se construyen los  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$ .

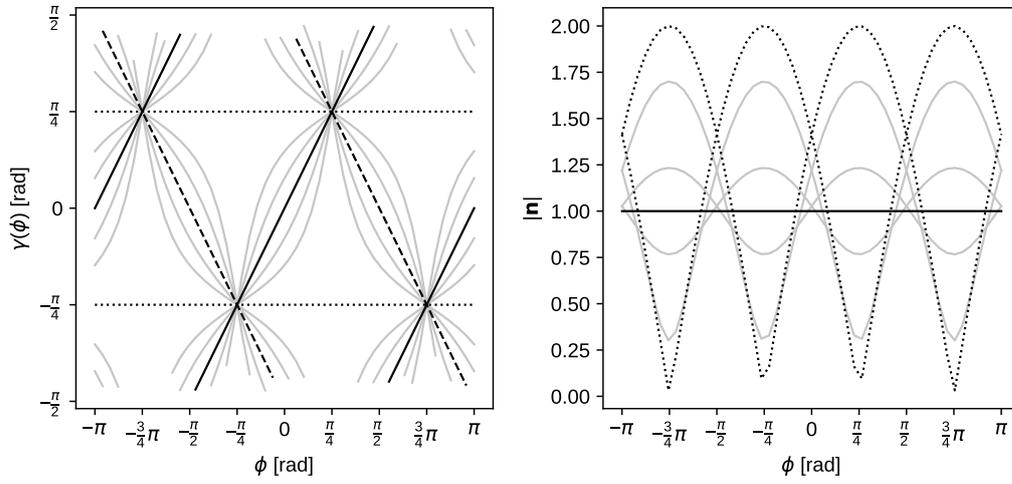


Figura 3.1: Dependencia del ángulo de rotación acimutal  $\gamma$  (izquierda) y de la magnitud  $|\mathbf{n}|$  (derecha) para distintas intensidades relativas entre las constantes de acoplamiento de Rashba  $\alpha$  y Dresselhaus  $\beta$ . Las líneas de trazo grueso corresponden, en ambos gráficos, a algunos de los casos para los que existen soluciones analíticas cerradas. Referencia: (—):  $\alpha \neq 0 = \beta$ ; (---):  $\alpha = 0 \neq \beta$ ; ( $\cdot \cdot \cdot$ ):  $\alpha = \pm\beta$ .

La figura 3.1 muestra las curvas  $\gamma(\phi)$  y  $|\mathbf{n}(\phi)|$  para para distintas relaciones entre las constantes  $\alpha$  y  $\beta$  en el caso  $\Delta = 0$ . Estas corresponden a las configuraciones de  $H_{\phi}$  que involucran únicamente las interacciones de Rashba y Dresselhaus. Las rectas remarcadas destacan los casos resolubles analíticamente, para los cuales las dependencias de ambas variables con las constantes de acoplamiento se simplifican notablemente. Estos casos conforman los cuatro grandes grupos de configuraciones (tabla 3.1) que se analizarán oportunamente en §4.2.

Grupo	$\tan \gamma(\phi)$	$\gamma'(\phi)$	$ \mathbf{n} (\phi)$
$\alpha \neq 0 = \beta$	$\tan \phi$	1	$ \alpha /2a\epsilon_0$
$\alpha = 0 \neq \beta$	$\cot \phi$	-1	$ \beta /2a\epsilon_0$
$\alpha = \pm\beta$	$\pm\pi/4$	0	$ \alpha \cos(\phi \mp \pi/4) /a\epsilon_0$

Tabla 3.1: Configuraciones especiales de  $H_\phi$  en el caso  $\Delta = 0$  para las cuales existen expresiones analíticas cerradas de los espinores  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$ .

### 3.2.2. Factor escalar $f(\phi)$

El comportamiento del factor escalar  $f(\phi)$ , por otra parte, está regido por la ecuación (3.8). Esta es notoriamente similar, en forma, a la conocida y ampliamente estudiada *ecuación de Mathieu* [31, 32]. La primera puede identificarse [33] como una expresión particular de la forma más general de la segunda

$$(p - 2q \cos(2\phi))f + f'' = 0, \quad (3.27)$$

si se definen los parámetros adimensionales

$$\begin{aligned} 2q &= \frac{|\Gamma|}{2\epsilon_0^2 a^2} = \frac{|(\alpha - \Delta)(\Delta + i\beta)|}{2\epsilon_0^2 a^2} \\ p &= \frac{|\alpha - \Delta|^2 + |\Delta + i\beta|^2}{4\epsilon_0^2 a^2} + \frac{\epsilon}{\epsilon_0}, \end{aligned} \quad (3.28)$$

y se aplica la traslación  $2\phi \rightarrow 2\phi - \phi_\Gamma$ . Por la forma en que están identificados, los parámetros  $p$  y  $q$  no guardan relaciones unívocas con las constantes de acoplamiento  $\alpha, \beta$  y  $\Delta$ . Este aspecto de la ec. (3.8) es sin duda notable pues sugiere que existen diversas configuraciones de  $H_\phi$  que corresponden exactamente a la misma ecuación, aunque las interacciones que éstas representan sean fundamentalmente diferentes.

Es sabido [31-33] que, dados  $q \in \mathbb{R}$  y  $\nu \in \mathbb{R}$ , existe un valor para el parámetro  $p$ ,  $p(\nu, q) \in \mathbb{R}$ , para el cual la ecuación de Mathieu admite una solución *de Floquet* [33]  $f_\nu(\phi; q)$  que satisface

$$f_\nu(\phi + 2\pi; q) = e^{2\pi i \nu} f_\nu(\phi; q). \quad (3.29)$$

La versatilidad de este resultado radica en la libertad sobre  $\nu$  pues  $q$  está determinado por las constantes  $\alpha, \beta, \Delta$  y  $\epsilon_0$ ; y es crucial para el método de factorización propuesto, pues permite argüir que un espinor univaluado (i.e., periódico) autoestado de  $H_\phi$  puede

ser ensamblado a partir de un espinor pseudoperiódico  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$  y una solución a la ecuación de Mathieu  $f_\nu(\phi; q)$  elegida convenientemente de manera que el producto de ambos satisfaga

$$\begin{aligned} f_\nu\left(\phi + \frac{\phi_\Gamma}{2} + 2\pi; q\right) \chi_{\mu s}(\phi + 2\pi) &= \left[ e^{2\pi i \nu} f_\nu\left(\phi + \frac{\phi_\Gamma}{2}; q\right) \right] \left[ e^{2\pi i s \mu} \chi_{\mu s}(\phi) \right] \\ &= f_\nu\left(\phi + \frac{\phi_\Gamma}{2}; q\right) \chi_{\mu s}(\phi); \end{aligned} \quad (3.30)$$

con  $s = \pm 1$ ; es decir, eligiendo su exponente como  $\nu = -s\mu + sm$ ,  $m \in \mathbb{Z}$ . El entero  $m$  está relacionado al hecho de que  $2\pi i \nu$  es un exponente de Floquet y, por tanto, el multiplicador  $e^{2\pi i \nu}$  es invariante ante el cambio  $\nu \rightarrow \nu + sm$ . Esta relación define un conjunto de soluciones  $f_{-s\mu, m}(\phi; q)$  y de valores asociados para el parámetro  $p$ ,  $p_m(-s\mu, q)$ , que determinan, indirectamente a través de  $\mu$ , el espectro de energías  $\varepsilon/\varepsilon_0$  en función de las constantes que intervienen en  $H_\phi$ .

Es posible mostrar (ver apéndice) que las funciones  $f_{-s\mu, m}(\phi; q)$  forman un conjunto ortonormal en el intervalo que cubre el anillo  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ . Esta propiedad y la ortonormalidad punto a punto (3.15) de los espinores  $\chi_{\mu s}(\phi; q)$ , permite interpretar las  $f_{-s\mu, m}(\phi; q)$  como las amplitudes de probabilidad de sus autoestados asociados  $\Phi_{s\mu, m}(\phi; q)$ ; es decir,

$$\Phi_{s\mu, m}^\dagger(\phi; q) \Phi_{s\mu, m}(\phi; q) = \left| f_{-s\mu, m}\left(\phi + \frac{\phi_\Gamma}{2}; q\right) \right|^2. \quad (3.31)$$



## Estudio de las soluciones

### 4.1. Configuración general

Aunando los resultados obtenidos para ambos factores, es posible dar finalmente una expresión para los autoestados de  $H_\phi$ . Para hacerlo, sin embargo, es conveniente [33] separar el caso periódico puro  $\mu = 0$ , de los casos pseudoperiódicos  $\mu > 0$ . Las funciones de Mathieu  $f_m(\phi; q)$  en el primero pueden dividirse [33] en pares  $ce(\phi; q)$  e impares  $se(\phi; q)$  respecto de  $\phi$ , como sigue:

$$f_m(\phi; q) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \begin{cases} ce_m(\phi; q) & m \geq 0 \\ -i se_{-m}(\phi; q) & m < 0 \end{cases} \quad (4.1)$$

y los autoestados de  $H_\phi$  periódicos resultan

$$\Phi_{\pm, m}(\phi; q) = f_m(\phi; q) \chi_{\pm}(\phi). \quad (4.2)$$

Para los casos pseudoperiódicos, en cambio, los autoestados adoptan la forma

$$\Phi_{\mu\pm, m}(\phi; q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} me_{\mp(\mu-m)}\left(\phi + \frac{\phi_\Gamma}{2}; q\right) \chi_{\mu\pm}(\phi); \quad (4.3)$$

donde las  $me_\nu(\phi; q)$ ,  $\nu \notin \mathbb{Z}$ , son funciones de Mathieu de orden no entero [33] o fraccionario [31].

A excepción de algunos casos especiales, como los mencionados en la tabla 3.1 en los que pueden obtenerse resultados exactos, el cálculo preciso de las funciones de Mathieu y del espectro de energías para una configuración arbitraria de  $H_\phi$  debe hacerse por métodos numéricos. No obstante, existen expansiones asintóticas en términos de  $q$  para

las  $f_{-s\mu,m}(\phi; q)$  y el espectro  $p_m(-s\mu, q)$ , tanto para el caso periódico  $\mu = 0$  como para los pseudoperiódicos  $\mu > 0$ ; especialmente en el límite  $|q| \ll 1$  [31, 32] (ver también [33]). Las correspondientes al caso periódico dependen no sólo de la paridad sino también del orden de la función de Mathieu considerada. Por simplicidad, entonces, estas no serán expuestas aquí. Los primeros términos que aproximan el espectro en los casos pseudoperiódicos son [33]

$$\frac{\varepsilon_m}{\varepsilon_0} = -\frac{|\alpha - \Delta|^2 + |\Delta + i\beta|^2}{4\varepsilon_0^2 a^2} + (\mu - m)^2 + \frac{q^2}{2(m - \mu)^2 - 2} + O(q^4); \quad (4.4)$$

mientras que aquellos que hacen lo propio en las funciones de Mathieu [33] toman la forma,

$$\text{me}_{\mp(\mu-m)}(\phi; q) = e^{\mp(\mu-m)\phi} - \frac{q}{4} \left( \frac{e^{i(\mp\mu\pm m+2)\phi}}{\mp(\mu-m)+1} - \frac{e^{i(\mp\mu\pm m-2)\phi}}{\mp(\mu-m)-1} \right) + O(q^2). \quad (4.5)$$

A pesar de que los términos de ambas expansiones son regulares, en el sentido de que carecen de singularidades (pues  $0 < \mu \leq 1/2$  y por tanto  $|\mu - m| \notin \mathbb{N}_0$ ), la aplicabilidad de las mismas, sobre todo al cálculo numérico, está limitada por la relación entre  $|q|$  y los denominadores que involucran potencias de  $\mp(\mu - m)$  [31, 34], especialmente cuando  $\mu \gtrsim 0$ . En estas situaciones, la condición  $|q| \ll 1$  puede volverse sumamente restrictiva, particularmente en el cálculo del espectro, donde es sabido que la convergencia de la serie (4.4) es lenta [34], por lo que tales casos es necesario considerar términos de orden superior en  $|q|$  o recurrir a fórmulas alternativas como por ejemplo aquellas basadas en los desarrollos de Fourier de las  $\text{me}_{\mp(\mu-m)}(\phi; q)$  [33].

Las expansiones (4.4) y (4.5) constituyen buenas aproximaciones en un gran número de configuraciones reales, pues éstas usualmente corresponden a valores de  $q$  en el rango  $|q| \lesssim 1$ . Por ejemplo, para un semiconductor anular típico de radio  $a \approx 20$  nm [35] y de masa efectiva  $m^* = 0.1m_0$ , con  $m_0$  la masa del electrón libre, (e.g., InGaAs [36, 37]); y constantes de acoplamiento SO usuales en estos sistemas [38],  $\alpha/\hbar = 8$  nm ps<sup>-1</sup> y  $\beta/\hbar = 14$  nm ps<sup>-1</sup>, se obtiene  $q \approx 0.0172$ .

La expansión (4.4) deja entrever que el espectro en los casos pseudoperiódicos no depende del signo global de  $\mp(\mu - m)$  sino de potencias de su valor absoluto  $|\mu - m|$ . Esta propiedad, válida a todo orden en  $q$  pues  $p_m(-s\mu, q) = p_{-m}(s\mu, q)$  [33], permite inferir que los estados  $\Phi_{\mu\pm,m}(\phi; q)$  son degenerados. Esta degeneración se mantiene en el caso periódico  $\mu = 0$ , pues el espectro depende únicamente del orden  $m$  de la función

de Mathieu que da el factor escalar, y es independiente del factor espinorial que la acompaña. En este caso, entonces, ambos factores están en algún sentido desvinculados uno del otro, pues ambos son periódicos y por tanto cualquier combinación lineal de los espinores  $\chi_{\pm}(\phi)$ , soluciones de (3.4), conforma, junto a una función de Mathieu periódica, un autoestado de  $H_{\phi}$ .

## 4.2. Configuración con Rashba y Dresselhaus

La ausencia del término  $(\delta_{xx}k_x + \delta_{yx}k_y)\sigma_x$  en el hamiltoniano  $H_{SO}$  (i.e.,  $\Delta = 0$ ) corresponde a una multiplicidad de configuraciones de  $H_{\phi}$  en las que sólo las interacciones de Rashba y Dresselhaus están presentes. Éstas vienen dadas esencialmente por la relación entre las constantes de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta$ , y pueden dividirse (arbitrariamente) en cuatro grandes grupos:  $\alpha = 0 \neq \beta$ ,  $\alpha \neq 0 = \beta$ ,  $|\alpha| = |\beta|$  y las demás, que forman el grupo más general donde intervienen ambas interacciones  $\alpha, \beta \neq 0$  con acoplamientos de distinta intensidad,  $|\alpha| \neq |\beta|$ . Las diferencias y similitudes entre estos grupos se vuelven más claras si se comienza el análisis por el último, que es el más abarcativo, estudiando la forma en que dependen de las constantes  $\alpha/2a\epsilon_0$  y  $\beta/2a\epsilon_0$ , el exponente  $\mu$ , el espectro  $\varepsilon/\epsilon_0$  y magnitudes de interés como los impulsos angulares medios  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle S_z \rangle$ . Los rangos en los que se barrieron estas constantes comprenden el segmento  $|q| \leq 1$  y corresponden por tanto a configuraciones realistas, de acuerdo a lo discutido en §3.2.1.



La dependencia del exponente  $\mu$  (fig. 4.1) muestra que estas configuraciones están casi en su totalidad asociadas a factores escalares pseudoperiódicos  $me_{\mu\pm, m}(\phi; q)$  y a espectros aproximables por la expansión (4.4). Por su parte, los estados **ground** tienen, en un amplio rango de configuraciones  $|q| < 1$ , energías asociadas menores al borde de la banda de conducción ( $\varepsilon = 0$ ) (fig. 4.2). La adición del término de interacción SO modifica entonces los niveles electrónicos de conducción reduciendo en muchos **casos energía** del estado fundamental. Alrededor de  $q \approx 0$ , esto puede intuirse considerando los términos a orden cero en  $q$  de la expansión (4.4) para el caso  $m = 0$  y observando que, de ambos, sólo el término positivo está acotado; esto es,  $\mu^2 \leq 1/4$ .

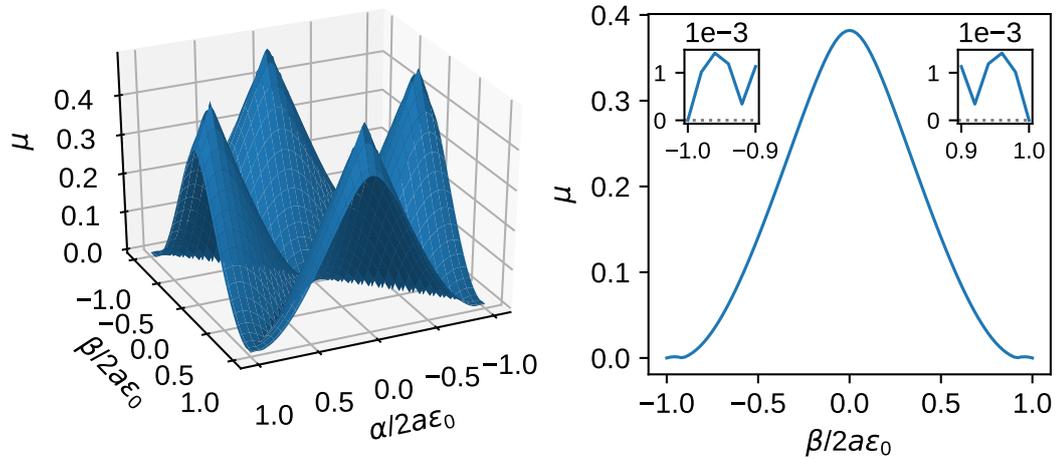


Figura 4.1: Izquierda: dependencia del exponente de Floquet  $\mu$  con las constantes adimensionales  $\alpha/2a\epsilon_0$  y  $\beta/2a\epsilon_0$ . Derecha: corte transversal de la superficie por el plano  $\alpha/2a\epsilon_0 = 1$ . La ampliación de las esquinas superior izquierda y derecha muestra el comportamiento del exponente en la proximidad de los puntos  $|\alpha| = |\beta|$  y, especialmente, que es precisamente en éstos donde se alcanza la raíz  $\mu = 0$ .

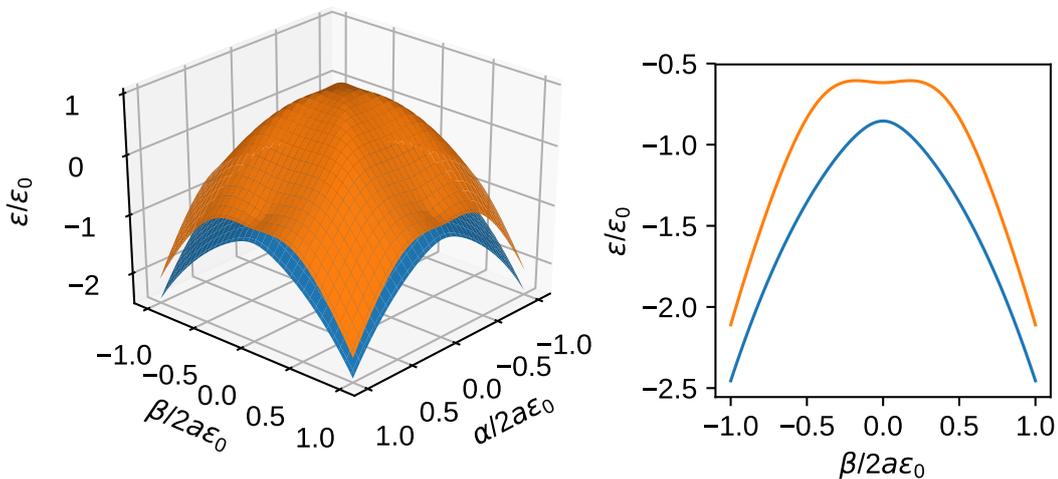


Figura 4.2: Izquierda: energía  $\epsilon/\epsilon_0$  de los estados *ground*  $\Phi_{\mu\pm,0}(\phi; q)$  (azul) y primer excitado  $\Phi_{\mu\pm,1}(\phi; q)$  (naranja) para un conjunto de configuraciones  $|q| \leq 1$ . Derecha: corte transversal de la superficie sobre el plano  $\alpha/2a\epsilon_0 = 1$ .

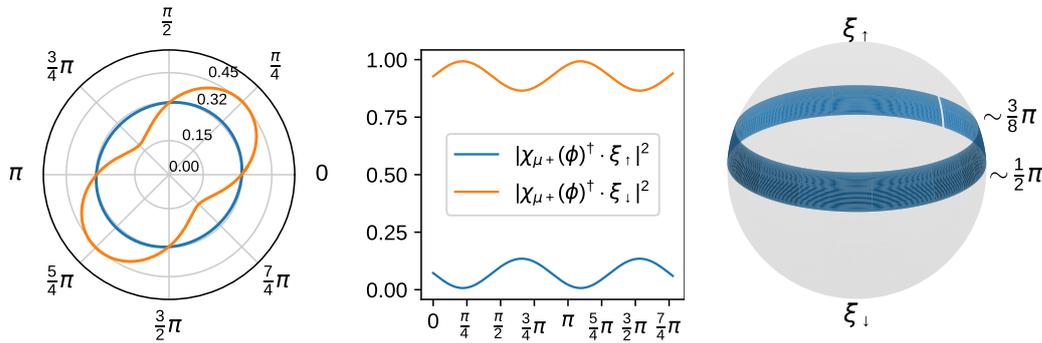


Figura 4.3: Izquierda: densidad de probabilidad de los estados *ground* (azul) y primer excitado (naranja) para un anillo de radio  $a = 200 \text{ \AA}$  y un semiconductor con  $m^* = 0.1m_0$  y constantes  $\alpha/\hbar = 8 \text{ nm ps}^{-1}$  y  $\beta/\hbar = 14 \text{ nm ps}^{-1}$ . Centro: cuadrado de la amplitud de las proyecciones del espinor  $\chi_{\mu+}(\phi)$  sobre los autoestados  $\sigma_z \xi_{\uparrow,\downarrow} = \pm \xi_{\uparrow,\downarrow}$ . Derecha: para la misma configuración de la izquierda, área en la esfera de Bloch que abarca el espinor  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$  al variar su argumento en el intervalo  $0 \leq \phi < 2\pi$ .

Un ejemplo del comportamiento de un estado *ground* se muestra en la fig. 4.3. La densidad de probabilidad (3.31) asociada a este estado es prácticamente uniforme en todo el anillo y difiere notablemente de la asociada al primer excitado para el mismo valor de  $q$ . Ambas características pueden intuirse, como cuando se analizó el espectro, partiendo de la expansión (4.5) y notando que alrededor de  $q \approx 0$  las contribuciones del término lineal en  $q$  a la densidad *van como potencias* del cociente  $q/[(\mu - m)^2 - 1]$  cuyo denominador está acotado en el caso  $m = 0$ . No es pues infundado suponer *que para los estados ground* con estos valores de  $q$  el primer término de (4.5) sea el dominante.

Por otra parte, las características de un factor espinor dado  $\chi_{\mu\pm}(\phi)$  pueden observarse con mayor claridad si se interpreta su imagen como un conjunto de puntos en la esfera de Bloch. Esto puede hacerse reescribiendo el espinor en términos de los ángulos esféricos cenital  $\theta_\pm(\phi)$  y *azimutal*  $\varphi_\pm(\phi)$  como

$$\chi_{\mu\pm}(\phi) = e^{i\vartheta_\pm} \left[ \cos\left(\frac{\theta_\pm}{2}\right) \xi_\uparrow + e^{i\varphi_\pm} \sin\left(\frac{\theta_\pm}{2}\right) \xi_\downarrow \right] \quad (4.6)$$

con  $\sigma_z \xi_{\uparrow,\downarrow} = \pm \xi_{\uparrow,\downarrow}$  y  $\vartheta_\pm$  funciones desconocidas que toman valores reales y definen fases globales. La disposición de estos puntos sobre la superficie de la esfera corresponde en ocasiones a regiones o curvas, y provee en general información sobre cómo varía la

orientación **de** espín a lo largo del anillo. En el ejemplo de la fig. 4.3 el espín  $\chi_{\mu+}(\phi)$  abarca una franja estrecha ( $\Delta\theta_+ \approx \pi/8$ ) que cubre prácticamente todos los meridianos, por lo **que ángulo** cenital  $\theta_+$  depende entonces del punto de observación  $\phi$ . El **hecho de la distribución** se dé en una franja, en lugar de un anillo de  $\theta_+$  constante muestra que la orientación relativa del espín entre puntos de observación distintos no es necesariamente constante; es decir, no es posible generar  $\chi_{\mu+}(\phi)$  rotando en el plano del anillo un espín de orientación fija, a diferencia de lo que sucede en un caso del grupo  $|\alpha| = |\beta|$  (cf. §4.2.1).

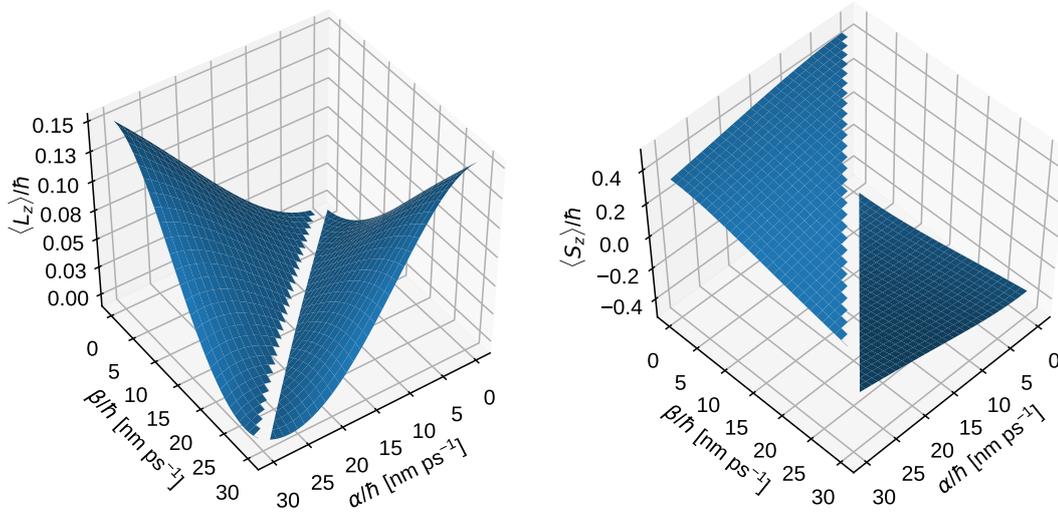


Figura 4.4: Valores medios  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle S_z \rangle$  de las proyecciones del impulso angular orbital  $\mathbf{L}$  (izquierda) y del espín  $\mathbf{S}$  (derecha) sobre el eje perpendicular al anillo para los estados *ground* de un anillo de radio  $a = 200 \text{ \AA}$  con  $m^* = 0.1m_0$  y distintas constantes de acoplamiento  $\alpha/\hbar$  y  $\beta/\hbar$ .

**[Los valores medios]** de los impulsos angulares  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle S_z \rangle$  para un conjunto de casos realistas (fig. 4.4) muestran discontinuidades sobre la recta  $|\alpha| = |\beta|$ . Este aspecto está relacionado al hecho de que no es inmediato tomar el límite  $\mu \rightarrow 0$  que distingue, en ambos factores escalar y espinorial, funciones periódicas de pseudoperiódicas: las funciones de Mathieu de orden no entero  $me_{\mp(\mu-m)}(\phi; q)$  no tienen como límite a las de orden entero  $ce_m(\phi; q)$  y  $se_m(\phi; q)$  cuando  $\mu \rightarrow 0$  [33]; y el comportamiento de los espinores no transiciona suavemente entre un caso y el otro (fig. 4.5, cf. §4.2.1). Esto último puede verse comparando directamente las formas de los autoestados en ambos casos y

notando que en el periódico los espinores pueden combinarse libremente, a diferencia de lo que sucede en el otro caso.

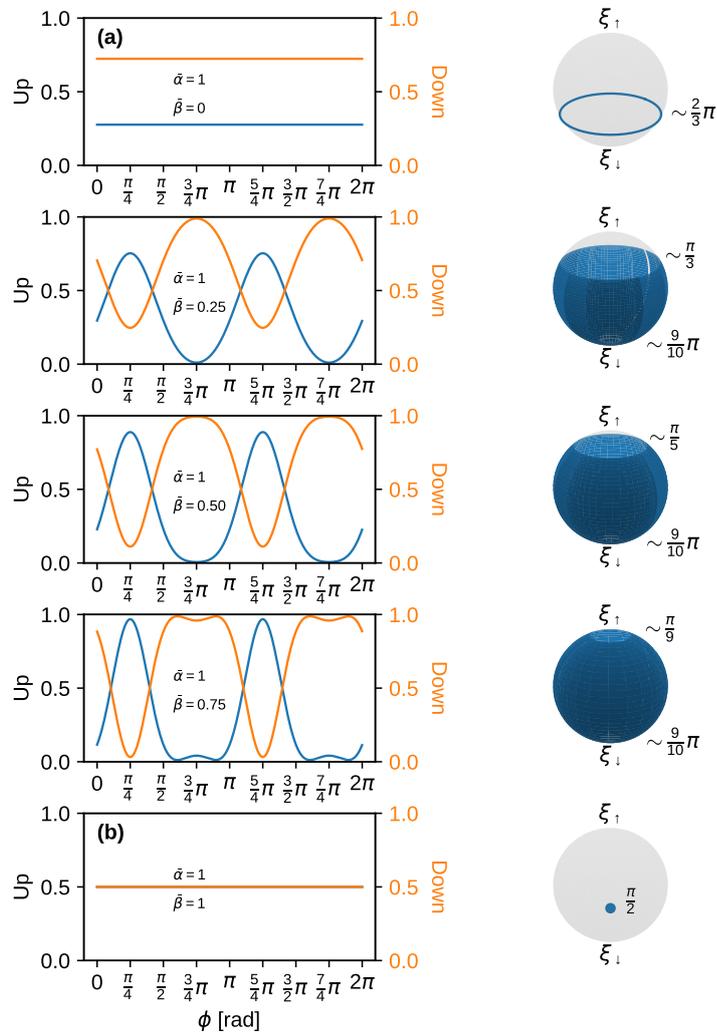


Figura 4.5: Izquierda: amplitud cuadrada de las proyecciones del espinores  $\chi_{\mu+}(\phi)$  sobre los autoestados de  $\sigma_z$  para cuatro combinaciones particulares de las constantes  $\alpha/2a\epsilon_0$  y  $\beta/2a\epsilon_0$ . Derecha: distribución del espinores en la esfera de Bloch. En el caso (a),  $\alpha \neq 0 = \beta$ , la orientación del espín relativa al punto de observación es constante (círculo mayor de  $\theta_+$  constante). En el (b), por el contrario, ésta es constante en todo el anillo (único punto en la esfera).



Tanto en la primera como en la última de las configuraciones de la fig. 4.5, la inclina-

ción del espín respecto del eje perpendicular al anillo es constante [39, 40]. La distinción aparece en la orientación del mismo, pues en la primera ésta depende del punto de observación a través de la fase relativa  $\varphi_+(\phi)$  entre sus componentes; mientras que en la segunda es constante en todo el anillo (e.g., esquema de la fig. 4.6). Estas características son propias de los grupos especiales  $\alpha \neq 0 = \beta$  y  $|\alpha| = |\beta|$  a los cuales pertenecen, respectivamente, estos dos casos.

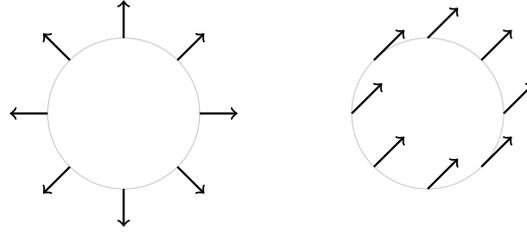


Figura 4.6: Izquierda: orientación dependiente del punto de observación, correspondiente a un círculo mayor  $\theta_+$  constante sobre la esfera de Bloch. Derecha: orientación fija para cualquier punto en el anillo, correspondiente a un punto  $(\theta_+, \varphi_+)$  constante sobre la misma esfera.

Notablemente, los casos para los que se conocen expresiones cerradas de los autoestados corresponden a los extremos  $\beta = 0$  y  $\alpha = 0$ , en los que las magnitudes  $J_z^\pm = L_z \pm S_z$  son respectivamente conservadas (cf. §4.2.1); y  $|\alpha| = |\beta|$ , en el que el espín del electrón adopta una orientación de equilibrio persistente en todo el anillo [23] como sugiere el hecho de que la rotación dada por  $\gamma = \pm\pi/4$  en la construcción (3.24) sea en este caso independiente de  $\phi$ .

### 4.2.1. Interacciones por separado

Los autoestados de  $H_\phi$  en los límites de Rashba ( $\alpha \neq 0 = \beta = \Delta$ ) y Dresselhaus ( $\Delta = \alpha = 0 \neq \beta$ ) pueden obtenerse sin recurrir a la ecuación de autovalores (2.20) y las formas funcionales que éstos adoptan son sumamente similares. El primer aspecto es consecuencia directa de la conservación de las magnitudes respectivas  $J_z^{(\pm)} \doteq L_z \pm S_z$ ; mientras que el segundo puede intuirse observando en estas últimas la semejanza de una respecto de la otra. Ambos pueden deducirse estudiando la acción de los términos de

interacción correspondientes

$$H_{\text{SO}}^{(\text{R})} = \alpha (\partial^+ S^- - \partial^- S^+), \quad (4.7)$$

$$H_{\text{SO}}^{(\text{D})} = -i\beta (\partial^+ S^+ + \partial^- S^-) \quad (4.8)$$

sobre una base de autoestados

$$\mathcal{B} = \{ \eta_{m\sigma}(\phi) \doteq e^{im\phi} \xi_{\sigma} : m \in \mathbb{Z}, \sigma = \pm, \sigma_z \xi_{\pm} = \pm \xi_{\pm} \}. \quad (4.9)$$

comunes a  $J_z^{(+)}$  y al hamiltoniano de la banda, libre de interacciones SO,  $H_0 = -\epsilon_0 \partial_{\phi}^2 = \epsilon_0 L_z^2 / \hbar^2$ , que conforma el término cinético de  $H_{\phi}$  en ambos casos.

A menos de factores constantes —pero en principio dependientes de  $m$  y  $\sigma$ — las interacciones (4.7) y (4.8) traducen estados de  $\mathcal{B}$  en otros del mismo conjunto invirtiendo la proyección de espín y modificando el autoestado de  $L_z$  como

$$\begin{aligned} (\partial^+ S^- - \partial^- S^+) \eta_{m\sigma} &\rightarrow \eta_{(m+\sigma)\bar{\sigma}} \\ (\partial^+ S^+ + \partial^- S^-) \eta_{m\sigma} &\rightarrow \eta_{(m-\sigma)\bar{\sigma}}; \end{aligned} \quad (4.10)$$

con  $\bar{\sigma} = -\sigma$ . De estas relaciones es posible deducir, por un lado, que los números cuánticos de los estados vinculados por las interacciones preservan respectivamente las cantidades  $m \pm \sigma/2$ , que no son sino los autovalores de los mismos asociados a los operadores  $J_z^{(\pm)}/\hbar$ ; y, por otro, que la acción de los operadores (4.10) es en cierto sentido cíclica, pues al actuar sucesivamente al menos dos veces sobre un estado dado ambas producen otro proporcional a éste (i.e., que sólo difiere del original en una constante multiplicativa global). La primera propiedad, de conservación, permite deducir los conmutadores

$$\left[ H_{\text{SO}}^{(\text{R})}, L_z + S_z \right] = \left[ H_{\text{SO}}^{(\text{D})}, L_z - S_z \right] = 0; \quad (4.11)$$

mientras que la segunda permite particionar el espacio de Hilbert total, generado por  $\mathcal{B}$ , en subespacios disjuntos de dos estados que comparten un mismo autovalor  $\hbar(m \pm \sigma/2)$ ,

$$\{ \eta_{m\sigma}, \eta_{(m+\sigma)\bar{\sigma}} \} \text{ y } \{ \eta_{m\sigma}, \eta_{(m-\sigma)\bar{\sigma}} \}, \quad (4.12)$$

respectivamente; y diagonalizar el bloque correspondiente en el hamiltoniano total respectivo.

El procedimiento que sigue, aplicado para hallar los autoestados y las energías, es aplicable a ambos casos por igual. Sin embargo, para simplificar la notación y a fin de

poder contrastar los resultados finales con los existentes en la literatura [39], se considerará, en la descripción del mismo, únicamente el de Rashba ( $\beta = 0$ ).

Por lo discutido, entonces, una solución a la ec. (2.20) en el caso de Rashba puede suponerse de la forma

$$\begin{aligned}\Phi_m(\phi) &= c_{m\sigma}\eta_{m\sigma}(\phi) + c_{(m+\sigma)\bar{\sigma}}\eta_{(m+\sigma)\bar{\sigma}}(\phi); \\ &= e^{im\phi} \left( c_{\sigma}\xi_{\sigma} + c_{\bar{\sigma}}e^{i\sigma m}\xi_{\bar{\sigma}} \right)\end{aligned}\quad (4.13)$$

con  $c_{\sigma}, c_{\bar{\sigma}} \in \mathbb{C}$  constantes apropiadamente normalizadas e independientes del punto de observación  $\phi$ . La forma funcional de la última igualdad es directamente comparable con aquella de la ec. (4.6) y muestra que el estado propuesto recorre en la esfera de Bloch un círculo mayor de ángulo  $\tan \theta = c_{\downarrow}/c_{\uparrow}$  constante, en acuerdo con la configuración (a) en la fig. 4.5.

Por su parte, el autoestado propuesto (4.13), periódico en  $2\pi$ , puede expresarse convenientemente como el producto

$$\Phi_{\mu,m}(\phi) = \left[ e^{i(m-\mu)\phi} \right] \left[ e^{i\mu\phi} \left( c_{\sigma}\xi_{\sigma} + c_{\bar{\sigma}}e^{i\sigma\phi}\xi_{\bar{\sigma}} \right) \right]; \quad (4.14)$$

de una función escalar y un espinor pseudoperiódicos

$$f_{\mu,m}(\phi) = e^{i(m-\mu)\phi}; \quad (4.15)$$

$$\chi_{\mu}(\phi) = e^{i\mu\phi} \left( c_{\sigma}\xi_{\sigma} + c_{\bar{\sigma}}e^{i\sigma\phi}\xi_{\bar{\sigma}} \right); \quad (4.16)$$

con exponente de Floquet  $\mp\mu \in \mathbb{R}$  respectivamente. La función  $f_{\mu,m}(\phi)$  constituye una solución a la ecuación de Mathieu en estas configuraciones  $\alpha \neq 0 = \beta = \Delta$  pues, independientemente del valor que tome  $\alpha$ , el parámetro  $q$  se anula en todas ellas. La dependencia de la solución respecto de  $\alpha$  y  $\epsilon_0$  queda completamente incluida en  $\mu$ , que viene a su vez determinado por el parámetro  $p$ :

$$(m - \mu)^2 = p = \frac{\varepsilon}{\epsilon_0} + \frac{\alpha^2}{4\epsilon_0^2 a^2}. \quad (4.17)$$

El espectro de energías  $\varepsilon/\epsilon_0$  dependerá, al igual que en el caso general, de las condiciones que transformen el espinor (4.16),  $\chi_{\mu}(\phi)$ , en una solución a la ec. (3.4). Si se expresa entonces  $F$  en forma matricial tomando la base de autoestados de  $\sigma_z$ , y se introduce esta propuesta como solución, se obtienen las relaciones

$$\frac{c_{\uparrow}}{c_{\downarrow}} = \frac{\alpha}{2a\epsilon_0\mu} = \frac{2a\epsilon_0(\mu + 1)}{\alpha}; \quad (4.18)$$

que determinan  $\mu$  en términos de  $\epsilon_0$  y  $\alpha$  como

$$\mu_{\pm} = -\frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{a^2 \epsilon_0^2}}. \quad (4.19)$$

Las ecs. (4.18) y (4.19) proveen información suficiente para argüir que las funciones de la factorización (4.14) respetan las propiedades deducidas para aquellas del caso general (cf. §3.2.1). Para llegar a esta conclusión conviene analizar estas ecuaciones por separado. De la segunda puede deducirse, por un lado, que los valores de  $\mu_{\pm}$  son reales cualquiera sea el valor de  $\alpha$ , por lo que los exponentes de Floquet asociados a las soluciones son todos de módulo unitario; **y, por otro, q**ue existen enteros  $n_{\pm} \in \mathbb{Z}$  tales que el sistema

$$\begin{cases} \mu_+ = \tilde{\mu} + n_+ \\ \mu_- = -\tilde{\mu} + n_- \end{cases} \quad (4.20)$$

admite solución, pues  $\mu_+ + \mu_- = -1 \in \mathbb{Z}$ ; por lo que estos multiplicadores pueden escribirse eligiendo como exponentes  $\pm\tilde{\mu}$ , con  $0 \leq \tilde{\mu} \leq 1/2$ , si se eligen, a su vez, los  $n_{\pm}$  de forma que se satisfaga

$$\begin{cases} n_+ + n_- = -1 \\ n_+ - n_- \geq \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\epsilon_0^2 a^2}} - 1. \end{cases} \quad (4.21)$$

Por otro lado, las relaciones en la primera (4.18) no contradicen la hipótesis de que  $c_{\uparrow}$  y  $c_{\downarrow}$  son independientes de  $\phi$ , por lo que no modifican la forma funcional del autoestado propuesto (4.14) agregando en él nuevas dependencias con el punto de observación; y, más aún, determinan el cociente  $c_{\uparrow}/c_{\downarrow}$  en lugar de cada una de ellas individualmente, por lo que no imponen restricciones a la normalización del mismo para ningún  $\alpha$ .

Reemplazando ahora  $\mu_{\pm}$  en la ec. (4.18) y resolviendo para  $\varepsilon/\epsilon_0$  se obtiene el espectro

$$\frac{\varepsilon}{\epsilon_0} = \left(m + \frac{1}{2}\right)^2 \mp \left(m + \frac{1}{2}\right) \sqrt{1 + \frac{\alpha^2}{\epsilon_0^2 a^2}} + \frac{1}{4}. \quad (4.22)$$

Si se definen las constantes  $r_0 \doteq a$  y  $Q_R \doteq 2\alpha/(\hbar r_0)$ , y se identifica  $m = \lambda n$  con  $\lambda = \pm 1$  y  $n \in \mathbb{N}_0$ , la forma (4.22) puede llevarse a la obtenida en la Ref. [39]. Es posible notar, además, a través de la ecuación de Mathieu (4.17) o reemplazando  $\mu_{\pm}$  en la expansión (4.5), que el espectro es constituido por los términos de orden cero en  $q$ .

Aunando entonces la expresión (4.19) hallada para  $\mu_{\pm}$ , las relaciones (4.18) y la condición de normalización sobre los coeficientes  $c_{\uparrow}$  y  $c_{\downarrow}$ , puede escribirse

$$\begin{aligned} c_{\uparrow\pm} &= \frac{1 + \mu_{\pm}}{\bar{\alpha}} c_{\downarrow\pm}; \\ |c_{\downarrow\pm}|^2 &= \frac{\bar{\alpha}^2}{(1 + \mu_{\pm})^2 + \bar{\alpha}^2}; \end{aligned} \quad (4.23)$$

con  $\bar{\alpha} \doteq \alpha/2a\epsilon_0$  y la fase de  $c_{\downarrow}$  elegible, y en especial de forma que ambos coeficientes sean reales, pues así lo son todos los términos en (4.18). A partir de los mismos resultados es posible deducir que los factores espinores (4.16) son ortogonales punto a punto en el anillo, como sucede en el caso general, pues  $\mu_+\mu_- = -\bar{\alpha}^2$  y

$$\chi_{\mu_+}(\phi)^\dagger \chi_{\mu_-}(\phi) = e^{-i(\mu_+ - \mu_-)\phi} c_{\downarrow+}^* c_{\downarrow-} \left( \frac{\bar{\alpha}^2}{\mu_+\mu_-} + 1 \right) = 0. \quad (4.24)$$

Por todo lo anterior, los autoestados finalmente se escriben como

$$\Phi_{\mu_{\pm}, m}(\phi) = e^{im\phi} \left( c_{\uparrow\pm} \xi_{\uparrow} + c_{\downarrow\pm} e^{i\phi} \xi_{\downarrow} \right) = e^{im\phi} c_{\downarrow\pm} \left( \frac{\bar{\alpha}}{\mu_{\pm}} \xi_{\uparrow} + e^{i\phi} \xi_{\downarrow} \right). \quad (4.25)$$

El cálculo de los valores medios  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle S_z \rangle$  en estos casos puede hacerse partiendo directamente de la forma (4.25); y resultan

$$\langle L_z \rangle_{\pm} = \hbar \left( m + |c_{\downarrow\pm}|^2 \right) = \hbar \left( m + \frac{\bar{\alpha}^2}{(1 + \mu_{\pm})^2 + \bar{\alpha}^2} \right); \quad (4.26)$$

$$\langle S_z \rangle_{\pm} = \frac{\hbar}{2} \left( |c_{\uparrow\pm}|^2 - |c_{\downarrow\pm}|^2 \right) = \frac{\hbar \bar{\alpha}^2 (\bar{\alpha}^2 - \mu_{\pm}^2)}{2\mu_{\pm}^2 [(1 + \mu_{\pm})^2 + \bar{\alpha}^2]} \quad (4.27)$$

La figura 4.7 muestra que cuando el acoplamiento es notablemente mayor la energía  $\epsilon_0$  característica de la banda libre,  $\bar{\alpha} \gg 1$ , la diferencia energética entre los estados  $\Phi_{\mu_{\pm}, 0}(\phi)$  tiende a ampliarse y, en cada caso, a concentrarse en el impulso angular orbital  $\langle L_z \rangle$ . Esta propiedad, común a todos los autoestados  $\Phi_{\mu_{\pm}, m}(\phi)$ , puede comprenderse analizando el comportamiento de los coeficientes  $c_{\uparrow, \downarrow}$  y recordando que  $\Phi_{\mu_{\pm}, m}(\phi)$  es una combinación lineal de estados de impulsos angulares  $L_z$  y  $S_z$  determinados. La contribución de estos últimos a los promedios ponderados  $\langle L_z \rangle_{\pm}$  y  $\langle S_z \rangle_{\pm}$  tiende entonces a equipararse en el límite  $\bar{\alpha} \gg 1$  (i.e.,  $|c_{\uparrow\pm}|/|c_{\downarrow\pm}| \rightarrow 1$ ) y, por tanto, el espín a alinearse en una dirección paralela al plano del anillo para todo punto de observación  $\phi$  (ver fig.

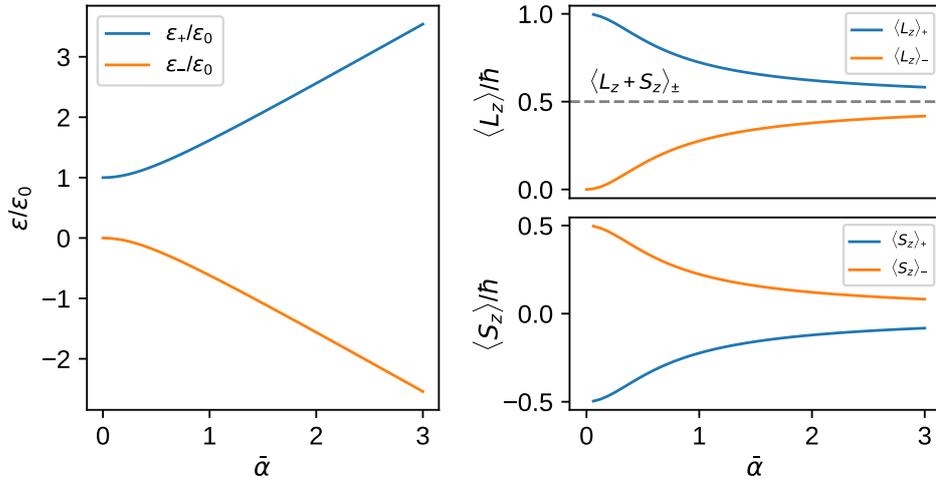


Figura 4.7: Izquierda: energías  $\epsilon_\pm/\epsilon_0$ , calculadas sobre los estados con  $m = 0$ ,  $\Phi_{\mu_\pm,0}(\phi)$ , para distintos valores del parámetro adimensional  $\bar{\alpha} = \alpha/2a\epsilon_0$ . Derecha: valores medios de los impulsos angulares  $L_z$  y  $S_z$  para el mismo estado y conjunto de valores  $\bar{\alpha}$ . El impulso angular total  $\langle L_z + S_z \rangle$ , al que converge el orbital conforme crece  $\bar{\alpha}$ , se marca en línea de guiones.

4.6 izquierda). Esta dirección es, en valor medio, perpendicular en todo punto al impulso cristalino  $\mathbf{k}$ , que es tangencial al borde del anillo; o, más precisamente, en el límite  $\bar{\alpha} \rightarrow +\infty$

$$\langle \mathbf{S} \rangle_\pm = \pm \frac{\hbar}{2} (\cos(\phi)\hat{x} + \text{sen}(\phi)\hat{y}) \quad (4.28)$$

La interacción de Rashba en anillos delgados tiende, entonces, a alienar el espín en dirección perpendicular al impulso cristalino, en acuerdo con la interpretación geométrica del término  $H_{\text{SO}}^{(\text{R})}$  que la describe.

Un análisis similar puede hacerse en el caso de Dresselhaus  $\alpha = 0 \neq \beta$ . En éste, los autoestados

$$\Phi_{\mu_\pm, m} = e^{im\phi} (c_{\uparrow\pm}\xi_\uparrow + c_{\downarrow\pm}e^{-i\phi}\xi_\downarrow); \quad (4.29)$$

también son ortogonales punto a punto y los coeficientes  $c_{\uparrow, \downarrow}$  guardan las relaciones

$$\begin{cases} \frac{c_\uparrow}{c_\downarrow} = \frac{\bar{\beta}}{i\mu_\pm} = \frac{1 - \mu_\pm}{i\bar{\beta}}; \\ |c_{\downarrow\pm}|^2 = \frac{\bar{\beta}^2}{(1 - \mu_\pm)^2 + \bar{\beta}^2} \end{cases} \quad (4.30)$$

donde  $\bar{\beta} \doteq \beta/2a\epsilon_0$  y los exponentes

$$\mu_{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{a^2 \epsilon_0^2}}. \quad (4.31)$$

Al igual que en el caso de Rashba, la contribución independiente de los autoestados de  $J_z^{(+)}$ , que conforman los  $\Phi_{\mu_{\pm}, m}(\phi)$ , a los promedios ponderados  $\langle L_z \rangle$  y  $\langle S_z \rangle$  tiende a equipararse en el límite  $\beta \gg 1$  pues  $c_{\uparrow\pm}/c_{\downarrow\pm} \rightarrow \mp i$ . Puesto que en particular la forma funcional de  $\langle S_z \rangle$  en términos de los coeficientes es idéntica a la del caso de Rashba (4.27), es posible deducir que también en este caso el espín tenderá a doptar una dirección paralela al plano cuando la interacción SO sea suficientemente intensa. Sin embargo, en el límite  $\bar{\beta} \rightarrow +\infty$ , esta dirección ya no siempre es perpendicular al impulso cristalino  $\mathbf{k}$ , pues

$$\langle \mathbf{S} \rangle_{\pm} = \pm \frac{\hbar}{2} (\sin(\phi)\hat{x} + \cos(\phi)\hat{y}). \quad (4.32)$$

Finalmente, no hay que perder de vista que la validez de las condiciones  $\bar{\alpha}, \bar{\beta} \gg 1$  — y por tanto de los análisis anteriores— están restringidas por las hipótesis que posibilitan tratar el problema dentro de la aproximación de masa efectiva.

#### 4.2.2. Configuración de banda libre

Los límites  $\bar{\alpha}, \bar{\beta} \rightarrow 0$  también son de interés pues ambos corresponden al hamiltoniano  $H_0$  de la banda libre de toda interacción SO

$$H_0 = -\epsilon_0 \partial_{\phi}^2 = \frac{\epsilon_0}{\hbar^2} L_z^2. \quad (4.33)$$

Los autoestados de este hamiltoniano pueden construirse también como productos de funciones escalares periódicas, los autoestados de  $L_z$ :  $\{e^{im\phi}\}_{m \in \mathbb{Z}}$ ; y espinores constantes, que en particular son periódicos. **Este último aspecto, de acuerdo a lo discutido en §3.2.1** es el que torna difícil tomar cualquiera de ambos límites directamente de los  $\Phi_{\mu_{\pm}, m}(\phi; q)$ . Sin embargo, es posible deducir que el espectro (4.17), tiende al propio de  $H_0$ ,  $\varepsilon = \epsilon_0 m^2$  pues en ambos límites  $\mu_{\pm} \in \mathbb{Z}$  y por tanto

$$\frac{\varepsilon_{\pm}}{\epsilon_0} = (m - \mu_{\pm})^2 = \tilde{m}^2 \quad (4.34)$$

con  $\tilde{m} \in \mathbb{Z}$ . Esto mismo puede observarse en la fig. 4.7 izquierda.

### 4.2.3. Configuración $|\alpha| = |\beta|$

Para los dos casos comprendidos por la condición  $|\alpha| = |\beta|$ , es sabido que las magnitudes  $\sigma_x \pm \sigma_y$  respectivas son conservadas y se asocian a una orientación de equilibrio del espín en cualquier geometría plana [23]. Esto puede deducirse directamente de las expresiones generales para los hamiltonianos de interacción (2.7) y (2.8); o **concluirse** estudiando las formas que adopta el operador  $F$  en los casos  $\alpha = \pm\beta$ :

$$\begin{aligned} F_{\pm} &= i \frac{|\alpha|}{2a} \left[ e^{i\phi}(1 \mp i) + e^{-i\phi}(1 \pm i) \right] (\sigma_x \pm \sigma_y) \\ &= i \frac{\sqrt{2}|\alpha|}{a} \cos\left(\phi \mp \frac{\pi}{4}\right) (\sigma_x \pm \sigma_y). \end{aligned} \quad (4.35)$$

De la relación de proporcionalidad  $F_{\pm} \propto \sigma_x \pm \sigma_y$  **punto a punto** es posible deducir, en ambos casos, que los autovectores de  $F$  no dependen del punto de observación  $\phi$ . Esta propiedad permite transformar la ec. (3.4) en una ecuación escalar integrable si se proponen soluciones  $\chi(\phi)$  a la misma conformadas por productos entre una función escalar  $g(\phi)$ , que toma valores en  $\mathbb{C}$ ; y un autovector  $\tilde{\chi}_{s\pm}$  de  $\sigma_x \pm \sigma_y$

$$\tilde{\chi}_{s\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \xi_{\uparrow} + s e^{\pm i\pi/4} \xi_{\downarrow} \right), \quad (4.36)$$

siendo  $\sigma_z \xi_{\uparrow, \downarrow} = \pm \xi_{\uparrow, \downarrow}$ , y  $s = \pm$  el índice que distingue los autovectores del par correspondiente a cada caso. Insertando entonces una propuesta de la forma

$$\chi_{s\pm}(\phi) = g_{s\pm}(\phi) \tilde{\chi}_{s\pm} \quad (4.37)$$

en (3.4) se obtiene la ecuación equivalente

$$\frac{dg_{s\pm}}{d\phi} = i s \frac{2|\alpha|}{a\epsilon_0} \cos\left(\phi \mp \frac{\pi}{4}\right) g_{s\pm}; \quad (4.38)$$

que admite como soluciones

$$g_{s\pm}(\phi) = \exp \left[ i s \frac{2|\alpha|}{a\epsilon_0} \sin\left(\phi \mp \frac{\pi}{4}\right) \right] = \exp \left[ i s \frac{\sqrt{2}|\alpha|}{a\epsilon_0} (y \mp x) \right]; \quad (4.39)$$

siendo la última igualdad consecuencia de la identificación  $x + iy = e^{i\phi}$  punto a punto. Este resultado concide, quizá excepto en la definición de  $\alpha$ , con el conocido en la literatura [23].

El hecho de que la dependencia respecto del punto de observación esté concentrada en un factor escalar común a ambas componentes de  $\chi_{s\pm}(\phi)$  permite observar que la orientación de estos espinores es efectivamente constante y, por tanto, concluir que su distribución en la esfera de Bloch es asociable a un único punto, en acuerdo con el caso (b) en la fig. 4.5. Por otra parte, las funciones  $g_{s\pm}(\phi)$  son periódicas en  $2\pi$  tanto como lo son los espinores  $\tilde{\chi}_{s\pm}$ . Una solución a (3.4) formada por el producto entre ambos tiene entonces la misma propiedad, por lo que su exponente de Floquet asociado es  $\mu = 0$ . Esto permite obtener los autoestados completos de  $H_\phi$  en cada caso  $\alpha = \pm\beta$  pues, de acuerdo con lo discutido en el caso general (cf. §3.2.1), las funciones de Mathieu asociada a éstos para el caso periódico son aquellas de orden entero  $ce_m(\phi; q)$  y  $se_m(\phi; q)$ .

Finalmente, aunando los resultados de las ecs. (4.36) y (4.39) a las discusiones anteriores, se obtienen

$$\Phi_{s\pm, m}(\phi; q) = \frac{1}{\sqrt{2}} f_m(\phi; q) \exp \left[ i s \frac{2|\alpha|}{a\epsilon_0} \sin \left( \phi \mp \frac{\pi}{4} \right) \right] \left( \xi_\uparrow + s e^{\pm i\pi/4} \xi_\downarrow \right); \quad (4.40)$$

donde  $f_m(\phi; q)$  es  $ce_m(\phi; q)$  o  $se_m(\phi; q)$ .

El valor medio  $\langle \mathbf{S} \rangle$  tomado sobre los autoestados (4.40) puede calcularse directamente a partir de sus expresiones y resulta:

$$\langle \mathbf{S} \rangle_{s\pm} = \pm \frac{\hbar s}{\sqrt{2}} (\hat{x} + \hat{y}). \quad (4.41)$$

Por su parte, el impulso angular orbital perpendicular al anillo  $\langle L_z \rangle$  depende tanto de la fase del espinor  $\chi_{s\pm}(\phi)$  como de la función de Mathieu, como muestra la fig. 4.8 para el estado  $\Phi_{s\pm, 0}(\phi; q)$ .

La condición  $|\alpha| = |\beta|$  también abarca el caso en el que ambas constantes se anulan y el hamiltoniano queda reducido al de la banda libre  $H_0$ . En este límite,  $|\alpha| \rightarrow 0$ , puede verse que los espinores  $\chi_{s\pm}(\phi)$  adoptan formas funcionales totalmente independientes del punto de observación, en acuerdo con el hecho de que en  $H_0$  no interviene el espín. Asimismo, como se mencionó en §4.2.1, es posible mostrar que las funciones de Mathieu de orden entero  $f_m(\phi)$  tienden a la forma  $e^{im\phi}$ , que es aquella de los autoestados periódicos de  $L_z$ . Esto mismo puede intuírse en la fig. 4.8 observando que  $\langle L_z \rangle_{s\pm} \rightarrow 0 = \hbar m$  y  $\epsilon/\epsilon_0 \rightarrow 0 = m^2$ , independientemente de los índices  $s\pm$ .

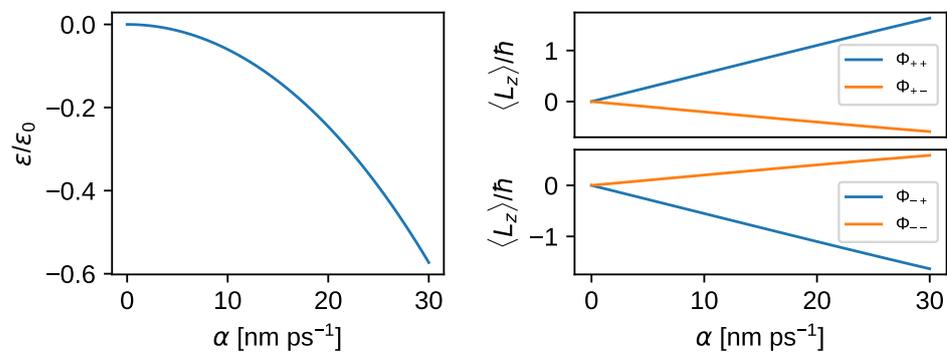


Figura 4.8: Izquierda: energía de los estados *ground* ( $m = 0$ ) para un conjunto de configuraciones realistas con  $a = 200 \text{ \AA}$  y  $m^* = 0.1m_0$ . Derecha: valores medios de  $\langle L_z \rangle$  tomados sobre los estados  $\Phi_{s\pm,0}(\phi; q)$ .



## Conclusiones

Se aproximó el hamiltoniano bidimensional de un anillo cuántico semiconductor a uno unidimensional y se encontró una factorización que permite separar la ecuación de autovalores (2.20) en una ecuación escalar y otra para la parte de espinor. Las expresiones halladas dependen paramétricamente de las constantes del problema pero toman formas similares en todos los casos. Para configuraciones próximas a situaciones encontradas en el laboratorio, se observa que las correcciones introducidas por el acoplamiento a la banda de conducción son pequeñas comparadas con la separación entre estados de la misma  $\epsilon_0$ , por lo que la interacción puede, en varios casos, tratarse perturbativamente.

Por otra parte, en algunos casos resolubles de forma analítica y cerrada, se observa que las soluciones coinciden con las conocidas. Al considerar únicamente los de Rashba y Dresselhaus, se observa que la presencia simultánea de ambos impide al espín orientarse de forma absoluta o relativa a los puntos del anillo; salvo cuando éstas son de igual intensidad, para la que existe una orientación de equilibrio.



## Apéndice

El siguiente es un breve compendio de propiedades vinculadas a la **ortogonormalidad** de las funciones de Mathieu de orden entero y fraccionario. Las demostraciones y derivaciones detalladas pueden encontrarse en la literatura específica [31-33] y en las referencias allí contenidas.

Es posible mostrar que, cuando  $\phi, q \in \mathbb{R}$  y  $m \in \mathbb{N}_0$ , las funciones de Mathieu de orden entero  $m$  pares  $ce_m(\phi; q)$  ( $m \geq 0$ ) e impares  $se_m(\phi; q)$  ( $m > 0$ ) respecto de  $\phi$ , son reales y satisfacen

$$\int_0^{2\pi} ce_m(\phi; q) ce_n(\phi; q) d\phi = \pi \delta_{nm} \quad (\text{A.1})$$

$$\int_0^{2\pi} se_m(\phi; q) se_n(\phi; q) d\phi = \pi \delta_{nm} \quad (\text{A.2})$$

$$\int_0^{2\pi} ce_m(\phi; q) se_n(\phi; q) d\phi = 0; \quad (\text{A.3})$$

donde  $\delta_{mn}$  es la delta de Kronecker.

Por otra parte, es sabido que cuando  $\phi, \nu, q \in \mathbb{R}$ , las funciones de Mathieu de orden no entero  $me_\nu(\phi; q)$  satisfacen

$$me_\nu(\phi; q)^* = me_\nu(-\phi; q), \quad (\text{A.4})$$

$$me_\nu(\phi + \pi; q) = e^{i\nu\pi} me_\nu(\phi; q); \quad (\text{A.5})$$

y son ortogonales en el sentido de que

$$\int_0^\pi me_{\nu+2n}(-\phi; q) me_{\nu+2m}(\phi; q) d\phi = \pi \delta_{nm}; \quad (\text{A.6})$$

con  $m, n \in \mathbb{Z}$ . Estas relaciones, junto a las propiedades (A.4) y (A.5), pueden aplicarse para expandir cualquier función  $f_\nu(\phi)$  bien comportada y que satisfaga  $f_\nu(\phi + \pi) = e^{i\nu\pi} f_\nu(\phi)$ , como serie en términos de las funciones de las  $\text{me}_\nu(\phi; q)$ .

Si se recurre a las series de Fourier de las  $\text{me}_\nu(\phi; q)$ , se tienen en cuenta las propiedades de convergencia de éstas [33] y se observa que la propiedad (A.5) implica la igualdad

$$\text{me}_\nu(\phi + 2\pi; q) = e^{2\pi i\nu} \text{me}_\nu(\phi; q); \quad (\text{A.7})$$

es posible deducir que la extensión del intervalo abarcado por  $\phi$  a todo el anillo (i.e.,  $0 \leq \phi \leq 2\pi$ ) modifica las relaciones (A.6) como

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

Si se consideran entonces estas últimas junto a la propiedad (A.4), es **posible** interpretar, en el caso  $n = m$ , el integrando como una densidad de probabilidad:

$$\text{me}_{\nu+m}(-\phi; q) \text{me}_{\nu+m}(\phi; q) = \text{me}_{\nu+m}(\phi; q)^* \text{me}_{\nu+m}(\phi; q) = |\text{me}_{\nu+m}(\phi; q)|^2. \quad (\text{A.9})$$

## Bibliografía

- [1] R. Eisberg, *Fundamentals of modern physics*, 1.<sup>a</sup> ed. (John Wiley & Sons, Inc., 1961).
- [2] G. E. Uhlenbeck y S. Goudsmith, *Nature* **117**, 264 (1926).
- [3] A. H. Compton, *Journal of the Franklin Institute* **192**, 145 (1921).
- [4] L. H. Thomas, *Nature* **117**, 514 (1926).
- [5] J. D. Jackson, *Classical electrodynamics*, 3.<sup>a</sup> ed. (John Wiley & Sons, Inc., 1999).
- [6] A. Pais, *Niels Bohr's times* (Clarendon Press, 1991).
- [7] A. L. Parson, *Smithsonian Misc. Collections* **65** (1915).
- [8] D. Griffiths, *Introduction to elementary particles*, 2.<sup>a</sup> ed. (John Wiley & Sons, Inc., 2008).
- [9] 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).
- [10] P. Yu y M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors*, 4.<sup>a</sup> ed., Graduate Texts in Physics (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2010).
- [11] H. Ibach y H. Lüth, *Solid-state physics*, 4.<sup>a</sup> ed., Advanced Texts in Physics (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009).
- [12] N. Ashcroft y N. Mermin, *Solid-state physics* (Harcourt College Publishers, 1976).
- [13] J. Gou, B. Xia, H. Li, X. Wang, L. Kong, P. Cheng, H. Li, W. Zhang, T. Qian, H. Ding, Y. Xu, W. Duan, K. Wu y L. Chen, *Phys. Rev. Lett.* **121**, 126801 (2018).
- [14] P. R. Wallace, *Phys. Rev.* **71**, 622 (1947).

- [15] A. K. Geim y K. S. Novoselov, *Nature Materials* **6**, 183 (2007).
- [16] A. Szabo y N. Ostlund, *Modern quantum chemistry* (Dover Publications, Inc., 1989).
- [17] M. Le Bellac, F. Mortessagne y G. G. Batrouni, *Equilibrium and non-equilibrium statistical thermodynamics* (Cambridge University Press, 2004).
- [18] M. Dyakonov, ed., *Spin physics in semiconductors*, 1.<sup>a</sup> ed., vol. 157, Springer Series in Solid-State Sciences (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008), pág. 442.
- [19] Y. Bychkov y É. Rashba, *Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters* **39**, 78 (1984).
- [20] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
- [21] A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov y R. A. Duine, *Nature Materials* **14**, 871 (2015).
- [22] C. L. Romano, S. E. Ulloa y P. I. Tamborenea, *Phys. Rev. B* **71**, 035336 (2005).
- [23] J. Schliemann, J. C. Egues y D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
- [24] M. Cygorek, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **92**, 115301 (2015).
- [25] S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss y W. Prettl, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601 (2004).
- [26] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo y T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **66**, 033107 (2002).
- [27] J. J. Sakurai y J. Napolitano, *Modern quantum mechanics*, 2.<sup>a</sup> ed. (Addison-Wesley, 2011).
- [28] S. R. Barone, M. A. Narcowich y F. J. Narcowich, *Phys. Rev. A* **15**, 1109 (1977).
- [29] C. Chicone, *Ordinary differential equations with applications*, 2.<sup>a</sup> ed., vol. 34, Texts in Applied Mathematics (Springer-Verlag New York, 2006).
- [30] J. E. Bayfield, *Quantum evolution, An introduction to time-dependent quantum mechanics* (John Wiley & Sons, 1999).
- [31] N. McLachlan, *Theory and application of Mathieu functions*, 1.<sup>a</sup> ed. (Clarendon, 1951).

- [32] 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).
- [33] G. Wolf, en *NIST handbook of mathematical functions*, ed. por F. Olver, D. Lozier, R. Boisvert y C. Clark (Cambridge University Press, 2010).
- [34] T. Tamir y H. Wang, *J. Res. Natl. Inst. Stan.* **69B**, 101 (1965).
- [35] V. Fomin, ed., *Physics of quantum rings*, NanoScience and Technology (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2014).
- [36] T. Pearsall, *GaInAsP alloy semiconductors* (John Wiley & Sons, 1982).
- [37] *Semiconductors*, <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/>.
- [38] F. Ungar, M. Cygorek, P. I. Tamborenea y V. M. Axt, *Phys. Rev. B* **91**, 195201 (2015).
- [39] D. Frustaglia y K. Richter, *Phys. Rev. B* **69**, 235310 (2004).
- [40] F. Nagasawa, D. Frustaglia, H. Saarikoski, K. Richter y J. Nitta, *Nature Communications* **4**, 2526 (2013).