

Centro de Investigación Científica y de Educación  
Superior de Ensenada, Baja California



---

Programa de Posgrado en Ciencias en  
Física de Materiales

---

Efectos termoespintrónicos en heteroestructuras  
semiconductoras con interacción espín-órbita

Tesis

para cubrir parcialmente los requisitos necesarios para obtener el grado de  
Doctor en Ciencias

Presenta:

**Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez**

Ensenada, Baja California, México

2016

Tesis defendida por

**Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez**

y aprobada por el siguiente comité

---

**Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova**  
Director de comité

**Dr. Ernesto Cota Araiza**

**Dr. Manuel Herrera Zaldívar**

**Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar**



---

**Dr. Leonel Susano Cota Araiza**  
Coordinador del Programa de Posgrado en Física de Materiales

---

**Dra. Rufina Hernández Martínez**  
Directora de Estudios de Posgrado

Resumen de la tesis que presenta **Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez** como requisito parcial para la obtención del grado de Doctor en Ciencias en Física de Materiales.

## **Efectos termoespintrónicos en heteroestructuras semiconductoras con interacción espín-órbita**

Resumen aprobado por:

---

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Director de tesis

La interacción espín-órbita (IEO) presente en sistemas electrónicos de baja dimensionalidad, proporciona una vía de acceso a los estados de espín mediante mecanismos magnéticos, ópticos, eléctricos y recientemente térmicos. En esta clase de sistemas la IEO se traduce a un campo magnético efectivo, llamado campo espín-órbita, que depende del momento del electrón. Algunos de los principales fenómenos espintrónicos son el efecto Hall de espín (SHE), consistente en la generación de una corriente transversal de espín, y la polarización de espín como respuesta a una corriente eléctrica, ambos fenómenos inducidos por el campo espín-órbita, sin que se requieran campos magnéticos externos o materiales magnéticos. En esta tesis investigamos sus análogos térmicos, es decir, un SHE y una polarización de espín como respuesta a un gradiente de temperatura pero a través del efecto termoelectrico. Consideramos el efecto conjunto de la IEO tipo Rashba y tipo Dresselhaus que introduce un desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín. Dicha anisotropía da lugar a características espectrales muy diferentes de las correspondientes a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico (sólo Rashba o Dresselhaus). Utilizamos el formalismo de la teoría cuántica de la respuesta lineal para calcular los coeficientes fenomenológicos en respuesta lineal a un gradiente de temperatura y un campo eléctrico que oscilan a una frecuencia dada. En particular, calculamos las conductividades de espín, eléctrica, termoelectrica, los coeficientes Seebeck y Seebeck de espín, así como la polarizabilidad de espín en el régimen dinámico. Consideramos los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras semiconductoras con estructura cristalina tipo zincblenda, orientados en las direcciones cristalográficas [001], [110] y [111]. Se obtuvieron fórmulas que establecen una relación entre la corriente eléctrica, la corriente de espín y la orientación de espín como respuesta a un gradiente de temperatura, válidas estrictamente para IEO lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$ . A través de dichas conexiones, se demostró la anulación del fenómeno de la orientación de espín y del SHE inducidos por un gradiente de temperatura vía el efecto termoelectrico. Este resultado refuta la predicción reportada por Z. Ma (2010), único trabajo sobre el tema y que además sólo considera el acoplamiento Rashba. No obstante, al considerar la contribución cúbica en  $\mathbf{k}$  del acoplamiento Dresselhaus se obtiene que la corriente de espín inducida por un gradiente de temperatura no se anula. En general, los resultados sugieren la posibilidad de acceder al grado de libertad del espín a través de distintos mecanismos, tales como la variación de la frecuencia de la perturbación eléctrica o térmica aplicada, además de la modulabilidad de los parámetros de acoplamiento.

**Palabras clave:** interacción espín-órbita, heteroestructura semiconductor, termocorriente de espín, espintrónica, termoespintrónica.

Abstract of the thesis presented by **Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez** as a partial requirement to obtain the Doctor of Science degree in Materials Physics.

## **Thermospintronics effects in semiconductor heterostructures with spin-orbit interaction**

Abstract approved by:

---

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Thesis director

The spin-orbit interaction (SOI) in low dimensional electronic systems, provides a mechanism to access the spin states through magnetic, optical, electrical and thermal means. In this class of systems, the SOI acts as an effective magnetic field, called spin-orbit field, which depends on the electron momentum. Among the spintronics effects, the most remarkable examples are the spin Hall effect (SHE) and the current-induced spin polarization, where an electric current can induce a transverse spin current and a nonequilibrium spin accumulation across the sample, without external magnetic fields or magnetic materials are required. In this thesis we investigated the thermal analogue, i.e., a SHE and spin polarization in response to a temperature gradient via the thermoelectric effect. We taking into account the simultaneous presence of the Rashba and Dresselhaus SOI, the interplay between these couplings give rise to an anisotropic spin splitting of the electron states. The anisotropic spin splitting caused by the combined SOI give rise to characteristic spectral features that are significantly different from that of an isotropic SOI case (only Rashba or Dresselhaus). We use the linear response theory to calculate the phenomenological transport coefficient in linear response to frequency-dependent in-plane electric field and temperature gradient. In particular, we calculate the charge, thermoelectric and spin conductivities, and the Seebeck and spin Seebeck coefficients in the dynamical regime. We consider the cases of quantum wells formed in semiconductor heterostructures with zincblende type crystalline structure oriented in the crystallographic directions [001], [110] and [111]. We derived connection formulas relating the electrically and thermally driven spin and charge conductivities, characteristic of the linear in  $\mathbf{k}$  SOI, which lead to a connection between the charge and spin currents and the spin orientation. Based on this connections, it is shown that the spin orientation and the SHE generated by the temperature gradient vanish exactly. This result refutes the predicted nonvanishing effect for the pure Rashba case (Ma, 2010). However, a non-null thermospin current response in the presence of cubic Dresselhaus terms is obtained, in contrast to the purely linear SOI. In general, the results suggest the possibility to access the spin degree of freedom via thermal and electrical means, in addition to the tuning of coupling parameters.

**Keywords:** spin-orbit interaction, semiconductor heterostructure, thermospin current, spintronics, thermospintronics.

## Dedicatoria

*A Rubén*

## Agradecimientos

Deseo expresar mi gratitud a mi asesor Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova por su tiempo y su invaluable ayuda para la realización de este arduo proyecto.

A los miembros de mi comité de tesis Dr. Ernesto Cota Araiza, Dr. Manuel Herrera Zaldívar y Dr. Jorge Alberto Villavicencio Aguilar les agradezco su apoyo y sus valiosas contribuciones a esta tesis.

A la Dra. Catalina López Bastidas por las facilidades de cómputo brindadas para la realización de cálculos científicos.

A todo el personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la Universidad Autónoma de México por su apoyo en mi formación académica, en especial al técnico académico Aldo Rodríguez Guerrero.

Al Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada y al Posgrado en Física de Materiales por brindarme la oportunidad de realizar mis estudios de doctorado, así como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por brindarme el apoyo económico para la realización de este proyecto.

Agradezco a mi familia y amigos porque siempre me han brindado la compañía y todo el apoyo que me ha impulsado para cumplir mis metas. De manera muy especial a Rubén por acompañarme en todo este proceso y en los que faltan.

# Tabla de contenido

		Página
	<b>Resumen en español</b>	<b>ii</b>
	<b>Resumen en inglés</b>	<b>iv</b>
	<b>Dedicatoria</b>	<b>v</b>
	<b>Agradecimientos</b>	<b>vi</b>
	<b>Lista de figuras</b>	<b>ix</b>
<b>1</b>	<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Efectos termoespintrónicos</b>	<b>7</b>
	2.1 Efecto Hall de espín . . . . .	7
	2.2 Orientación de espín inducida por un campo eléctrico . . . . .	11
	2.3 Efecto Hall de espín inducido térmicamente . . . . .	14
	2.4 Efecto Seebeck . . . . .	15
	2.5 Efecto Seebeck de espín . . . . .	16
<b>3</b>	<b>Interacción espín-órbita en semiconductores</b>	<b>21</b>
	3.1 Interacción espín-órbita en pozos cuánticos . . . . .	21
	3.2 Hamiltoniano de interacción espín-órbita . . . . .	24
	3.3 Acoplamiento espín-órbita lineal . . . . .	28
	3.3.1 Rashba+Dresselhaus[001] . . . . .	30
	3.3.2 Rashba+Dresselhaus[110] . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Respuesta lineal a campos eléctricos y gradientes de temperatura</b>	<b>37</b>
	4.1 Teoría fenomenológica de transporte . . . . .	37
	4.2 Coeficientes termoespintrónicos en el formalismo de Kubo . . . . .	39
	4.2.1 Hamiltoniano de interacción . . . . .	41
	4.2.2 Coeficientes fenomenológicos lineales . . . . .	44
	4.3 Conductividad de carga eléctrica . . . . .	46
	4.4 Transiciones entre sub-bandas de espín . . . . .	48
	4.4.1 Acoplamiento isotrópico: Rashba . . . . .	51
	4.4.2 Acoplamiento anisotrópico: R+D[001] . . . . .	53
	4.4.3 Acoplamiento anisotrópico: R+D[110] . . . . .	57
	4.5 Dependencia de la temperatura de los coeficientes fenomenológicos . . . . .	60
	4.6 Resumen de resultados . . . . .	64
<b>5</b>	<b>Efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico</b>	<b>65</b>
	5.1 Termocorriente Hall de espín . . . . .	65
	5.2 Conexiones entre los coeficientes termoespintrónicos . . . . .	67
	5.3 Cancelación de la termoconductividad de espín . . . . .	72
	5.3.1 Acoplamiento isotrópico . . . . .	72
	5.3.2 Acoplamiento R+D[001] . . . . .	76
	5.3.3 Acoplamiento R+D[110] . . . . .	76
	5.4 Resumen de resultados . . . . .	78

## Tabla de contenido (continuación)

<b>6</b>	<b>Contribución espín-órbita cúbica a los fenómenos termoespintrónicos</b>	<b>80</b>
6.1	Interacción espín-órbita cúbica en $\mathbf{k}$ . . . . .	81
6.2	Termoconductividad Hall de espín . . . . .	85
6.3	Resumen de resultados . . . . .	87
<b>7</b>	<b>Polarización de espín inducida por un gradiente de temperatura</b>	<b>89</b>
7.1	Polarizabilidad de espín . . . . .	89
7.2	Relaciones entre la polarizabilidad y la conductividad de espín . . . . .	92
7.3	Cancelación de la polarización de espín . . . . .	93
7.4	Resumen de resultados . . . . .	94
<b>8</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>95</b>
	<b>Lista de referencias bibliográficas</b>	<b>98</b>

## Lista de figuras

Figura		Página
1	Ilustración esquemática de los efectos (a) Hall, (b) Hall de espín, (c) Nernst y (d) Nernst de espín. Aquí $\mathbf{B}$ respresenta un campo magnético externo y $\mathbf{B}_{eff}$ un campo magnético efectivo asociado a la interacción espín-órbita. . . . .	8
2	Observación experimental del efecto Hall de espín. (a) Detección óptica de la densidad de espín $n_s$ de una película delgada de GaAs. Se observa que la orientación de espín tiene signos opuestos en los bordes de la muestra. (b) Medición de la reflectividad $R$ , se muestran los bordes en la muestra en color negro, así como la alta reflectividad de los contactos metálicos en color dorado. (Kato et al., 2004b). . . . .	9
3	Parte real del tensor de la conductividad Hall de espín $\text{Re}\Sigma_{ij}^z$ como función de la frecuencia $\omega$ del campo eléctrico, para distintos valores de los parámetros de Rashba $\alpha$ y Dresselhaus $\beta$ . Se considera un pozo cuántico crecido en la dirección [001] (Maytorena et al., 2006). . . . .	10
4	Mapa de intensidad de la polarización de espín $ \mathbf{S} $ como función de la frecuencia $\omega$ y dirección $\varphi$ del campo eléctrico, en un pozo cuántico crecido en las direcciones (a) [001] y (b) [110]. La presencia simultánea del acoplamiento Rashba y Dresselhaus[ $hkl$ ] ocasiona que $ \mathbf{S} $ dependa de la dirección y frecuencia del campo eléctrico (Iglesias et al., 2010). . . . .	12
5	Mapa de intensidad de $ \mathbf{S} $ como función de $\omega$ y los parámetros de Rashba $\alpha$ y Dresselhaus $\beta$ , para una dirección fija $\varphi$ del campo eléctrico en un pozo cuántico crecido en las direcciones (a) [001] y (b) [110] (Iglesias et al., 2010). . . . .	12
6	Esquema de los contornos de Fermi y la distribución de los estados de espín (representados por las flechas) en (a) equilibrio y en (b) respuesta a un campo eléctrico $\mathbf{E}$ que se aplica en el plano $xy$ de un GE2D con acoplamiento Rashba, donde $\delta\mathbf{k} = e\tau_p\mathbf{E}/\hbar$ y $\tau_p$ es el tiempo de relajación del momento (Silsbee, 2004). . . . .	13
7	Ilustración esquemática de la polarización de espín inducida por un (a) campo eléctrico o un (b) gradiente de temperatura (Dyrdal et al., 2013). . . . .	15
8	(a) Ilustración esquemática del efecto Seebeck: un gradiente de temperatura $\nabla T$ en un conductor genera una diferencia de potencial $V$ en la dirección de $\nabla T$ . (b) Ilustración esquemática del efecto Seebeck de espín: cuando se aplica un $\nabla T$ en un material magnético, se genera un voltaje de espín $V_S$ (Uchida et al., 2010). . . . .	16
9	(a) Ilustración del potencial químico $\mu$ en un metal en el cual se aplica un gradiente de temperatura. (b) Potenciales químicos dependientes del espín, $\mu_\uparrow$ y $\mu_\downarrow$ , en un ferromagneto en presencia de un gradiente de temperatura (Ong,2008). . . . .	17

## Lista de figuras (continuación)

Figura		Página
10	(a) Ilustración de los potenciales químicos dependientes del espín, $\mu_{\uparrow}$ y $\mu_{\downarrow}$ , inducidos por un gradiente de temperatura aplicado en una muestra de $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}\text{-Pt}$ . $\Delta T$ denota la diferencia de temperatura entre los extremos de la capa de $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ . El voltaje de espín tiene signos opuestos en los dos extremos. Las gráficas (b) y (c) muestran la dependencia en $\Delta T$ del voltaje $V$ producido entre los extremos del alambre de Pt unido a la capa de $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ , en los extremos de (b) baja temperatura (300 K) y (c) alta temperatura (300 K + $\Delta T$ ) del $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ . (d) Caso cuando no hay alambres de Pt sobre la capa de $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ (Uchida et al., 2008). . . . .	18
11	(a) Esquema del transistor de espín de efecto de campo propuesto por Datta y Das. (b) Transistor de espín propuesto por Alomar et al. (2015), donde $\alpha$ es el parámetro de Rashba y $l$ es la longitud de la región central donde el acoplamiento Rashba es constante. El transporte electrónico es inducido por una diferencia de potencial $V$ , la cual se aplica a través de las uniones o es generada por la diferencia de temperatura $\Delta T$ entre los contactos. . . . .	19
12	(a) Ilustración esquemática de una heteroestructura semiconductor de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}/\text{InP}$ . El gas de electrones bidimensional está localizado en una capa de $\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$ de 10 nm de espesor. La barrera inferior del pozo cuántico está formada por una capa de InP, mientras que para la capa superior se usa una capa de $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ de 70 nm. (b) Perfil de la banda de conducción y el pozo cuántico asimétrico donde se forma el gas de electrones (Heide et al., 2006). . . . .	22
13	Representación del campo espín-órbita $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ . . . . .	26
14	(a) Esquemas de las sub-bandas de energía $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ de un GE2D con acoplamiento Rashba. (b) Al nivel de Fermi se tienen dos vectores de Fermi característicos $k_F^+$ y $k_F^-$ , donde $k_F^+ < k_F^-$ . La energía del desdoblamiento de los estados de espín está determinada por la cantidad $\Delta_R = 2\alpha k_F$ . La profundidad de la parte negativa de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ está dada por $\varepsilon_R = \hbar^2 k_{so}^2 / 2m^*$ . . . . .	30
15	Esquemas de las sub-bandas de energía $\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})$ de un GE2D con acoplamiento (a) isotrópico y (d) R+D[001]. Distribución de la orientación del espín en el estado $ \nu\mathbf{k}\rangle$ para el caso con acoplamiento (b) Rashba, (c) Dresselhaus[001] y (e) R+D[001]. (Ganichev et al., 2004). . . . .	32
16	Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[001] cuando $\alpha = \beta_{[001]}$ . . . . .	33
17	(a) Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento Dresselhaus[110]. (b) Distribución de la orientación del espín en el estado $ \nu\mathbf{k}\rangle$ . . . . .	34

## Lista de figuras (continuación)

Figura		Página
18	Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[110]. .....	35
19	(a) A temperatura cero, los únicos estados permitidos que intervienen en las transiciones entre las sub-bandas $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ son aquéllos con vectores de onda $k_{F+} \leq k \leq k_{F-}$ para los cuales se cumple que $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$ . (b) La curva de resonancia $C_r(\omega)$ está definida por los puntos $(k_x, k_y)$ tales que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ ; para $\omega_1$ y $\omega_2$ fijas, con $\omega_2 < \omega_1$ y $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ . Sólo la región sombreada contribuye a la absorción. ....	49
20	(a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento Rashba.(b) Región angular en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , se observa que todas las direcciones contribuyen igual. ....	52
21	La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2 \alpha - \beta_{[001]} $ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2 \alpha + \beta_{[001]} $ . Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas $\varepsilon_\pm(k, \theta)$ son (a) $\hbar\omega_+$ , (b) $\hbar\omega_a$ , (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$ , con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$ . Los parámetros usados son $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$ , $\beta_{[001]} = 0.5\alpha$ , $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05 m_0$ . ....	54
22	(a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[001].(b) Región angular en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/4)$ , $\omega_a = \Omega_-(\pi/4)$ , $\omega_b = \Omega_+(3\pi/4)$ , $\omega_- = \Omega_-(3\pi/4)$ . ....	56
23	La curva $C_r(\omega)$ describe una elipse rotada con semieje mayor $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$ y semieje menor $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$ . Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas $\varepsilon_\pm(k, \theta)$ son (a) $\hbar\omega_+$ , (b) $\hbar\omega_a$ , (c) $\hbar\omega_b$ y (d) $\hbar\omega_-$ , con $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$ . Los parámetros usados son $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$ , $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$ , $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05 m_0$ . ....	58
24	(a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[110].(b) Región angular en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , donde $\omega_+ = \Omega_+(\pi/2)$ , $\omega_a = \Omega_-(\pi/2)$ , $\omega_b = \Omega_+(\pi)$ , $\omega_- = \Omega_-(\pi)$ . ....	59
25	(a) Contribución espín-órbita tipo Rashba a la conductividad de carga eléctrica $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ como función de la frecuencia, para distintos valores de la temperatura. (b) $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ como función de la temperatura, para distintos valores de la frecuencia. Los parámetros usados son $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$ , $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , $m^* = 0.05 m_0$ y $E_F = 23.7 \text{ meV}$ . ....	61
26	Contribución espín-órbita R+D[001] a la conductividad de carga eléctrica $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ como función de la frecuencia, a $T = 0$ y $T = 20 \text{ K}$ . Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 25. ....	62

## Lista de figuras (continuación)

Figura		Página
27	Contribución espín-órbita R+D[110] a la conductividad de carga eléctrica $\Re L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ como función de la frecuencia, a $T = 0$ y $T = 20$ K. Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 25. . . . .	63
28	Contribución espín-órbita a la conductividad de espín $\Re L_{xy}^{(sq)z}(\omega)$ como función de la frecuencia $\omega$ , para distintos valores de $\beta_{[001]}$ . Los parámetros usados son $\alpha = 0.16$ eVÅ, $n = 5 \times 10^{11}$ cm <sup>-2</sup> , $m^* = 0.05 m_0$ y $E_F = 23.7$ meV. . . .	70
29	Contribución espín-órbita a la parte real de la termoconductividad Hall de espín, $\sigma_{TH}^{SH}$ , como función del parámetro de acoplamiento Rashba $\lambda$ y la temperatura $T$ . Aquí se usó $\hbar\omega = 0.2E_F$ y sólo hay acoplamiento tipo Rashba. El recuadro muestra $\sigma_{TH}^{SH}$ como función de la frecuencia para distintos valores del parámetro $\lambda$ a una temperatura fija de $k_B T = 0.3E_F$ (Ma, 2010). . . . .	75
30	Contornos de Fermi correspondientes a distintos valores de los parámetros de acoplamiento. La curva de resonancia $C_r(\omega)$ está definida por los puntos $(k_x, k_y)$ tales que $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) =  \hbar\Omega(\mathbf{k})  = \hbar\omega$ . Los parámetros usados son $\alpha_0 = 0.16$ eVÅ, $\beta_0 = 1 \times 10^{-22}$ eVcm <sup>3</sup> , $n = 5 \times 10^{11}$ cm <sup>-2</sup> , $m^* = 0.05 m_0$ y $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ . . . . .	83
31	(a) Contribución espín-órbita a la conductividad de carga eléctrica $\Re L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ como función de la frecuencia, a $T = 0$ y con distintos valores del parámetro de acoplamiento $\beta_3$ . (b) Región angular en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ . Los parámetros usados son, $\alpha = \alpha_0$ , $\beta_1 = \alpha_0/2$ , con $\alpha_0 = 0.16$ eVÅ, $\beta_0 = 1 \times 10^{-22}$ eVcm <sup>3</sup> , $n = 5 \times 10^{11}$ cm <sup>-2</sup> y $m^* = 0.05 m_0$ . . . . .	84
32	Contribución espín-órbita a la conductividad Hall de espín $\Re L_{xy}^{(se)z}(\omega)$ como función de la frecuencia, a $T = 0$ y con distintos valores del parámetro de acoplamiento $\beta_3$ . Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 31. . . . .	85
33	Coeficiente Seebeck $\Re S_{yx}(\omega)$ (eje derecho) y coeficiente Seebeck de espín $\Re S_{yx}^{(s)z}(\omega)$ (eje izquierdo) como función de la frecuencia, donde $S_0 = k_B/e$ . En el recuadro se muestra la diferencia porcentual $ \Re S_{yx}^{(s)z} - \Re S_{yx} / \Re S_{yx}^{(s)z} $ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Figura 31. . . . .	86
34	Contribución espín-órbita a las conductividades (a) $\Re \Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega)$ y (b) $\Re \Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega)$ como función de la frecuencia $\omega$ , a distintos valores del parámetro $\beta_3$ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Figura 31. . . . .	88

# 1. Introducción

---

A principios del siglo XX se desarrollaron las primeras ideas que sugerían la existencia de una propiedad magnética intrínseca de los electrones, introduciendo de esta manera el concepto de espín electrónico. Una vez descubierto el espín del electrón en 1921, se estudió su interacción con los campos eléctricos producidos dentro de los átomos. A este acoplamiento se le conoce como *interacción espín-órbita* (IEO): se trata de un efecto cuántico relativista que acopla el momento orbital del electrón (o hueco) con su momento magnético intrínseco. Aunque los efectos de la IEO para electrones débilmente interactuantes son muy pequeños, se ha observado que el confinamiento electrónico en ciertas heteroestructuras semiconductoras de baja dimensionalidad causa un incremento significativo en la magnitud de la IEO. En estos sistemas, la IEO se traduce a un campo magnético efectivo, llamado *campo espín-órbita*, que depende del momento del electrón (Winkler, 2003).

En los últimos años se ha desarrollado una intensa investigación sobre la manipulación y el transporte de espín en sistemas semiconductores. Esto responde a la necesidad de integrar el grado de libertad del espín a la electrónica existente basada principalmente en el transporte de carga. Uno de los principales objetivos del campo de la *espintrónica* es encontrar mecanismos que permitan incorporar el espín de los electrones en la electrónica convencional para desarrollar dispositivos con nuevas funcionalidades. Uno de estos mecanismos es precisamente la IEO (Zutic et al., 2004; Bader et al., 2010).

En la interfaz de ciertas heteroestructuras semiconductoras se pueden formar de manera controlada pozos cuánticos que dan lugar a gases de electrones cuasi-bidimensionales (GE2D) (Davies,1998). La presencia conjunta de las simetrías de inversión espacial y temporal en ciertos semiconductores, en ausencia de un campo magnético, resulta en una doble degeneración de los estados de espín de los electrones. Al aplicar un campo magnético externo esta degeneración se rompe. Sin embargo, en ciertos semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda tales como InAs o GaAs, donde los electrones se mueven a través de potenciales que no tienen simetría de inversión espacial, ocurre un rompimiento en la degeneración de los estados de espín incluso en la ausencia de campos magnéticos externos (Winkler, 2003). Esta falta de simetría da origen a distintos mecanismos de IEO. La falta de simetría espacial

del potencial que confina el gas de electrones a un dominio cuasi-bidimensional da origen a la IEO tipo Rashba (Bychkov et al., 1984). Otro mecanismo importante se origina por el rompimiento en la simetría de inversión espacial en el bulto en el que está inmerso el pozo, lo que da lugar a la IEO tipo Dresselhaus (1955).

Se han observado y propuesto distintos fenómenos y dispositivos espintrónicos que involucran la presencia de los acoplamientos de Rashba y Dresselhaus, estos mecanismos proporcionan una vía de acceso para controlar el espín del electrón aplicando campos eléctricos en lugar de campos magnéticos. Por ejemplo, la generación de una densidad de espines es uno de los requerimientos de cualquier posible dispositivo espintrónico. En este sentido, un fenómeno notable es la generación eléctrica o no magnética de una polarización de espín en un semiconductor inducida por el campo espín-órbita, es decir, a través de la IEO (D'yakonov et al., 1971; Edelstein, 1990; Kato et al., 2004b; Sih et al., 2005). Otro fenómeno importante es el efecto Hall de espín, el cual describe la generación de una corriente transversal de espín y una polarización de espín como respuesta a una corriente eléctrica vía la IEO, sin que se requieran campos magnéticos externos o materiales magnéticos, como ocurre normalmente en el efecto Hall clásico (Sinova et al., 2004; Kato et al., 2004b; Sih et al., 2005; Wunderlich et al., 2005; Jungwirth et al., 2012). En particular, la magnitud de la IEO tipo Rashba se puede modular por voltajes externos de compuerta (Nitta et al., 1997; Schapers et al., 1998). Uno de los primeros dispositivos espintrónicos propuestos es el transistor de espín de Datta y Das (1990), que hace uso precisamente de dicha interacción para controlar el flujo de corriente eléctrica en un GE2D mediante voltajes de compuerta (Cheol et al., 2009). En la actualidad, el impacto comercial de la espintrónica está en el área de válvulas de espín usadas en discos duros magnéticos. El principio de operación de tales válvulas está basado en el efecto de la magnetoresistencia gigante (Baibich et al., 1988).

Por otro lado, los efectos termoeléctricos son fenómenos asociados al flujo simultáneo de corriente eléctrica y de calor en un sistema. El efecto Seebeck es uno de los fenómenos termoeléctricos más conocidos y consiste en la conversión directa de una diferencia de temperatura en electricidad. Estos efectos se han estudiado extensamente y han permitido el desarrollo de una gran variedad de materiales y dispositivos termoeléctricos que hacen posible transformar calor en energía eléctrica, y viceversa (Nolas et al., 2001). Sin embargo, a pesar

de décadas de investigación en materiales y dispositivos termoeléctricos, el mayor problema de estos dispositivos es su baja eficiencia, esto quiere decir que tienen una alta conductividad eléctrica pero una baja conductividad térmica (Sales, 2002). Un enfoque prometedor para aumentar su eficiencia y versatilidad propone incorporar el espín, además de la carga y de las propiedades de transporte de calor.

En este contexto, experimentos y modelos teóricos recientes muestran que una corriente de espín está fuertemente acoplada con gradientes de temperatura y flujos de calor en distintos sistemas. Esto ha dado origen a un nuevo campo de estudio llamado “spin caloritronics” (Bauer et al., 2010), que combina la termoelectricidad (que no considera el transporte de espín) con la espintrónica (que no considera el transporte de calor). También se han sugerido nombres alternativos, tales como “thermo-spintronics” o “thermal spintronics”. Uno de los temas centrales de la *termoespintrónica* es manipular el transporte del electrón y su momento magnético intrínseco mediante flujos de calor y gradientes de temperatura, y viceversa. Se espera que este enfoque conduzca al diseño de nuevos dispositivos termoeléctricos que involucren el espín (Bauer et al., 2012).

Los inicios de la termoespintrónica y la espintrónica se remontan a la misma época. En 1987, M. Johnson y R.H. Silsbee utilizaron los métodos de la termodinámica irreversible para estudiar el transporte de espín, de carga eléctrica y de flujo de calor en heteroestructuras metálicas con configuraciones de magnetización colineal (Johnson et al., 1987). Excepto por algunos trabajos experimentales, este campo se ha mantenido latente por muchos años. No obstante, la reciente observación experimental, a temperatura ambiente, de la generación de una corriente de espín por un gradiente de temperatura despertó un renovado interés en el estudio de las propiedades termoeléctricas y la manipulación del espín en sistemas magnéticos, esto es, en la producción de corrientes de espín por procedimientos térmicos (Uchida et al., 2008).

En este contexto, resulta natural investigar la posibilidad de producir esta clase de fenómenos en GE2D formados en heteroestructuras semiconductoras. En principio, un gradiente de temperatura podría generar una corriente de espín (Ma, 2010; Cheng et al., 2008; Liu et al., 2010) o una polarización de espín (Wang et al., 2010; Dyrdal et al., 2013), en analogía con el efecto Hall de espín y la polarización de espín inducidos eléctricamente a través de la

IEO intrínseca. Sin embargo, los fenómenos espintrónicos y termoespintrónicos en sistemas con IEO dependen del tipo de acoplamiento presente en el sistema. En particular, en un GE2D el acoplamiento tipo Rashba produce un desdoblamiento de los estados de espín que depende de forma lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$  del electrón. Mientras que el acoplamiento tipo Dresselhaus produce un desdoblamiento proporcional a  $k^3$ , que no obstante, en pozos cuánticos suficientemente angostos el término lineal en  $\mathbf{k}$  se vuelve dominante frente al término cúbico. Por esta razón la mayoría de las investigaciones realizadas se ha restringido al caso de la IEO que depende linealmente del vector de onda  $\mathbf{k}$ . Otra característica importante del acoplamiento Dresselhaus es que depende de la dirección de crecimiento del pozo cuántico (Winkler, 2003; Cartoixà et al., 2006). Estudios teóricos recientes han estudiado fenómenos como la polarización de espín inducida por un campo eléctrico (Wang et al., 2009) y la conductividad óptica (Li et al., 2013), tomando en cuenta la contribución del término cúbico del acoplamiento Dresselhaus además del término lineal, y se ha encontrado que esta contribución tiene consecuencias importantes en la dinámica del espín.

En general, los fenómenos termoespintrónicos en sistemas semiconductores con IEO de Rashba han sido de los más estudiados y mejor desarrollados. No obstante, las investigaciones realizadas no han considerado el efecto conjunto de los acoplamiento Rashba y Dresselhaus. El desdoblamiento de los estados de espín producido por la presencia conjunta de dichos acoplamientos, abre la posibilidad de que se lleven a cabo transiciones entre las sub-bandas de espín como respuesta a perturbaciones térmicas o eléctricas que oscilan a una frecuencia dada en el régimen de los terahertz. Diversos estudios han destacado la importancia de considerar el régimen dinámico en sistemas con IEO de Rashba y Dresselhaus. En esta clase de sistemas se han investigado diversos fenómenos físicos relevantes, tales como la relación entre la conductividad Hall de espín y la susceptibilidad de espín como respuesta a campos eléctricos AC (Erlingsson et al., 2005; Maytorena et al., 2006; López-Bastidas et al., 2007), la inyección de corrientes de espín en pozos cuánticos por la absorción de radiación infrarroja (Sherman et al., 2005), así como la generación de una densidad de espín por ondas electromagnéticas (Pletyukhov et al., 2009). Por lo tanto, considerar el régimen dinámico en el estudio de fenómenos termoespintrónicos en sistemas con acoplamiento Rashba y Dresselhaus, permitiría acceder a los estados de espín a través de distintos mecanismos, tales como la variación de la frecuencia y dirección de la perturbación térmica o eléctrica

aplicada, además de la modulabilidad de los parámetros de IEO.

## Objetivos de la tesis

Considerando el estado actual de las investigaciones realizadas en este tema, esta tesis tiene como objetivo investigar los fenómenos de la corriente de espín y la orientación de espín inducidas por un gradiente de temperatura que se aplica en un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Para ello, consideramos los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras semiconductoras III-IV con estructura cristalina tipo zincblenda, orientados en las principales direcciones cristalográficas [001], [110] y [111]. En particular, para el caso de un pozo cuántico crecido en la dirección cristalográfica [001], consideramos la contribución lineal y cúbica en el vector de onda  $\mathbf{k}$  del acoplamiento Dresselhaus. Utilizamos el formalismo de la teoría cuántica de la respuesta lineal para calcular los coeficientes fenomenológicos en respuesta lineal a un campo eléctrico y un gradiente de temperatura, a través de funciones de correlación tipo fórmulas de Kubo.

A continuación se presenta la organización de esta tesis por capítulos. Iniciamos en el capítulo 2 con una descripción general de algunos los principales temas de estudio del nuevo campo de la termoespintrónica. En este contexto, se describe el efecto Seebeck de espín, fenómeno que dio origen a este nuevo campo y que ha sido ampliamente investigado. También se describen el efecto Hall de espín y la polarización de espín inducida por un campo eléctrico, así como sus análogos térmicos.

El sistema de estudio de esta tesis es un gas de electrones bidimensional con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, por este motivo en el capítulo 3 se repasan las propiedades espectrales de esta clase de sistemas en ausencia de campos externos.

En el capítulo 4 presentamos los cálculos de las conductividades eléctrica, termoeléctrica y de espín en el dominio de la frecuencia, que describen corrientes eléctricas y de espín que se generan en un GE2D con IEO como respuesta a campos eléctricos y gradientes de temperatura. Para ello usamos el formalismo de la teoría de respuesta lineal para obtener las correspondientes fórmulas de Kubo en términos de los diferentes tipos de corrientes involucradas. Analizamos también la dependencia de la temperatura de estas funciones respuesta.

En el capítulo 5 estudiamos el efecto Hall de espín inducido por un gradiente de temperatura pero a través del efecto termoeléctrico. Además, derivamos fórmulas que conectan la conductividad termoeléctrica y la conductividad de espín generadas térmicamente, como las que existen entre la conductividad de carga eléctrica y la conductividad de espín inducidas por un campo eléctrico. Estas conexiones se obtienen considerando el caso de un GE2D con IEO lineal en  $\mathbf{k}$ . Como resultado de estas conexiones obtenemos que la corriente de espín inducida por un gradiente de temperatura es nula. Esta anulación difiere drásticamente del único estudio que aborda este tema en un GE2D, y que además considera únicamente el acoplamiento Rashba (Ma, 2010).

Debido a este resultado nulo exclusivo de la IEO lineal, en el capítulo 6 consideramos la contribución cúbica en  $\mathbf{k}$  del acoplamiento Dresselhaus en un pozo cuántico crecido en la dirección [001]. En este caso, mostramos que la corriente de espín inducida por un gradiente de temperatura no se anula. De esta manera, se muestra que la cancelación del efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico es exclusiva de un GE2D con IEO lineal en  $\mathbf{k}$ . Esto es potencialmente útil para discernir la presencia efectiva del término cúbico frente a la contribución lineal.

En el capítulo 7 estudiamos el fenómeno de la polarización de espín como respuesta a un gradiente de temperatura. También encontramos conexiones entre la polarizabilidad de espín y la corriente Hall de espín como respuesta a un gradiente de temperatura. Estas fórmulas nos permiten relacionar la densidad de espín y la corriente Hall de espín inducidas por un gradiente de temperatura.

Finalmente en el capítulo 8 se presentan las conclusiones generales de este trabajo y se proponen posibles líneas de trabajo a futuro.

## 2. Efectos termoespintrónicos

---

Uno de los temas centrales de la espintrónica y del campo de la termoespintrónica es la manipulación y el transporte de espín por mecanismos eléctricos y térmicos, en sistemas electrónicos de baja dimensionalidad con interacción espín-órbita. En el contexto del control eléctrico del espín, en sistemas semiconductores con IEO son notables los fenómenos de la generación de una corriente transversal de espín y una polarización de espín como respuesta a un campo eléctrico, sin que se requieran campos magnéticos externos, fenómenos conocidos como efecto Hall de espín (*spin Hall effect*, SHE) y polarización de espín inducida por un campo eléctrico (*current-induced spin polarization*, CISP), respectivamente. Recientemente ha cobrado mucha atención su contraparte térmica, es decir, una corriente Hall de espín y una polarización de espín inducidas por un gradiente de temperatura.

La posibilidad de manipular el espín por medios eléctricos y térmicos es de interés no sólo por razones fundamentales, sino también desde el punto de vista de posibles aplicaciones en futuros dispositivos y tecnologías de procesamiento de información; por ejemplo, se busca desarrollar sistemas que aprovechen y transformen el calor disipado en corrientes de espín y de ahí en corrientes eléctricas mediante el efecto Hall de espín inverso (Bauer et al., 2012).

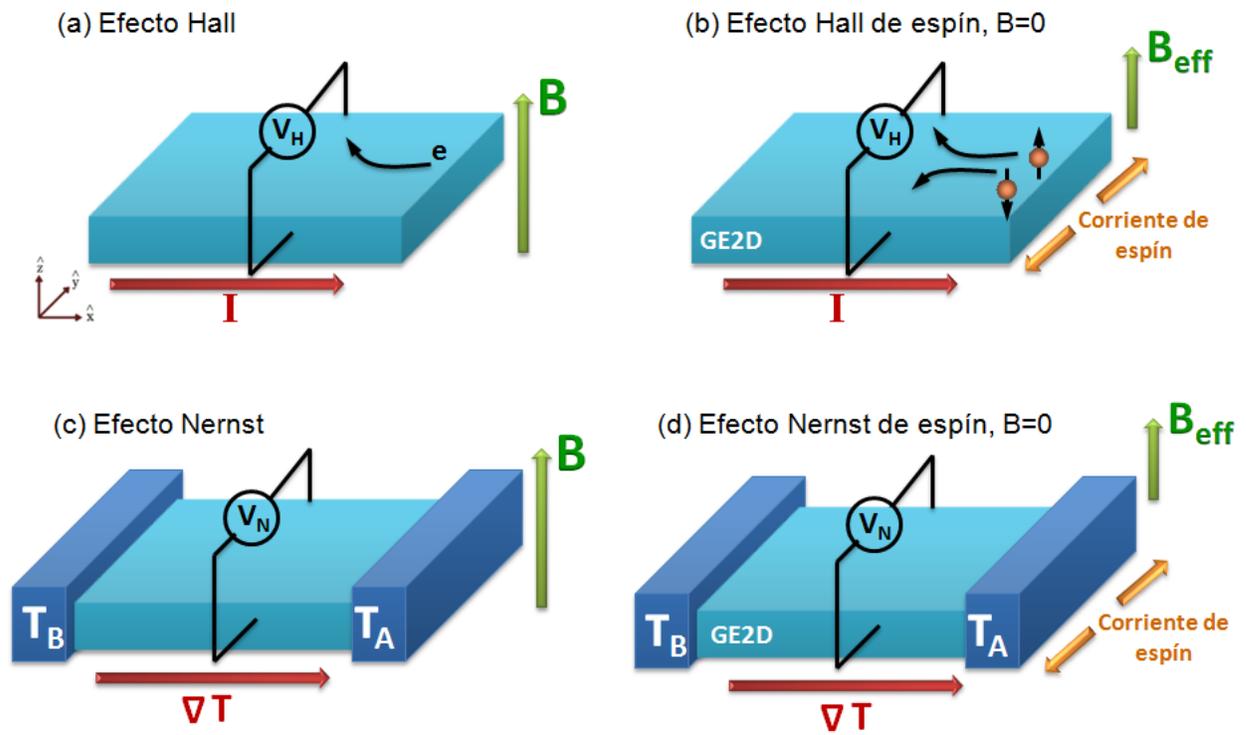
Tomando en cuenta la importancia de tener una perspectiva general que nos permita entender y familiarizarnos con estos fenómenos, el objetivo de este capítulo es dar una descripción general, desde un punto de vista fenomenológico, de algunos de los principales efectos termoespintrónicos en sistemas con IEO, tales como el SHE, CISP, el efecto Seebeck y sus análogos térmicos, por mencionar sólo algunos ejemplos.

### 2.1 Efecto Hall de espín

Sabemos que una corriente eléctrica aplicada en un conductor produce un voltaje por acumulación de carga en los extremos y en la misma dirección de la corriente. Si además aplicamos un campo magnético perpendicular a dicha corriente, éste campo ejerce una fuerza transversal sobre los portadores de carga móviles que tenderá a desviarlos hacia un borde del conductor. La acumulación de carga en los bordes producirá un voltaje transversal a la dirección de la corriente y del campo, llamado voltaje Hall  $V_H$  (Figura 1.a). Éste es el conocido efecto

Hall, descubierto por E. H. Hall en 1879. Entre sus múltiples aplicaciones se encuentran, por ejemplo, los sensores de campo magnético (Jungwirth et al., 2012).

En 1971, D'yakonov y Perel demostraron teóricamente que un campo eléctrico externo puede generar una corriente transversal de espín y una polarización de espín mediante la IEO asociada al potencial electrostático de impurezas, incluso en sistemas no magnéticos y en ausencia de campos magnéticos externos (D'yakonov et al., 1971). En la corriente de espín propuesta por D'yakonov y Perel' los electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo se acumulan en los bordes opuestos de un canal conductor, análogo a la acumulación de carga que ocurre en el efecto Hall clásico. Este proceso requiere impurezas para que se lleven a cabo procesos de dispersión selectivos de espín, por tal motivo se conoce como *efecto Hall de espín extrínseco* (Hirsch, 1999; Zhang, 2000; Engel et al., 2005).

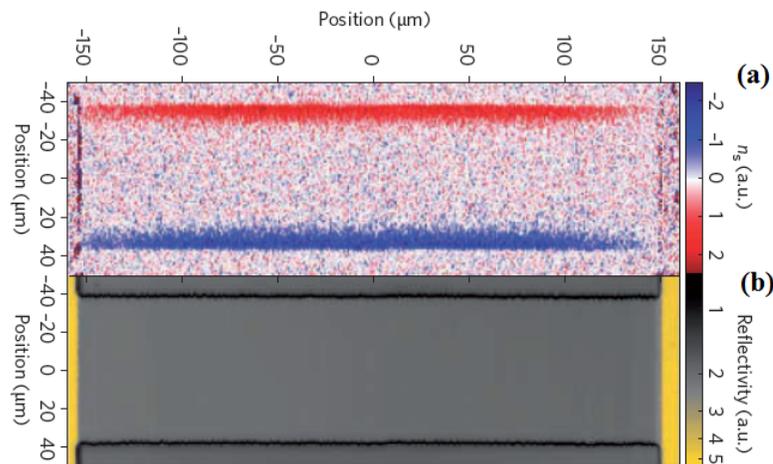


**Figura 1:** Ilustración esquemática de los efectos (a) Hall, (b) Hall de espín, (c) Nernst y (d) Nernst de espín. Aquí  $B$  representa un campo magnético externo y  $B_{eff}$  un campo magnético efectivo asociado a la interacción espín-órbita.

Posteriormente, se predijo un *efecto Hall de espín intrínseco* (Murakami et al., 2003; Sinova et al., 2004) en materiales que no tienen simetría de inversión espacial, dicha asimetría da origen a mecanimos de IEO intrínseca, tales como los acoplamientos de Rashba y Dres-

selhaus. En este caso, cuando se aplica un campo eléctrico, el ‘campo magnético’ efectivo asociado a la IEO produce una torca sobre el espín de los electrones que también puede inducir una corriente transversal de espín (Figura 1.b).

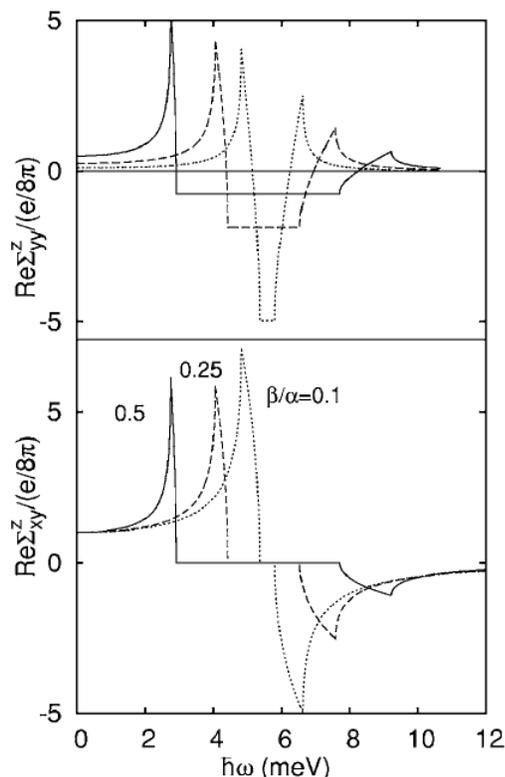
El SHE se ha estudiado exténsamente debido a que ofrece una posibilidad de manipular el espín eléctricamente en sistemas semiconductores. La primera observación experimental del SHE fue realizada por Kato et al. (2004b) en películas delgadas semiconductoras de  $n$ -GaAs, utilizando una técnica basada en el efecto Kerr magneto óptico (*magneto-optic Kerr effect*, MOKE). Este efecto describe la rotación de la polarización de un haz linealmente polarizado cuando el haz se refleja sobre una muestra magnetizada. El ángulo de rotación es proporcional a la magnetización del material, y permite determinar el número relativo de electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo presentes en los bordes del material. En la Figura (2) se muestra la detección óptica de una acumulación de espines con polarización opuesta en los bordes de la muestra, lo cual es resultado de la generación de una corriente espín en la dirección transversal a la corriente eléctrica aplicada. Las mediciones experimentales les permitieron establecer que la polarización de espín observada es producto de mecanismos extrínsecos de IEO. Tras el descubrimiento del SHE, distintos experimentos han observado este fenómeno debido a mecanismos intrínsecos (Wunderlich et al., 2005; Hernandez et al., 2013) y extrínsecos (Sih et al., 2005; Stern et al., 2006; Valenzuela et al., 2006).



**Figura 2:** Observación experimental del efecto Hall de espín. (a) Detección óptica de la densidad de espín  $n_s$  de una película delgada de GaAs. Se observa que la orientación de espín tiene signos opuestos en los bordes de la muestra. (b) Medición de la reflectividad  $R$ , se muestran los bordes en la muestra en color negro, así como la alta reflectividad de los contactos metálicos en color dorado. (Kato et al., 2004b).

Los primeros trabajos teóricos sobre el SHE intrínseco encontraron un valor universal de  $e/8\pi$  para la conductividad Hall de espín d.c., definida como la razón de la corriente transversal de espín y el campo eléctrico aplicado (Sinova et al., 2004). Sin embargo, cálculos posteriores establecieron que la presencia de impurezas modifica este valor universal (Schliemann et al., 2004; Sinitsyn et al., 2004; Inoue et al., 2004; Dimitrova, 2005).

Por otro lado, estudios teóricos han considerado la excitación con campos que oscilan a frecuencia finita en GE2D con IEO que dependen de forma lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$ . En esta clase de sistemas, se ha reportado que las resonancias que se observan en la conductividad Hall de espín dependen de los parámetros de Rashba y Dresselhaus (Erlingsson et al., 2005). Maytorena et al. (2006) calcularon la conductividad Hall de espín inducida por un campo eléctrico a.c., muestran que el comportamiento espectral de la conductividad es resultado de la anisotropía angular del desdoblamiento de los estados de espín debida a la presencia conjunta del acoplamiento Rashba y Dresselhaus (véase Figura 3).



**Figura 3:** Parte real del tensor de la conductividad Hall de espín  $\mathbb{Re}\Sigma_{ij}^z$  como función de la frecuencia  $\omega$  del campo eléctrico, para distintos valores de los parámetros de Rashba  $\alpha$  y Dresselhaus  $\beta$ . Se considera un pozo cuántico crecido en la dirección [001] (Maytorena et al., 2006).

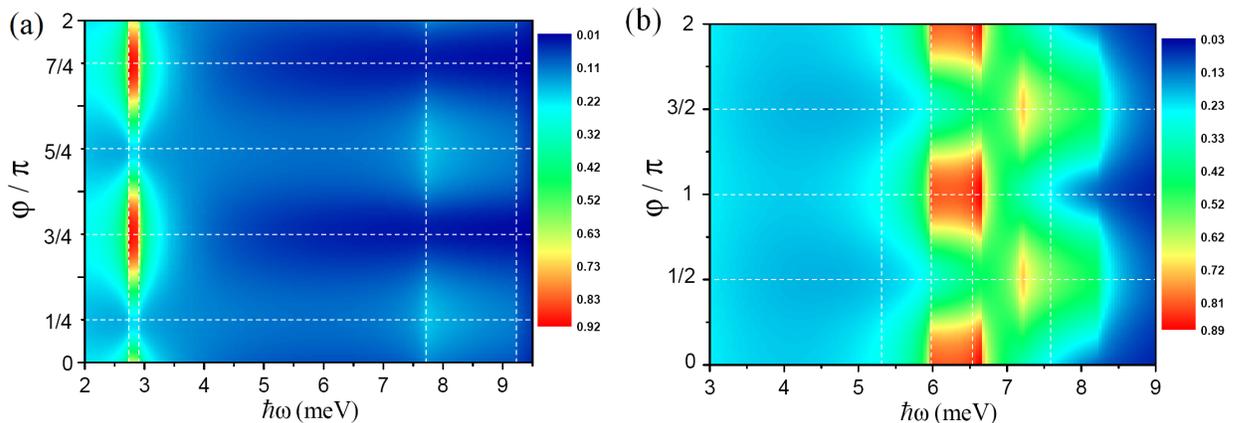
## 2.2 Orientación de espín inducida por un campo eléctrico

La generación eléctrica o no magnética de una polarización de espín es un tema de interés en la espintrónica. Este fenómeno abre la posibilidad de desarrollar dispositivos espintrónicos más pequeños y rápidos, los cuales serían más sencillos de fabricar porque los campos eléctricos se pueden confinar más fácilmente en regiones pequeñas (Zutić et al., 2004; Bader et al., 2010). Sin embargo, los espines no responden a campos eléctricos bajo condiciones normales, es decir, desde el punto de vista clásico, un momento magnético no se acopla con un campo eléctrico. En este contexto, la IEO en semiconductores ofrece, en principio, una vía de acceso para el control eléctrico de los estados de espín. El campo eléctrico que se aplica en el plano de un GE2D actúa sobre portadores de carga en movimiento como un campo magnético intrínseco por medio del cual es posible orientar los espines (Edelstein, 1990).

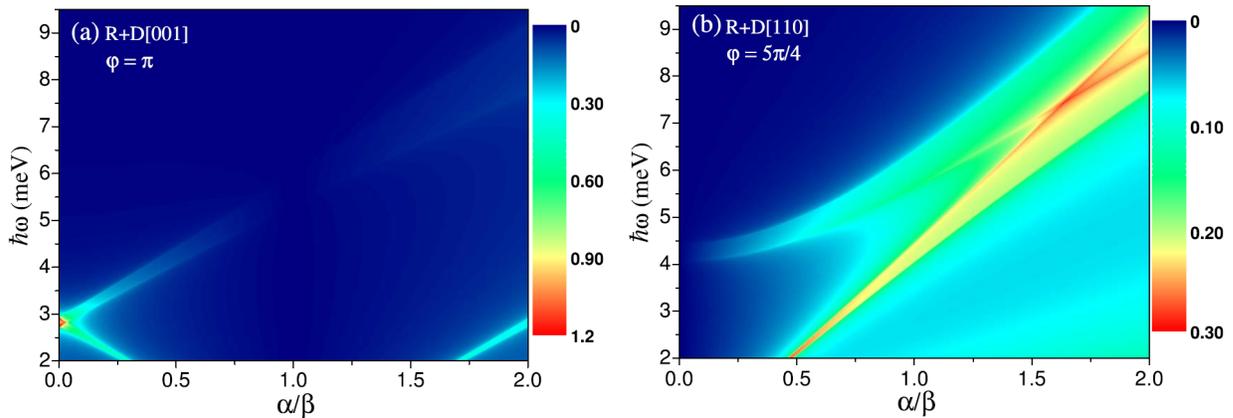
En 1971, D'yakonov y Perel' realizaron uno de los primeros estudios en los que se propuso teóricamente la posibilidad de generar un efecto magneto-eléctrico en sistemas semiconductores con IEO, es decir, la generación de una magnetización de espín por una corriente eléctrica, sin que se requiera el uso de materiales magnéticos ni la aplicación de campos magnéticos externos. Sin embargo, fue hasta 2004, cuando se obtuvieron las primeras pruebas experimentales que mostraban la existencia de este fenómeno (Kato et al., 2004a; Silov et al., 2004; Ganichev et al., 2004b; Sih et al., 2005). En los experimentos realizados, se observó por primera vez la polarización de espín generada por una corriente eléctrica en heteroestructuras semiconductoras con IEO, utilizando métodos como fotoluminiscencia, microscopía de rotación de Kerr y microscopía de rotación de Faraday. En 2006, se observó este fenómeno incluso a temperatura ambiente en capas de ZnSe, utilizando la microscopía de rotación de Kerr (Stern et al., 2006).

En GE2D con IEO tipo Rashba y tipo Dresselhaus, se ha demostrado teóricamente que la polarización de espín inducida por el campo eléctrico es anisotrópica, esto quiere decir que depende de la dirección del campo (Trushin et al., 2007). Además de esta anisotropía debida al campo, se ha demostrado que la contribución del acoplamiento Dresselhaus a la polarización de espín, depende de la dirección de crecimiento del pozo cuántico (véase Figura 4), mientras que la contribución del acoplamiento Rashba es independiente de dicha dirección (Chaplik et al., 2002; Raichev, 2007; Iglesias et al., 2010). De igual forma, diversos estudios

(Erlingsson et al., 2005; Maytorena et al., 2006; López-Bastidas et al., 2007; Iglesias et al., 2010) han mostrado que la magnitud y dirección de la polarización de espín dependen de los valores relativos de los parámetros de Rashba y Dresselhaus (véase Figura 5).



**Figura 4:** Mapa de intensidad de la polarización de espín  $|S|$  como función de la frecuencia  $\omega$  y dirección  $\varphi$  del campo eléctrico, en un pozo cuántico crecido en las direcciones (a) [001] y (b) [110]. La presencia simultánea del acoplamiento Rashba y Dresselhaus  $[hkl]$  ocasiona que  $|S|$  dependa de la dirección y frecuencia del campo eléctrico (Iglesias et al., 2010).



**Figura 5:** Mapa de intensidad de  $|S|$  como función de  $\omega$  y los parámetros de Rashba  $\alpha$  y Dresselhaus  $\beta$ , para una dirección fija  $\varphi$  del campo eléctrico en un pozo cuántico crecido en las direcciones (a) [001] y (b) [110] (Iglesias et al., 2010).

A continuación ilustraremos, desde un punto de vista fenomenológico, cómo la aplicación de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  puede inducir una polarización de espín debido a la presencia de la IEO. Para ello consideremos, por ejemplo, el desdoblamiento isotrópico de los estados de

espín producido por el acoplamiento Rashba en un GE2D. Los contornos de Fermi son curvas de energía constante determinadas por la condición  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_F$ , donde  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k})$  representa las sub-bandas de energía y  $\varepsilon_F > 0$  es la energía de Fermi. En presencia del acoplamiento Rashba, los contornos de Fermi son círculos concéntricos como se muestra en el plano  $k_x - k_y$  de la Figura 6.a. En equilibrio, los estados de espín (representados por las flechas) están simétricamente distribuidos a la energía de Fermi, por lo tanto no hay una polarización neta de espín (Figura 6.a). Si se aplica un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  en el plano  $xy$  del GE2D, la carga eléctrica de los portadores fluye en la dirección del campo y los electrones adquieren un cuasi-momento promedio  $\delta\mathbf{k}$ , generando un desplazamiento de los contornos de Fermi dado por

$$\mathbf{k} \longrightarrow \mathbf{k}' = \mathbf{k} + \delta\mathbf{k} \quad \text{con} \quad \delta\mathbf{k} = \frac{e\tau_p}{\hbar} \mathbf{E}, \quad (1)$$

donde  $\tau_p$  es el tiempo de relajación del momento y  $e$  la carga del electrón ( $e < 0$ ). En la sub-banda  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  el campo eléctrico induce transferencia de cargas de  $-k_x$  a  $k_x$  y de espín hacia arriba a espín hacia abajo, de tal forma que se produce una corriente de carga y una polarización de espín. Por otro lado, la sub-banda  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  contribuye a la corriente de carga pero también cancela parcialmente la polarización de espín (Silsbee, 2004). Por lo tanto, un número diferente de espines hacia arriba y espines hacia abajo de portadores contribuyen a la corriente de espín, lo que da lugar a una polarización neta de espín.

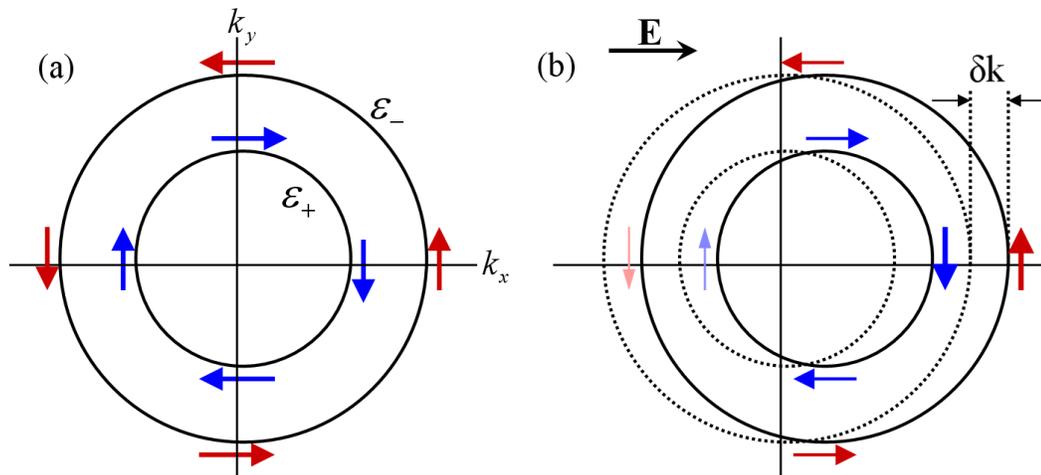


Figura 6: Esquema de los contornos de Fermi y la distribución de los estados de espín (representados por las flechas) en (a) equilibrio y en (b) respuesta a un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  que se aplica en el plano  $xy$  de un GE2D con acoplamiento Rashba, donde  $\delta\mathbf{k} = e\tau_p\mathbf{E}/\hbar$  y  $\tau_p$  es el tiempo de relajación del momento (Silsbee, 2004).

### 2.3 Efecto Hall de espín inducido térmicamente

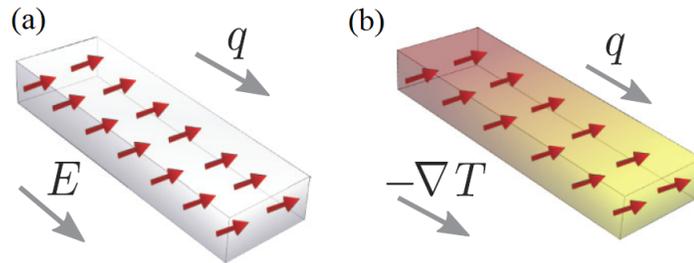
Además del efecto Hall, existen otros efectos tipo Hall pero generados por un gradiente de temperatura, uno de ellos es el *efecto Hall de espín inducido térmicamente*, conocido también como *efecto Nernst de espín*, el cual se discutirá a continuación.

Si se aplica un gradiente de temperatura en un conductor bajo la influencia de un campo magnético perpendicular, se puede inducir un voltaje o un campo eléctrico transversal al gradiente de temperatura y al campo magnético. Este voltaje se conoce como voltaje Nernst  $V_N$ . En otras palabras, el efecto Nernst consiste en la generación de un voltaje transversal a un gradiente de temperatura en presencia de un campo magnético perpendicular a ambos (Figura 1.c). Ciertamente, el efecto Nernst es generado por un gradiente de temperatura, mientras que el efecto Hall es un efecto similar pero generado por un campo eléctrico. En este sentido, al efecto Nernst se le considera el análogo térmico del efecto Hall (Nolas et al., 2001).

Así, tomando en cuenta la existencia del efecto Hall de espín vía la IEO, resulta natural preguntarse si es posible un correspondiente efecto Hall de espín inducido térmicamente a través de la IEO, fenómeno conocido también como *efecto Nernst de espín*. Este problema ha sido abordado recientemente por algunos autores (Cheng et al., 2008; Liu et al., 2010; Ma, 2010) quienes han propuesto la generación de una corriente transversal de espín por un gradiente de temperatura en un GE2D con IEO tipo Rashba (Figura 1.d). De la misma forma, se ha propuesto la generación de una polarización de espín inducida por un gradiente de temperatura en un GE2D en presencia sólo del acoplamiento Rashba (Wang et al., 2010; Dyrdal et al., 2013) o sólo con acoplamiento Dresselhaus[001] lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$  (Wang et al., 2009), como se ilustra en la Figura 7. En esta tesis estudiaremos precisamente estos efectos termoespintrónicos y los extenderemos al caso de un GE2D en presencia simultánea de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus, caso que hasta la fecha no ha sido estudiado en detalle. Este análisis se discutirá en los siguientes capítulos.

Hasta ahora hemos descrito el efecto Hall de espín y el fenómeno de la orientación de espines por campos eléctricos, así como sus correspondientes análogos térmicos. No obstante, hay una variedad de fenómenos termoespintrónicos donde la interacción del espín con co-

rrientes de calor desempeña un papel crucial. Uno de estos fenómenos es el efecto Seebeck de espín, cuya observación experimental en 2010 despertó el reciente interés en el campo de la termoespintrónica. Este fenómeno se describirá a continuación.



**Figura 7:** Ilustración esquemática de la polarización de espín inducida por un (a) campo eléctrico o un (b) gradiente de temperatura (Dyrdal et al., 2013).

## 2.4 Efecto Seebeck

En 1821, T. J. Seebeck observó que cuando dos materiales diferentes se unen y estas uniones se encuentran a diferentes temperaturas  $T$  y  $T + \Delta T$ , se produce una diferencia de potencial  $\Delta V$  que es proporcional a la diferencia de temperatura  $\Delta T$ . La razón del voltaje producido y el gradiente de temperatura,  $\Delta V/\Delta T$ , está relacionado a una propiedad intrínseca de los materiales llamada *coeficiente Seebeck*  $S$ . Este coeficiente es muy pequeño en metales (sólo algunos  $\mu\text{V}/\text{K}$ ) y es mayor en semiconductores (algunos cientos de  $\mu\text{V}/\text{K}$ ) (Nolas et al., 2001). Este fenómeno se conoce como *efecto Seebeck* o *termopotencia* y es el mecanismo básico de funcionamiento de un termopar.

Este efecto también se puede presentar en una barra metálica, eléctricamente aislada, que es calentada en uno de sus extremos y enfriada en el otro extremo (Figura 8.a). Los electrones en la región caliente son más energéticos y por lo tanto tienen velocidades mayores que aquellos en la región fría, esto produce una difusión neta de electrones del extremo caliente hacia el extremo frío y por tanto una acumulación de electrones en la región fría y de iones positivos en la región caliente. Esta situación prevalece hasta que el campo eléctrico, conocido como *campo termoeléctrico*, formado entre los iones positivos de la región caliente y el exceso de electrones en la región fría impide el movimiento de electrones del extremo caliente al extremo frío. Por lo tanto, se genera un voltaje entre los extremos caliente y frío.

El efecto Seebeck consiste precisamente en la generación de una diferencia de potencial  $\Delta V$  a través de la barra metálica debido a la diferencia de temperatura  $\Delta T$  (Callen, 1981).

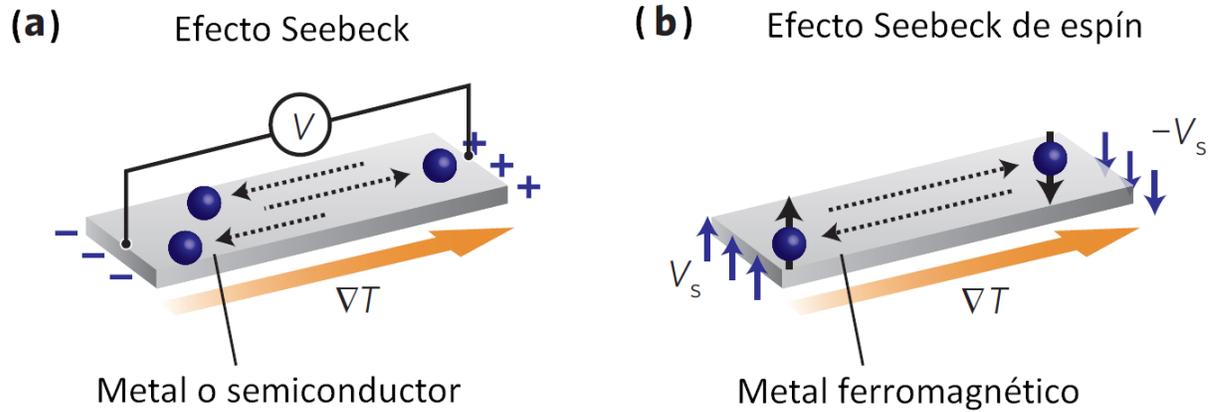


Figura 8: (a) Ilustración esquemática del efecto Seebeck: un gradiente de temperatura  $\nabla T$  en un conductor genera una diferencia de potencial  $V$  en la dirección de  $\nabla T$ . (b) Ilustración esquemática del efecto Seebeck de espín: cuando se aplica un  $\nabla T$  en un material magnético, se genera un voltaje de espín  $V_S$  (Uchida et al., 2010).

## 2.5 Efecto Seebeck de espín

En el efecto Seebeck ordinario descrito anteriormente, un gradiente de temperatura en una barra metálica produce que un exceso de electrones se acumule en el extremo frío, esto genera que el potencial químico  $\mu$  dependa de la posición a lo largo del metal, lo cual es observable como un campo eléctrico (Figura 9.a). Por otro lado, en equilibrio térmico, en un ferromagneto la densidad de electrones con espín hacia arriba es mayor que la de los electrones con espín hacia abajo. Por lo tanto, un gradiente de temperatura induce un exceso de electrones con el espín hacia arriba en el extremo frío y un exceso de electrones con el espín hacia abajo en el extremo caliente. Esto produce que sus respectivos potenciales químicos de espín,  $\mu_{\uparrow}$  y  $\mu_{\downarrow}$ , muestren gradientes con pendientes opuestas, cuyo promedio permite obtener el campo eléctrico resultante (Figura 9.b). Los distintos gradientes en  $\mu_{\uparrow}$  y  $\mu_{\downarrow}$  dan lugar a corrientes de electrones con espín hacia arriba y con espín hacia abajo de diferente magnitud que fluyen en el ferromagneto. La diferencia de los potenciales químicos,  $\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ , es llamado voltaje de espín (Uchida et al., 2008).

El efecto Seebeck de espín describe precisamente la generación de un voltaje de espín

inducido por un gradiente de temperatura (Figura 8.b). Este efecto se observó originalmente en un conductor ferromagnético de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  a temperatura ambiente (Uchida et al., 2008). Sin embargo, este efecto no se limita a metales puesto que también se ha observado en aislantes ferromagnéticos (Uchida et al., 2010), así como en semiconductores ferromagnéticos (Jaworski et al., 2010).

En el experimento de Uchida et al. (2008), se utilizó una película ferromagnética de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  y en cada extremo de la película se colocaron alambres de Pt (Figura 9.c). Se aplicó un gradiente de temperatura  $\nabla T$  a lo largo de la dirección  $x$ , producido por una diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los extremos de la película. El voltaje de espín,  $\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$ , que se genera térmicamente en la película ferromagnética induce una corriente de espín que fluye hacia la capa de Pt a través de la interfaz  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ -Pt. La presencia de impurezas magnéticas en el Pt da origen a un mecanismo de IEO extrínseca, de modo que los electrones interactúan con un campo magnético débil circulando alrededor de una impureza cargada. El esparcimiento debido a la impureza cargada produce que los electrones con el espín hacia arriba se acumulen en un extremo del alambre de Pt, mientras que los electrones con espín hacia abajo se acumulen en el extremo opuesto. Por lo tanto, se produce una diferencia de potencial entre los extremos del Pt. Este mecanismo se conoce como *efecto Hall de espín*

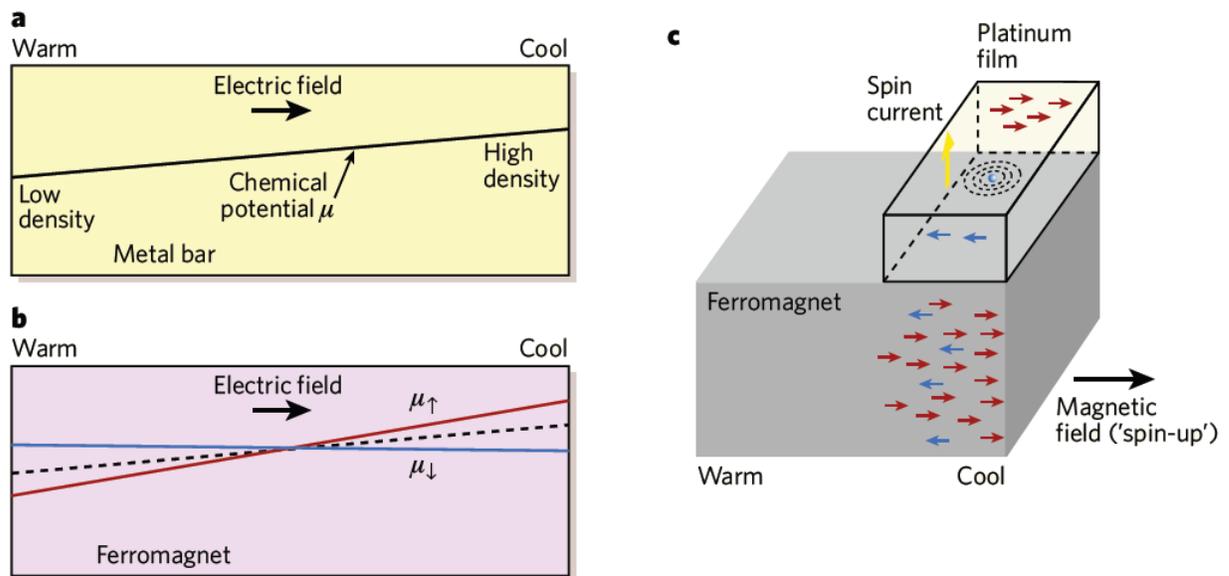


Figura 9: (a) Ilustración del potencial químico  $\mu$  en un metal en el cual se aplica un gradiente de temperatura. (b) Potenciales químicos dependientes del espín,  $\mu_{\uparrow}$  y  $\mu_{\downarrow}$ , en un ferromagneto en presencia de un gradiente de temperatura (Ong,2008).

*inverso*, por el cual una corriente de espín genera una corriente eléctrica transversal. En la Figura 10 se muestra el voltaje  $V$  medido en la capa de Pt como función de la diferencia de temperatura  $\Delta T$ , en donde debido a que el voltaje de espín  $\mu_{\uparrow} - \mu_{\downarrow}$  tiene signos opuestos en los extremos de la capa de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  (Fig. 10.a), el voltaje  $V$  presenta un cambio de signo en cada uno de los extremos (Fig. 10.b y 10.c).

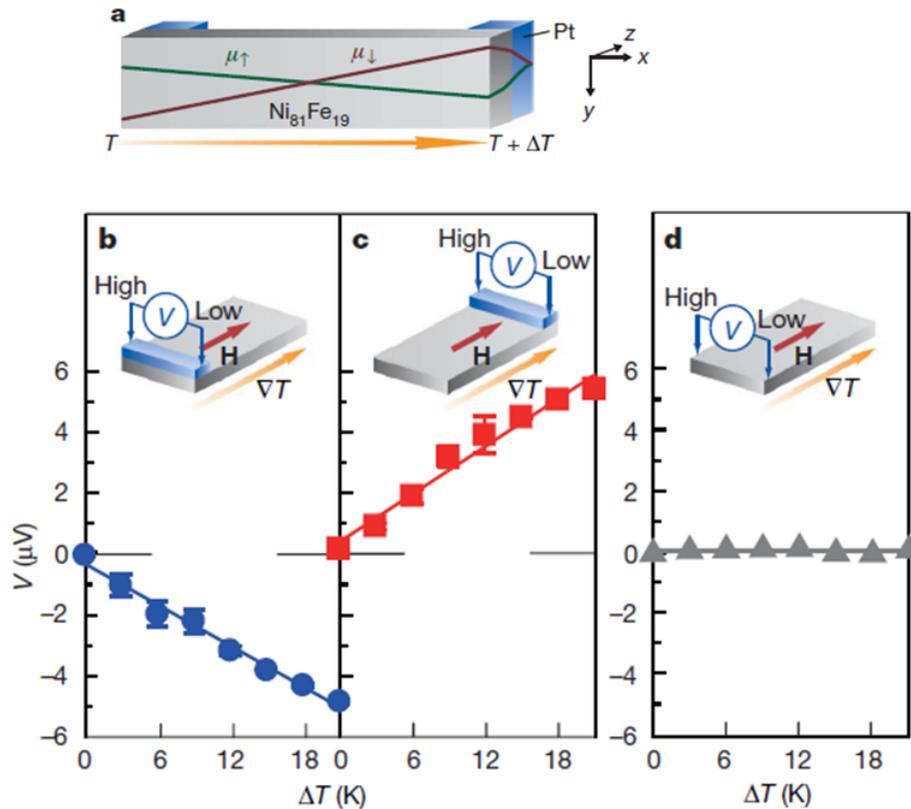


Figura 10: (a) Ilustración de los potenciales químicos dependientes del espín,  $\mu_{\uparrow}$  y  $\mu_{\downarrow}$ , inducidos por un gradiente de temperatura aplicado en una muestra de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ -Pt.  $\Delta T$  denota la diferencia de temperatura entre los extremos de la capa de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ . El voltaje de espín tiene signos opuestos en los dos extremos. Las gráficas (b) y (c) muestran la dependencia en  $\Delta T$  del voltaje  $V$  producido entre los extremos del alambre de Pt unido a la capa de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ , en los extremos de (b) baja temperatura (300 K) y (c) alta temperatura (300 K +  $\Delta T$ ) del  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$ . (d) Caso cuando no hay alambres de Pt sobre la capa de  $\text{Ni}_{81}\text{Fe}_{19}$  (Uchida et al., 2008).

Recientemente, estudios teóricos han propuesto que el efecto Seebeck de espín en materiales ferromagnéticos se debe a la interacción entre los fonones y las excitaciones colectivas de los momentos magnéticos (espines), conocidas como *ondas de espín* o *magnones* (Xiao et al., 2010; Adachi et al., 2010; Adachi et al., 2011; Adachi et al., 2013). Sin embargo, no existe un completo entendimiento del origen de este fenómeno en otro tipo de sistemas y por este motivo se está llevando a cabo una intensa investigación al respecto (Bauer et al., 2012).

Como se mencionó previamente, uno de los primeros dispositivos espintrónicos propuestos es el transistor de espín de efecto de campo de Datta y Das (1990). Este dispositivo está constituido por un GE2D que se forma en la interfaz de una heteroestructura semiconductor. El sistema está acoplado a dos contactos ferromagnéticos que actúan como fuente y colector de espines (Figura 11.a). La fuente inyecta electrones con el espín polarizado que se transportan balísticamente a través del GE2D. Lo que se busca es rotar de manera controlada el espín durante su trayecto hacia el colector, así tendría una mayor probabilidad de ser rechazado por el colector, contribuyendo a que se incremente la resistencia. La idea central del dispositivo es controlar la precesión del espín a través del acoplamiento de Rashba que se genera por la asimetría de inversión estructural del pozo cuántico que confina al GE2D. El parámetro de Rashba  $\alpha$  se puede modular por voltajes externos de compuerta, por lo tanto proporciona una vía de acceso para controlar eléctricamente la conductancia. Recientemente, Alomar et al. (2015) han propuesto un transistor de espín, análogo al transistor de Datta y Das, donde ahora los contactos se encuentran a diferentes temperaturas (Figura 11.b). De esta manera el gradiente de temperatura induciría en el GE2D una diferencia de potencial  $V$  y una corriente de espín debido a los efectos Seebeck y Seebeck de espín, respectivamente.

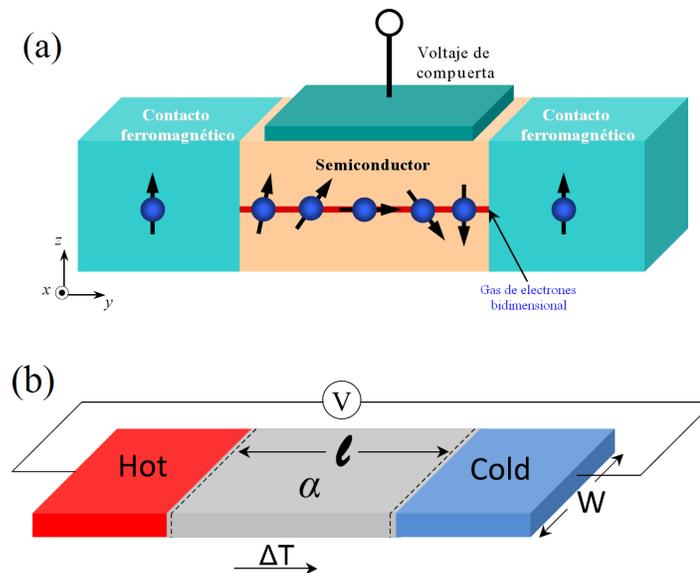


Figura 11: (a) Esquema del transistor de espín de efecto de campo propuesto por Datta y Das. (b) Transistor de espín propuesto por Alomar et al. (2015), donde  $\alpha$  es el parámetro de Rashba y  $l$  es la longitud de la región central donde el acoplamiento Rashba es constante. El transporte electrónico es inducido por una diferencia de potencial  $V$ , la cual se aplica a través de las uniones o es generada por la diferencia de temperatura  $\Delta T$  entre los contactos.

En general, en el estudio de los fenómenos termoespintrónicos un aspecto que no ha sido analizado en detalle es la contribución de la IEO intrínseca. Las investigaciones realizadas hasta ahora se han restringido principalmente al caso del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba (Cheng et al., 2008; Ma, 2010; Liu et al., 2010; Wang et al., 2010; Dyrdal et al., 2013; Borge et al., 2013; Alomar et al., 2015). No obstante, la anisotropía que resulta de la presencia conjunta de la IEO tipo Rashba y tipo Dresselhaus (como se observa en la Figuras 3, 4 y 5) abre la posibilidad de acceder a los estados de espín mediante variaciones de la frecuencia y dirección del campo aplicado, además de la conocida modulabilidad del parámetro de Rashba.

### 3. Interacción espín-órbita en semiconductores

---

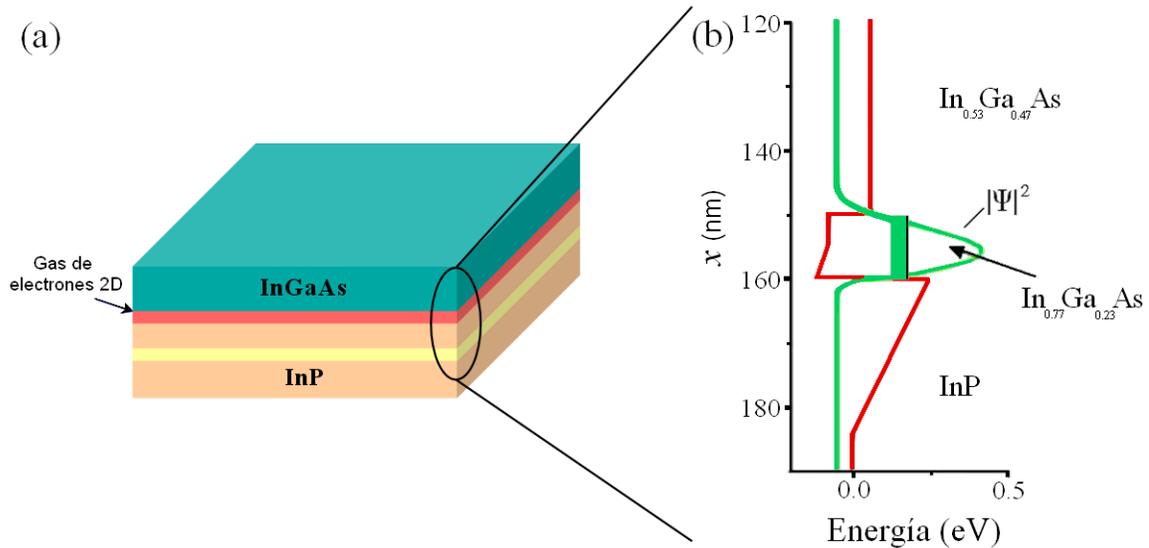
Como se mencionó en el capítulo anterior, el acoplamiento espín-órbita es un mecanismo alternativo importante que permite tener acceso al control del espín del electrón de manera no magnética, lo que da lugar a distintos efectos termoespintrónicos. Por tal motivo, en este capítulo se presentan las propiedades espectrales del estado base de un gas de electrones bidimensional formado en la interfaz de ciertas heteroestructuras semiconductoras, en presencia del acoplamiento tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se analizan los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras crecidas en las principales direcciones cristalográficas: [001], [111] y [110]. Estas propiedades son necesarias en teoría de perturbaciones; a primer orden, la respuesta inducida se calcula a partir de los estados de equilibrio, como se verá en el Capítulo 4.

#### 3.1 Interacción espín-órbita en pozos cuánticos

El estudio de los fenómenos que dependen del espín se ha centrado principalmente en los sistemas de estado sólido. En particular, la investigación en materiales semiconductores resulta importante por la enorme experiencia en tecnología de sistemas semiconductores que se aplica en la electrónica convencional desde el siglo pasado, y por la existencia de técnicas altamente sofisticadas de crecimiento de cristales, tales como la epitaxia de haces moleculares y el depósito químico de vapores metal-orgánicos. Estas técnicas empleadas en la fabricación de semiconductores han hecho posible desarrollar dispositivos de estado sólido que se comportan como sistemas de dos, una o cero dimensiones, llamados sistemas de baja dimensionalidad.

Una de las principales aplicaciones de los sistemas de dimensionalidad reducida en la fabricación de dispositivos semiconductores son las estructuras cristalinas artificiales, un ejemplo notable son las heteroestructuras semiconductoras (Figura 12.a). En la interfaz de estos sistemas se forman de manera controlada pozos cuánticos que albergan una densidad de electrones del orden de  $10^{12} \text{ cm}^{-2}$ , cuyo movimiento en la dirección de crecimiento de la heteroestructura está cuantizado, mientras que en el plano perpendicular a la dirección de crecimiento se mueven de manera libre (Figura 12.b). Cuando el ancho del pozo es suficientemente angosto (7-15 nm) se forma un gas de electrones bidimensional (GE2D), y debido

a que los electrones se encuentran confinados a un espacio cuasi-bidimensional sólo pueden moverse libremente en el plano del gas. Se ha observado que el confinamiento cuántico en ciertos semiconductores causa un incremento significativo en la magnitud de la IEO (Davies, 1998).



**Figura 12:** (a) Ilustración esquemática de una heteroestructura semiconductor de  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}/\text{InP}$ . El gas de electrones bidimensional está localizado en una capa de  $\text{In}_{0.77}\text{Ga}_{0.23}\text{As}$  de 10 nm de espesor. La barrera inferior del pozo cuántico está formada por una capa de InP, mientras que para la capa superior se usa una capa de  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$  de 70 nm. (b) Perfil de la banda de conducción y el pozo cuántico asimétrico donde se forma el gas de electrones (Heide et al., 2006).

En ausencia de un campo magnético, la presencia conjunta de las simetrías de inversión espacial y temporal en semiconductores da como resultado una doble degeneración de los estados electrónicos. La simetría de inversión espacial invierte el vector de onda  $\mathbf{k}$  en  $-\mathbf{k}$ , pero no altera la dirección del espín ( $\uparrow$  o  $\downarrow$ ), de tal forma que para cada dirección de éste la energía está degenerada; esto quiere decir que para dos sub-bandas de energía  $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow)$  y  $\varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$ , se tiene que  $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(-\mathbf{k}, \uparrow)$ . Por otro lado, debido a la simetría de inversión temporal un estado con espín  $\uparrow$  y vector de onda  $\mathbf{k}$  está degenerado con el estado con espín  $\downarrow$  y vector de onda  $-\mathbf{k}$ , esto es,  $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(-\mathbf{k}, \downarrow)$ , conocida como la degeneración de Kramers del estado de una sola partícula (Winkler, 2003). Cuando ambas operaciones de simetría se combinan dan como resultado la doble degeneración de la energía de una sola partícula,  $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) = \varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$ , la cual implica que para cada  $\mathbf{k}$  la energía no depende del estado de espín.

Existen dos formas de romper esta degeneración en el espín. Una de ellas es anular solo la simetría de inversión temporal aplicando un campo magnético externo. La otra es cancelar la simetría de inversión espacial con un campo eléctrico externo. La ausencia de ambas simetrías implica que  $\varepsilon(\mathbf{k}, \uparrow) \neq \varepsilon(\mathbf{k}, \downarrow)$  (Winkler, 2003). Sin embargo, los semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda son no centrosimétricos; esto quiere decir que en estos materiales se rompe la degeneración de los estados de espín incluso en la ausencia de cualquier campo externo.

En un GE2D, los estados electrónicos están doblemente degenerados en ausencia de un campo magnético externo. Al aplicar un campo, esta degeneración se rompe (Winkler, 2003). Sin embargo, se ha encontrado que en ciertos semiconductores con estructura cristalina tipo zincblenda, donde los electrones se mueven a través de potenciales asimétricos espacialmente, se rompe la degeneración de los estados de espín incluso en la ausencia de campos magnéticos externos (Dresselhaus, 1955). La falta de simetría de inversión en los semiconductores da origen a distintos mecanismos de IEO.

Un mecanismo importante de IEO se origina cuando el potencial que confina al GE2D al plano  $xy$  no es simétrico a lo largo de la dirección de crecimiento, propiedad conocida como asimetría de inversión estructural del potencial de confinamiento (Figura 12.b). La falta de simetría espacial del potencial que confina al GE2D da origen al acoplamiento espín-órbita de Rashba (Bychkov et al., 1984) y está descrito por el Hamiltoniano

$$H_R = \alpha(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) , \quad (2)$$

donde  $\alpha$  es un parámetro de IEO, llamado parámetro de Rashba, y  $\sigma_i$  son las matrices de espín de Pauli. La magnitud de  $\alpha$  puede modularse experimentalmente con un voltaje externo de compuerta, el cual puede servir para cambiar el potencial preexistente de confinamiento (Nitta et al., 1997; Schäpers et al., 1998). En distintos materiales con densidades electrónicas de  $n = 0.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  se han estimado experimentalmente valores de  $\alpha = 0.6 \times 10^{-11} \text{ eVm}$ , cuando  $n = 2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  se tiene que  $\alpha = 4 \times 10^{-11} \text{ eVm}$  (Nitta et al., 1997) y para densidades electrónicas de  $n = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$  se reporta un valor de  $\alpha = 3 \times 10^{-12} \text{ eVm}$  (Nitta et al., 2009).

Existe otro mecanismo importante de IEO que aparece como resultado de la asimetría de inversión en el bulto de ciertas estructuras cristalinas tipo zincblenda. Este efecto es conocido como acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus (1955). Para electrones en la banda de conducción, la contribución al Hamiltoniano espín-órbita de menor orden en  $\mathbf{k}$  está dada por

$$H_D^{3d} = \beta_3 [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (3)$$

donde  $\beta_3$  es un parámetro efectivo de acoplamiento y  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$  (Dresselhaus, 1955; Winkler, 2003). En semiconductores con estructura zincblenda como el GaAs se han encontrado valores de  $\beta_3 = 17 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Hao, 2012) y  $\beta_3 = 24 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Poshakinskiy et al., 2013), en InAs se han reportado valores de  $\beta_3 = 42 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Poshakinskiy et al., 2013) y  $\beta_3 = 130 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Perel' et al., 2003), en GaSb se tiene que  $\beta_3 = 170 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Poshakinskiy et al., 2013), mientras que en pozos cuánticos formados en heteroestructuras de InAs/InSb se reporta que  $\beta_3 = 100 \text{ eV}\text{\AA}^3$  (Wang et al., 2009). Este acoplamiento produce un desdoblamiento de los estados de espín proporcional a  $k^3$  para valores pequeños de  $k$  en el bulto, a diferencia del desdoblamiento de los estados de espín lineal en  $k$  producido por el acoplamiento Rashba (1). Si el semiconductor cristalino se reduce a un sistema cuasi-bidimensional, en el cual se forma un pozo cuántico, la componente del vector de onda normal al pozo se cuantiza como  $k_z \sim (\pi/L_z)$ , donde  $L_z$  es el ancho del pozo, de tal forma que los electrones sólo se pueden mover libremente en el plano  $xy$ . Si el pozo cuántico es suficientemente angosto (7-15 nm) tal que  $(\pi/L_z) \gg k_{||}$ , entonces el desdoblamiento de los estados de espín producido por la asimetría de inversión en el bulto será proporcional a  $\Delta_D^{3d} \sim \beta_3 (\pi/L_z)^2 k_{||}$  (D'yakonov et al., 1986; Luo et al., 1990). En esta clase de sistemas, el acoplamiento Dresselhaus es sensible a la orientación de crecimiento del pozo con respecto a los ejes cristalográficos. Un aspecto notable es que a diferencia del acoplamiento Rashba que se puede modular externamente por voltajes de compuerta, el acoplamiento Dresselhaus es intrínseco a cada material por lo que no se puede modificar por campos externos. La intensidad de este acoplamiento puede ser del orden o menor que la del acoplamiento Rashba, dependiendo del material.

### 3.2 Hamiltoniano de interacción espín-órbita

Como se mencionó previamente, en un GE2D los electrones se encuentran confinados en un plano perpendicular a la dirección de crecimiento de la heteroestructura y sólo pueden

moverse libremente en el plano del gas. Si se considera que  $\hat{\mathbf{z}}$  es la dirección de crecimiento, el Hamiltoniano  $H$  de un electrón que se encuentra en el gas se puede escribir como

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + H_{so}, \quad (4)$$

donde  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$  es el vector de onda bidimensional del electrón,  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$  es la energía cinética debida al movimiento libre de los electrones en el plano  $xy$  del gas y  $H_{so}$  es el término que describe la IEO. Dicha interacción actúa sobre el espín de los electrones como un campo magnético efectivo  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ , conocido como *campo espín-órbita*, que depende del vector de onda  $\mathbf{k}$  y alrededor del cual el espín del electrón precesa (Winkler, 2003). El acoplamiento del espín con el campo  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  da como resultado un Hamiltoniano que se puede representar como uno de tipo Zeeman, de tal forma que  $H_{so}$  se puede escribir como

$$H_{so} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}), \quad (5)$$

donde  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  es el vector de las matrices de Pauli y  $\hbar\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})/2 = (\hbar/2)(\Omega_x\hat{\mathbf{x}} + \Omega_y\hat{\mathbf{y}} + \Omega_z\hat{\mathbf{z}})$ . Por lo tanto, el Hamiltoniano (4) se puede escribir como

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Omega}(\mathbf{k}), \quad (6)$$

o bien en forma matricial,

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{2}\Omega_z & \frac{\hbar}{2}(\Omega_x - i\Omega_y) \\ \frac{\hbar}{2}(\Omega_x + i\Omega_y) & \varepsilon_0(\mathbf{k}) - \frac{\hbar}{2}\Omega_z \end{pmatrix}. \quad (7)$$

De aquí se obtiene que los valores propios de la energía están dados por

$$\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \nu \frac{\hbar}{2} |\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})|, \quad \nu = \pm 1 \quad (8)$$

Este espectro de energía tiene la forma de sub-bandas determinadas por el índice  $\nu = \pm 1$ . El doble signo de las soluciones muestra que la presencia del campo espín-órbita rompe la degeneración de los estados de espín para vectores de onda finitos ( $\mathbf{k} \neq 0$ ).

Similarmente, del Hamiltoniano (7) se obtiene que los eigenestados  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  están dados por

$$|\nu\mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} N_\nu(\mathbf{k}) \\ \nu N_{-\nu}(\mathbf{k}) e^{i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}, \quad (9)$$

con

$$N_\nu(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{\Omega + \nu\Omega_z}{2\Omega}}, \quad \tan \phi(\mathbf{k}) = \frac{\Omega_y}{\Omega_x}, \quad (10)$$

donde  $\Omega = |\boldsymbol{\Omega}|$ ,  $\Omega_{||} = |\boldsymbol{\Omega}_{||}| = |\Omega_x \hat{\mathbf{x}} + \Omega_y \hat{\mathbf{y}}|$ . Además, es posible escribir los eigenestados de  $(\hbar/2)\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  como

$$|+\mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\Theta}{2} \\ \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\Phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix}, \quad |-\mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\Theta}{2} \\ -\cos \frac{\Theta}{2} e^{i\Phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix} \quad (11)$$

donde  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  es un vector cuya dirección está determinada por los ángulos polar  $\Theta$  y azimutal  $\Phi$  (Figura 13), definidos por

$$\tan \frac{\Theta}{2} = \sqrt{\frac{\Omega_x - \Omega_z}{\Omega_x + \Omega_z}}, \quad e^{i2\Phi(\mathbf{k})} = \frac{\Omega_x + i\Omega_y}{\Omega_x - i\Omega_y}. \quad (12)$$

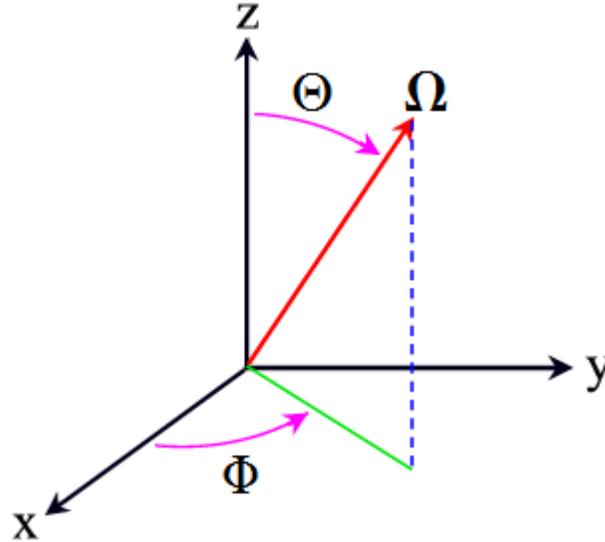


Figura 13: Representación del campo espín-órbita  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ .

La orientación del espín en el estado  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  depende de  $\mathbf{k}$  y está determinada por el valor

esperado del vector  $\boldsymbol{\sigma}$ ,

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\nu &\equiv \frac{\hbar}{2} \langle \nu \mathbf{k} | \boldsymbol{\sigma} | \nu \mathbf{k} \rangle \\ &= \nu \frac{\hbar}{2} \frac{\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})}{|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|} . \end{aligned} \quad (13)$$

Esto quiere decir que para una energía constante  $E$ , se tiene que  $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\nu \parallel \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  para aquéllas  $\mathbf{k}$  que satisfacen la condición  $\varepsilon_\nu(\mathbf{k}) = E$ . Por este motivo podemos interpretar la IEO como un campo magnético efectivo  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  al que se alinean los espines y produce un desdoblamiento de los estados de espín tipo Zeeman pero en el espacio  $\mathbf{k}$ . Podría preguntarse si este campo produce una polarización espontánea de espín. En este sentido, debido a que la magnitud y dirección de  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  varían con  $\mathbf{k}$ , para un vector de onda dado es posible encontrar una dirección local en el espacio  $\mathbf{k}$  para la orientación de espín. Promediando sobre todas las contribuciones de  $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda$  se obtiene que

$$\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = 0 , \quad (14)$$

esto quiere decir que  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  produce un número igual de estados con espín hacia arriba y espín hacia abajo, por lo tanto la interacción espín-órbita no genera una polarización espontánea de espín. Por el contrario, si existiera una dirección de cuantización fija para todos los valores de  $\mathbf{k}$ , en consecuencia habría una magnetización macroscópica orientada a lo largo de esa dirección.

La forma específica del campo espín-órbita  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  está determinada por el tipo de IEO presente en el GE2D. Como se discutió en la sección previa, en el caso particular del acoplamiento lineal de Dresselhaus,  $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$  también dependerá de la dirección de crecimiento del pozo cuántico. Por tal motivo, en las siguientes secciones se discutirán las propiedades espectrales de un GE2D en presencia del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en  $\mathbf{k}$  para las principales direcciones cristalográficas de crecimiento  $[hkl]$ . Usaremos la notación compacta  $R+D[hkl]$  para indicar la presencia conjunta de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus  $[hkl]$  lineal correspondiente a la dirección cristalográfica  $[hkl]$ .

### 3.3 Acoplamiento espín-órbita lineal

Si consideramos sólo la IEO lineal en  $\mathbf{k}$ , el campo espín-órbita se puede escribir en forma general como (Raichev, 2007; Iglesias et al., 2010)

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_i = \lambda_{ij}k_j \quad (i, j = x, y, z), \quad (15)$$

donde usamos la convención de suma sobre índices repetidos y  $\lambda_{ij} = (\hbar/2)\partial\Omega_i/\partial k_j$  es una matriz que está determinada sólo por los parámetros de acoplamiento. Para pozos cuánticos crecidos a lo largo de las direcciones [001], [110] y [111], esta matriz toma la forma

$$\lambda_{ij} = \begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & \alpha & 0 \\ -\alpha & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\alpha} & 0 \\ -\tilde{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (16)$$

respectivamente, donde  $\alpha$  es el parámetro de Rashba,  $\beta_{[hkl]}$  es el parámetro de Dresselhaus para un pozo cuántico crecido en la dirección cristalográfica  $[hkl]$  y  $\tilde{\alpha} = \alpha + \beta_{[111]}$ . Para un pozo crecido en la dirección [001] el sistema de coordenadas  $x, y, z$  es  $x \parallel [100]$ ,  $y \parallel [010]$ ,  $z \parallel [001]$ ; en la dirección [110] es  $x \parallel [\bar{1}10]$ ,  $y \parallel [001]$ ,  $z \parallel [110]$ ; y en la dirección [111] es  $x \parallel [11\bar{2}]$ ,  $y \parallel [\bar{1}10]$ ,  $z \parallel [111]$  (Cartoixà et al., 2005).

En particular, de la ecuación (16) podemos ver que en presencia del acoplamiento conjunto R+D[111], la matriz  $\lambda_{ij}$  es fórmalmente idéntica al caso cuando sólo hay acoplamiento Rashba ( $\beta_{[hkl]}=0$ ). Esto implica que todos los resultados que se obtienen en presencia del acoplamiento Rashba también se mantienen cuando se tiene acoplamiento R+D[111], sólo es necesario hacer la sustitución del parámetro  $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha}$ .

Además, la magnitud del campo espín-órbita (15) está dada por

$$\frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}) = \sqrt{\lambda_{ij}\lambda_{il}k_jk_l}. \quad (17)$$

Es posible escribir esta expresión en coordenadas polares  $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = k(\cos\theta, \sin\theta)$  en la forma

$$\frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}) = k \Delta(\theta), \quad (18)$$

donde la función angular  $\Delta(\theta)$  queda dada por

$$\Delta^2(\theta) = (\lambda_{xx}^2 + \lambda_{yx}^2 + \lambda_{zx}^2) \cos^2 \theta + (\lambda_{xy}^2 + \lambda_{yy}^2 + \lambda_{zy}^2) \sin^2 \theta + 2(\lambda_{xx}\lambda_{xy} + \lambda_{yx}\lambda_{yy} + \lambda_{zx}\lambda_{zy}) \sin \theta \cos \theta, \quad (19)$$

explícitamente

$$\Delta(\theta) = \begin{cases} \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta}, & \text{R + D[001]} \\ \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} \cos^2 \theta, & \text{R + D[110]} \\ \tilde{\alpha}, & \text{R + D[111]} \end{cases} \quad (20)$$

Consideremos ahora las eigenenergías dadas por la ecuación (8). Resulta conveniente escribir el espectro de energía (8) en coordenadas polares como

$$\varepsilon_\nu(k, \theta) = \frac{\hbar^2}{2m^*} [k + \nu k_{so}(\theta)]^2 - \frac{\hbar^2}{2m^*} k_{so}^2(\theta), \quad (21)$$

donde  $k_{so}(\theta) \equiv m^* \Delta(\theta) / \hbar^2$ . Escrita de esta forma, la ecuación (21) representa la ecuación de dos superficies que semejan dos paraboloides desplazados. Además, al sustituir (18) en la ecuación (8) se obtiene que la separación entre las sub-bandas es

$$\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| = 2k\Delta(\theta). \quad (22)$$

En el estado base, es decir a temperatura absoluta  $T = 0$ , las sub-bandas  $\varepsilon_\nu(k, \theta)$  están llenas hasta la misma energía de Fermi  $\varepsilon_F > 0$ . El contorno de Fermi es la curva de energía constante determinada por  $\varepsilon_\nu(k, \theta) = \varepsilon_F$ . Al nivel de Fermi cada sub-banda  $\varepsilon_+(k, \theta)$  y  $\varepsilon_-(k, \theta)$  tiene un vector de onda distinto,  $k_F^+(\theta)$  y  $k_F^-(\theta)$  respectivamente, determinados por la condición  $\varepsilon_\nu(k_F^\nu(\theta), \theta) = \varepsilon_F$ , a partir de la cual se tiene que

$$k_F^\nu(\theta) = \sqrt{k_F^2 + k_{so}^2(\theta)} - \nu k_{so}(\theta). \quad (23)$$

donde  $k_F = \sqrt{2m^*\varepsilon_F/\hbar^2}$ . La energía de Fermi está dada por  $\varepsilon_F = \hbar^2(k_0^2 - 2\kappa_{so}^2)/2m^*$ , donde  $k_0 = \sqrt{2\pi n}$  es el vector de Fermi de un GE2D degenerado en espín con densidad electrónica  $n$  y  $\kappa_{so} = m^* \sqrt{\lambda_{ij}\lambda_{ij}}/2/\hbar^2$ .

### 3.3.1 Rashba+Dresselhaus[001]

A partir de la ecuación (20) podemos ver que la función  $\Delta(\theta)$  es constante cuando se tiene acoplamiento Rashba ( $\alpha \neq 0$  y  $\beta_{[001]} = 0$ ), Dresselhaus[001] ( $\alpha = 0$  y  $\beta_{[001]} \neq 0$ ), o la presencia conjunta del acoplamiento R+D[111].

Consideremos primero el caso cuando sólo se tiene acoplamiento Rashba, de modo que  $\Delta(\theta) = \alpha$  y  $k_{so} = m^*\alpha/\hbar^2$ . En este caso, la ecuación (21) describe dos superficies que semejan dos paraboloides desplazados, que están igualmente separados en las distintas direcciones en el espacio  $\mathbf{k}$ , es decir, dispersiones isotrópicas en tanto que sólo dependen de la magnitud de  $\mathbf{k}$  y no de su dirección, como se muestra en la Figura 14.a. En este sentido, de (22) vemos que la separación entre las sub-bandas es  $\varepsilon_+(k) - \varepsilon_-(k) = 2\alpha k$ . Cabe destacar que la profundidad de la parte negativa de  $\varepsilon_-(k)$  está determinada por la energía característica  $\varepsilon_R \equiv \hbar^2 k_{so}^2 / 2m^*$  (Figura 14.b). Por otro lado, los contornos de Fermi son círculos concéntricos descritos por la ecuación (23), lo cual se ilustra en el plano  $k_x - k_y$  de la Figura 14.a.

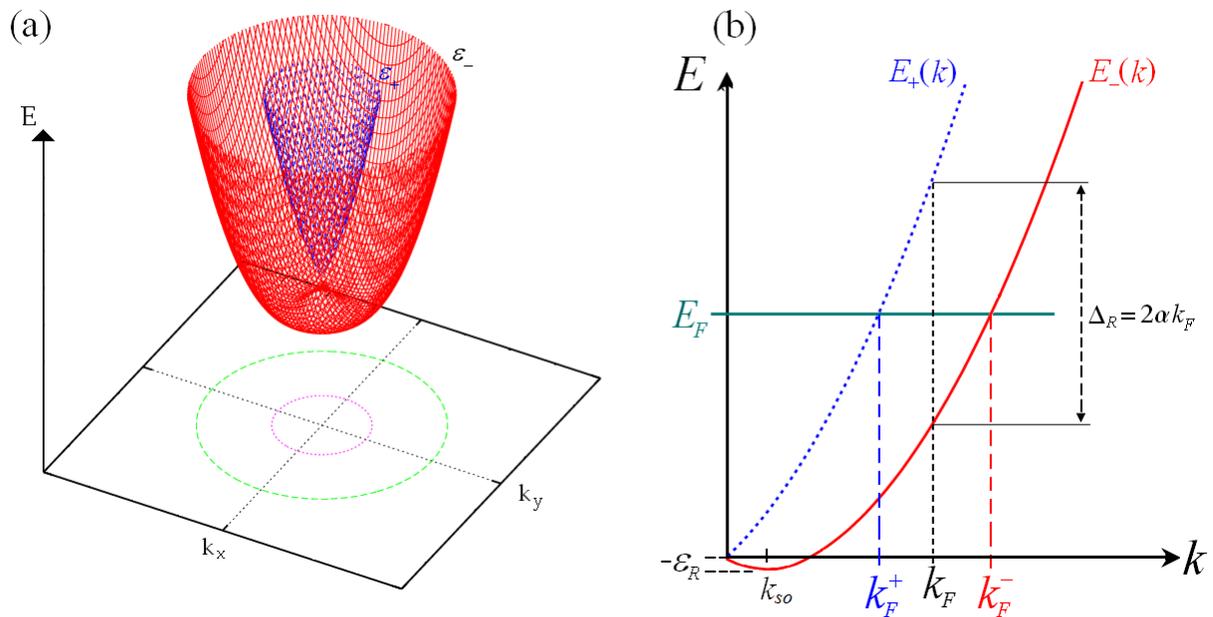


Figura 14: (a) Esquemas de las sub-bandas de energía  $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$  de un GE2D con acoplamiento Rashba. (b) Al nivel de Fermi se tienen dos vectores de Fermi característicos  $k_F^+$  y  $k_F^-$ , donde  $k_F^+ < k_F^-$ . La energía del desdoblamiento de los estados de espín está determinada por la cantidad  $\Delta_R = 2\alpha k_F$ . La profundidad de la parte negativa de  $\varepsilon_-(k)$  está dada por  $\varepsilon_R = \hbar^2 k_{so}^2 / 2m^*$

De las ecuaciones (15) y (16) se obtiene que el campo espín-órbita de Rashba  $\mathbf{\Omega}_R(\mathbf{k})$  es

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}_R(\mathbf{k}) = \alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) , \quad (24)$$

esto implica que  $\mathbf{k} \perp \mathbf{\Omega}_R(\mathbf{k})$  y que ambos vectores se encuentran en el plano  $xy$  del GE2D. Por lo tanto, sustituyendo (24) en (13) se obtiene que la orientación del espín está dada por

$$\frac{\hbar}{2}\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\nu = \nu\frac{\hbar}{2}(\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) . \quad (25)$$

En la Figura 15.b se muestra  $\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\nu$  sobre contornos de energía constante en el plano  $k_x - k_y$ , donde se puede ver que efectivamente  $\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\nu \perp \mathbf{k}$ .

Por otro lado, cuando sólo se tiene acoplamiento Dresselhaus[001],  $\Delta(\theta) = \beta_{[001]}$  y el campo espín-órbita  $\mathbf{\Omega}_D^{[001]}$  es

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k}) = \beta_{[001]}(-k_x\hat{\mathbf{x}} + k_y\hat{\mathbf{y}}) , \quad (26)$$

por lo tanto, sustituyendo (26) en (13) se obtiene

$$\frac{\hbar}{2}\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\nu = \nu\frac{\hbar}{2}(-\cos\theta\hat{\mathbf{x}} + \sin\theta\hat{\mathbf{y}}) . \quad (27)$$

Esta orientación se ilustra en la Figura 15.c. Cabe destacar que los acoplamientos Rashba y Dresselhaus[001] producen cualitativamente el mismo desdoblamiento isotrópico de los estados de espín, debido a que en ambos casos  $\Delta(\theta)$  es constante (Figura 15.a). No obstante, la orientación del espín (27) producida por el acoplamiento Dresselhaus[001] es distinta a la del acoplamiento Rashba descrita en la ecuación (25).

Si se toma en cuenta la presencia conjunta de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus[001], de la ecuación (20) se tiene que  $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta}$ , lo cual implica que las relaciones de dispersión (21) dependen de la magnitud y dirección de  $\mathbf{k}$ . En la Figura 15.d se muestran las sub-bandas  $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$  correspondientes al acoplamiento R+D[001], se observa que el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico, a diferencia del desdoblamiento isotrópico producido por el acoplamiento Rashba o Dresselhaus[001] (véase Figura 15.a).

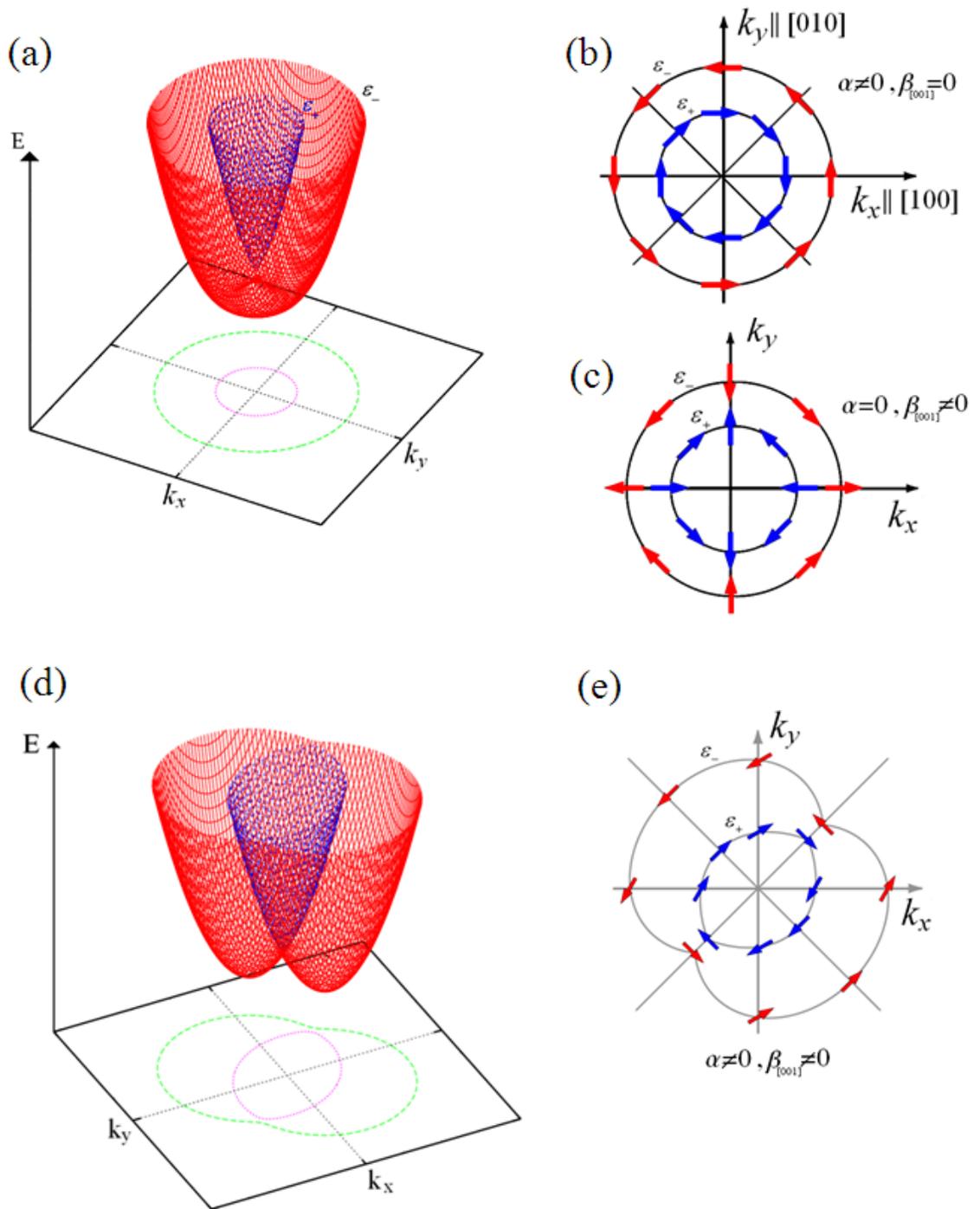


Figura 15: Esquemas de las sub-bandas de energía  $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$  de un GE2D con acoplamiento (a) isotrópico y (d) R+D[001]. Distribución de la orientación del espín en el estado  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  para el caso con acoplamiento (b) Rashba, (c) Dresselhaus[001] y (e) R+D[001]. (Ganichev et al., 2004).

En este caso el campo espín órbita es  $\boldsymbol{\Omega}_{RD}^{[001]} = \boldsymbol{\Omega}_R + \boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}$  y la orientación del espín está dada por

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\nu = \nu \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta(\theta)} \left[ (\alpha - \beta_{[001]} \sin 2\theta) (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) - \beta_{[001]} \cos 2\theta \hat{\mathbf{k}} \right]. \quad (28)$$

En la Figura 15.e se muestra la distribución de la orientación del espín descrita por (28). Se observa que al considerar el acoplamiento R+D[001] la distribución de  $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\nu$  cambia notablemente en comparación con el caso isotrópico (solo Rashba o Dresselhaus[001]).

En el caso particular cuando  $\alpha = \beta_{[001]}$ , se obtiene que  $\Delta(\theta) = \sqrt{2}\alpha |\sin \theta - \cos \theta|$ . Si  $\theta = \pi/4$  o  $5\pi/4$  entonces  $\Delta(\theta) = 0$ , es decir, en esta dirección los estados de espín están degenerados, como se muestra en el plano  $k_x - k_y$  de la Figura 16.

### 3.3.2 Rashba+Dresselhaus[110]

Consideremos ahora el acoplamiento Dresselhaus[110]. De la ecuación (20) se tiene que  $\Delta(\theta) = \beta_{[110]} |\cos \theta|$ , lo que resulta en un desdoblamiento anisotrópico de los estados de

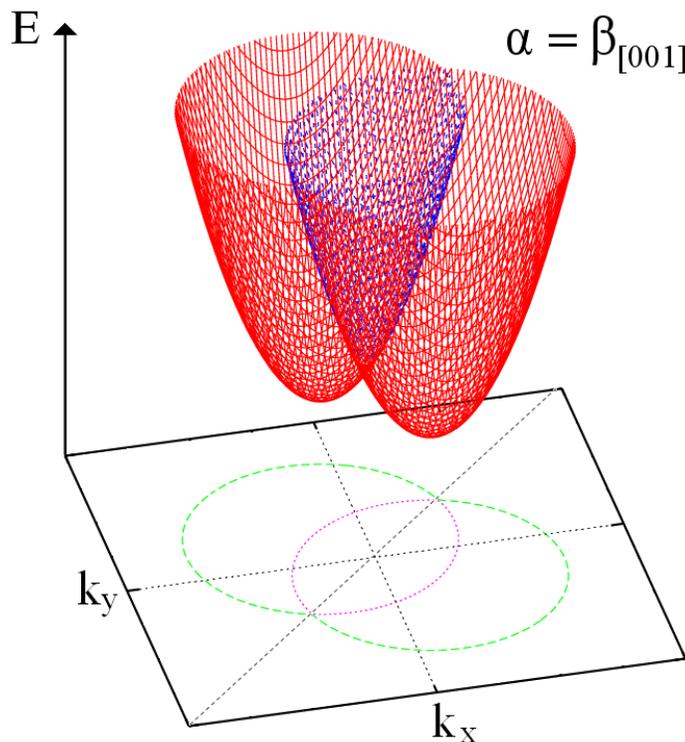
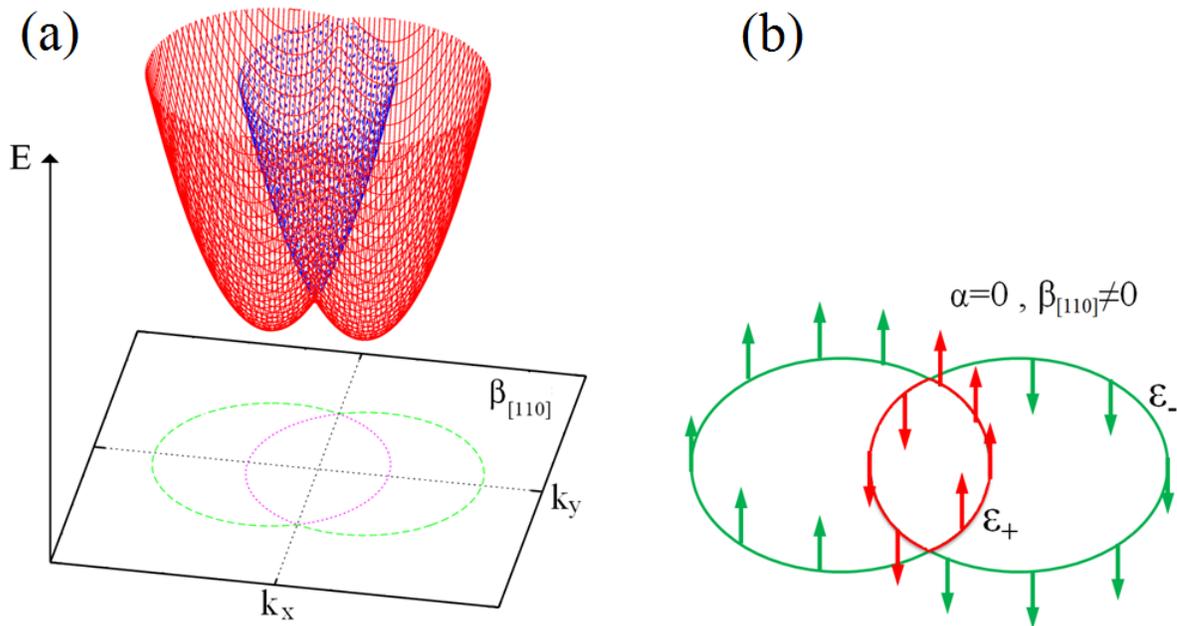


Figura 16: Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[001] cuando  $\alpha = \beta_{[001]}$ .

espín. En particular, en la dirección  $\theta = \pi/2$  o  $3\pi/2$ , los estados de espín están degenerados, tal como se muestra en la Figura 17.a.



**Figura 17:** (a) Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento Dresselhaus<sub>[110]</sub>. (b) Distribución de la orientación del espín en el estado  $|\nu\mathbf{k}\rangle$ .

En este caso, el campo espín-órbita está dado por

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) = \beta_{[110]}k_x\hat{\mathbf{z}}, \quad (29)$$

esto quiere decir que  $\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) \perp \mathbf{k}$  y además  $\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k})$  es perpendicular al plano  $xy$  del GE2D. Puesto que  $\boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k}) \parallel \hat{\mathbf{z}}$ , el espín también está orientado fuera del plano del GE2D a lo largo de la dirección  $\pm\hat{\mathbf{z}}$ , esto es, de la ecuación (29) se obtiene que

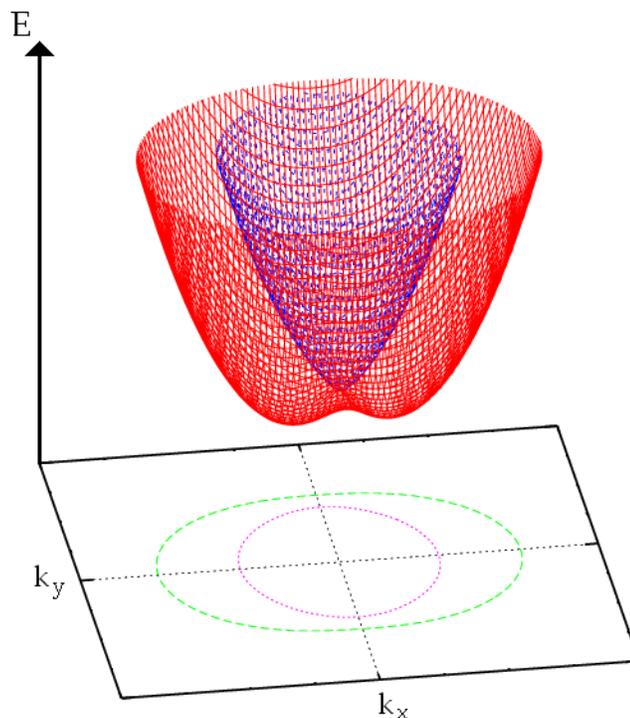
$$\frac{\hbar}{2}\langle\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k})\rangle_\nu = \nu\frac{\hbar}{2}\text{sgn}(k_x)\hat{\mathbf{z}}, \quad (30)$$

donde la función  $\text{sgn}(k_x)$  vale 1 si  $k_x > 0$  y -1 si  $k_x < 0$  (Figura 17.b). Ésta es una diferencia notable con respecto a los campos espín-órbita  $\boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k})$  y  $\boldsymbol{\Omega}_D^{[001]}(\mathbf{k})$ , los cuales sólo tienen componentes en el plano  $xy$  del gas y en consecuencia el espín sólo está orientado en dicho plano.

Si ahora consideramos la presencia conjunta de la interacción espín-órbita R+D[110],  $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta}$ . De nueva cuenta, la dependencia angular de  $\Delta(\theta)$  implica que el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico (Figura 18). El campo espín-órbita es  $\boldsymbol{\Omega}_{RD}^{[110]}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}_R(\mathbf{k}) + \boldsymbol{\Omega}_D^{[110]}(\mathbf{k})$ , por lo tanto, la orientación del espín está dada por

$$\frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\nu = \nu \frac{\hbar}{2} \frac{1}{\Delta(\theta)} \left[ \alpha (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) + \beta_{[110]} \cos \theta \hat{\mathbf{z}} \right]. \quad (31)$$

Este resultado indica que sólo en presencia del acoplamiento Dresselhaus[110] se produce una orientación del espín fuera del plano del GE2D.



**Figura 18:** Esquemas de las sub-bandas de energía de un GE2D con acoplamiento R+D[110].

La generación de una orientación de espines fuera del plano del GE2D es de particular importancia ya que se puede detectar ópticamente con técnicas experimentales, tales como la microscopía de rotación de Kerr o la microscopía de rotación de Faraday (Kato et al., 2004a; Kato et al., 2004b; Sih et al., 2005).

En los siguientes capítulos usaremos los conceptos presentados en este capítulo para estu-

diar distintos fenómenos termoespintrónicos que se llevan a cabo en un GE2D con interacción espín-órbita.

## 4. Respuesta lineal a campos eléctricos y gradientes de temperatura

---

Un campo eléctrico puede inducir como respuesta un flujo de carga, i.e., una corriente eléctrica, o bien una corriente con el espín polarizado (denominada simplemente como corriente de espín). En la teoría de respuesta lineal, dichas corrientes quedan caracterizadas por los tensores de conductividad de carga y de conductividad de espín, respectivamente. En el presente capítulo se amplía este enfoque para incluir la respuesta a un gradiente de temperatura. A partir de la teoría fenomenológica de transporte en régimen lineal, se identifican los coeficientes cinéticos y se evalúan las correspondientes fórmulas de Kubo, para el sistema cuyo Hamiltoniano de equilibrio está dado por la expresión (6).

### 4.1 Teoría fenomenológica de transporte

En procesos irreversibles estacionarios se estudian distintos tipos de flujos o corrientes, tales como la corriente eléctrica, corriente de calor y flujo de materia. Estas corrientes son generadas por fuerzas que surgen por la tendencia de la naturaleza de recobrar el equilibrio una vez que el sistema está fuera de él. En tanto el sistema no se ha llevado muy lejos de su estado de equilibrio, se pueden suponer relaciones lineales entre las corrientes y las fuerzas, esto es

$$J_i = \sum_k L_{ik} \mathcal{F}_k , \quad (32)$$

donde  $J_i$  denota los distintos tipo de corriente y los coeficientes  $L_{ik}$  reciben el nombre de *coeficientes cinéticos o fenomenológicos*, ejemplos de ellos son la conductividad térmica y la conductividad eléctrica. Las cantidades  $\mathcal{F}_k$  se conocen como *fuerzas generalizadas o afinidades* (Callen, 1981). Estas fuerzas pueden ser gradientes de temperatura  $\nabla T$ , campos eléctricos  $\mathbf{E}$  o gradientes de concentración que se expresan como gradientes del potencial químico  $\nabla\mu$ .

Fenomenológicamente, las ecuaciones de transporte en respuesta lineal a un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y a un gradiente de temperatura  $\nabla T$  se pueden escribir en la forma (Ziman, 1972)

$$J_i^{(\xi)} = L_{ij}^{(\xi e)} E_j + L_{ij}^{(\xi q)} \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right) , \quad (33)$$

donde los coeficientes de transporte  $L_{ij}^{(\xi\nu)}$  son tensores con subíndices espaciales  $i, j = x, y$ , mientras que los superíndices  $\nu = e, q$  y  $\xi = e, s, q$  denotan las corrientes inducidas de carga eléctrica (e), de espín (s) y de calor (q), respectivamente. Por ejemplo, la corriente eléctrica  $J_i^{(e)}$  está dada por

$$J_i^{(e)} = L_{ij}^{(ee)} E_j + L_{ij}^{(eq)} \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right), \quad (34)$$

es decir, en el régimen de respuesta lineal, la corriente eléctrica  $J_i^{(e)}$  se puede escribir como la suma de dos contribuciones: una como respuesta a un campo eléctrico y otra como respuesta a un gradiente de temperatura, donde los coeficientes de transporte  $L_{ij}^{(ee)}$  y  $L_{ij}^{(eq)}$  son la conductividad de carga eléctrica y la conductividad termoeléctrica, respectivamente. De manera similar, según (33) la corriente de calor  $J_i^{(q)}$  está dada por

$$J_i^{(q)} = L_{ij}^{(qe)} E_j + L_{ij}^{(qq)} \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right), \quad (35)$$

mientras que la corriente de espín  $J_i^{(s)k}$  está descrita por la relación

$$J_i^{(s)k} = L_{ij}^{(se)k} E_j + L_{ij}^{(sq)k} \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right), \quad (36)$$

aquí introducimos el superíndice  $k = x, y, z$  para indicar la dirección de la orientación del espín. Los coeficientes lineales  $L_{ij}^{(se)k}$  y  $L_{ij}^{(sq)k}$  son las conductividades de espín inducidas eléctrica y térmicamente, respectivamente. Por ejemplo, la conductividad Hall de espín  $L_{yx}^{(se)k}$  describe una corriente de espines polarizados en la dirección  $k$ , que se transportan en la dirección  $y$  como respuesta a un campo eléctrico en la dirección  $x$ .

Por otro lado, desde el punto de vista experimental, cuando se modifican algunos de los parámetros del sistema, otros parámetros específicos se deben mantener bajo control. Por ejemplo, por lo general es más conveniente fijar  $\mathbf{J}^{(e)}$  y  $\nabla T$  y después medir  $\mathbf{E}$  y  $\mathbf{J}^{(q)}$ . En este contexto, las ecuaciones (34), (35) y (36) se pueden escribir como

$$\mathbf{E} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{J}^{(e)} + \mathbf{S} \cdot \nabla T, \quad (37)$$

$$\mathbf{J}^{(q)} = \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{J}^{(e)} - \boldsymbol{\kappa} \cdot \nabla T, \quad (38)$$

$$\mathbf{J}^{(s)k} = (\mathbf{L}^{(se)k} \mathbf{R}) \cdot \mathbf{J}^{(e)} + \mathbf{L}^{(se)k} \mathbf{S} \cdot \nabla T - \frac{1}{T} \mathbf{L}^{(sq)k} \cdot \nabla T, \quad (39)$$

donde los coeficientes tensoriales

$$\mathbf{R} = [\mathbf{L}^{(ee)}]^{-1}, \quad (40)$$

$$\mathbf{S} = \frac{1}{T} [\mathbf{L}^{(ee)}]^{-1} \mathbf{L}^{(eq)}, \quad (41)$$

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{L}^{(qe)} [\mathbf{L}^{(ee)}]^{-1}, \quad (42)$$

$$\boldsymbol{\kappa} = \frac{1}{T} \left( \mathbf{L}^{(qq)} - \mathbf{L}^{(qe)} [\mathbf{L}^{(ee)}]^{-1} \mathbf{L}^{(eq)} \right), \quad (43)$$

se conocen como *resistividad*  $\mathbf{R}$ , *coeficiente Seebeck*  $\mathbf{S}$  (*poder termoeléctrico* o *termopotencia*), *coeficiente Peltier*  $\mathbf{\Pi}$  y *conductividad térmica*  $\boldsymbol{\kappa}$ , respectivamente. Éstas son las cantidades que se miden directamente en los experimentos (Ziman, 1972).

En termodinámica, diferentes corrientes y fuerzas están conectadas por relaciones de reciprocidad. Por ejemplo, en fenómenos termoeléctricos (no dependientes del espín), debido a la relación de reciprocidad de Onsager  $\mathbf{L}^{(eq)} = \mathbf{L}^{(qe)}$ , el coeficiente Peltier está relacionado con el coeficiente Seebeck por

$$\mathbf{\Pi} = T \mathbf{S}, \quad (44)$$

conocida como la relación de Kelvin de la termoelectricidad, que es un caso especial de las relaciones de Onsager de la termodinámica de procesos irreversibles (Ziman, 1972). Se ha propuesto que relaciones similares pueden aplicarse a fenómenos termoeléctricos dependientes del espín (Jacquod, 2012).

## 4.2 Coeficientes termoespintrónicos en el formalismo de Kubo

Al aplicar una perturbación externa a un sistema inicialmente en equilibrio, el sistema responderá a la perturbación en su propia forma característica. Fenómenos como la corriente eléctrica, magnetización y corriente de calor, se producen como respuesta a perturbaciones externas, tales como campos eléctricos, campos magnéticos y gradientes de temperatura, respectivamente. Cuando la magnitud del campo perturbativo es pequeña, la respuesta del sistema es directamente proporcional a la intensidad de la perturbación externa, y bajo esta suposición, se dice que la respuesta es lineal. Dicha respuesta se puede expresar en términos de ciertas funciones de correlación de equilibrio evaluadas en ausencia de la perturbación, esto quiere decir que la respuesta lineal está determinada por las propiedades microscópicas

del sistema en equilibrio.

A continuación usaremos, precisamente, el formalismo de la respuesta lineal con el fin de obtener fórmulas para las conductividades eléctrica, termoeléctrica y de espín, las cuales nos permitirán describir las corrientes eléctrica y de espín que se producen en un GE2D con IEO como respuesta a campos eléctricos y gradientes de temperatura.

Si al tiempo  $t = t_0$  se aplica una perturbación externa  $\hat{H}'(t)$  al GE2D, sacándolo del equilibrio, el Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t) , \quad (45)$$

donde  $\hat{H}_0$  es el Hamiltoniano del sistema antes de aplicar la perturbación. En la representación de interacción, la evolución temporal del valor esperado del operador de corriente  $\hat{J}_i$  a tiempos  $t > t_0$  se puede obtener mediante la fórmula (Kubo, 1957; Il'inskii et al., 1994; Bruus et al., 2004)

$$\langle \hat{J}_i(t) \rangle = \langle \hat{J}_i \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{J}_i(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 , \quad (46)$$

donde  $\langle \hat{J}_i(t) \rangle$  está expresado como una función de correlación retardada (o causal), que expresa propiedades fuera de equilibrio en términos de promedios sobre los estados en equilibrio. Esta ecuación describe la respuesta lineal del sistema a una perturbación pequeña  $\hat{H}'(t)$ . Los brackets  $\langle \dots \rangle_0$  representan un promedio cuántico y térmico respecto al Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  y están dados por

$$\langle [\hat{J}_i(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 = \sum_{\nu} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})) \langle \nu\mathbf{k} | [\hat{J}_i(t), \hat{H}'(t')] | \nu\mathbf{k} \rangle , \quad (47)$$

donde  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  son los espinores (9) con  $\nu = \pm 1$ ,  $f(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})) = (1 + e^{(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) - \mu)/k_B T})^{-1}$  es la función de distribución de Fermi,  $\mu$  es el potencial químico y  $k_B$  es la constante de Boltzmann. De esta manera, los brackets  $\langle \dots \rangle_0$  representan una integración sobre la distribución de Fermi en el espacio  $\mathbf{k}$ .

Usualmente, no hay corrientes en ausencia de un campo eléctrico o alguna otra perturbación externa equivalente, por lo tanto, se considera que  $\langle \hat{J}_i \rangle_0 = 0$ , de modo que la ecuación

(46) toma la forma

$$\langle \hat{J}_i(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{J}_i(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (48)$$

Si el campo perturbativo se aplica adiabáticamente, esto quiere decir  $t_0 \rightarrow -\infty$ , se obtiene

$$\langle \hat{J}_i(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{J}_i(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 . \quad (49)$$

En particular, si la perturbación se puede escribir en la forma  $\hat{H}'(t) = \hat{B}(t)h'(t)$ , donde  $\hat{B}(t)$  es un operador y  $h'(t)$  no es un operador, entonces la función de correlación retardada en (49) se puede escribir como

$$C_{JH'}(t, t') = C_{JB}(t - t')h'(t') , \quad (50)$$

donde  $C_{JB}(t - t')$  está dada por

$$C_{JB}(t - t') = \Theta(t - t') \langle [\hat{J}_i(t), \hat{B}(t')] \rangle_0 , \quad (51)$$

aquí  $\Theta(t - t')$  es la función escalón unitaria. Una forma equivalente de expresar  $C_{JB}(t - t')$  es haciendo el cambio de variable  $t - t' \rightarrow \tau$ , de modo que

$$C_{JB}(\tau) = \Theta(\tau) \langle [\hat{J}_i(\tau), \hat{B}(0)] \rangle_0 . \quad (52)$$

#### 4.2.1 Hamiltoniano de interacción

Supongamos que el gas de electrones es perturbado por un campo electromagnético, de tal forma que el Hamiltoniano para un electrón con carga  $e < 0$  en presencia de este campo perturbativo está descrito por

$$H(t) = \frac{1}{2m^*} \left[ \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) \right]^2 , \quad (53)$$

donde  $m^*$  es la masa efectiva del electrón,  $c$  es la velocidad de la luz,  $\mathbf{p}$  es el operador de momento y  $\mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t)$  es un potencial vectorial definido como  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}^{(e)}$ . Al desarrollar

el cuadrado de (53) se obtiene

$$H(t) \approx \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e}{2m^*c} [\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p}] . \quad (54)$$

En esta ecuación se despreció el término cuadrático  $A^2$ , es decir, despreciamos los efectos cuadráticos del campo debido a que suponemos que el campo perturbativo es pequeño, por lo tanto sólo consideramos términos de orden lineal. Además, si usamos el operador de momento  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  en una relación de la forma  $(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}) f(r) = \mathbf{A} \cdot (-i\hbar\nabla f(r)) + (-i\hbar\nabla \cdot \mathbf{A}) f(r)$ , y si empleamos la norma de Coulomb  $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$ , obtenemos que  $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$ . Usando este resultado, el Hamiltoniano (54) se reduce a

$$H(t) = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) . \quad (55)$$

Podemos escribir este Hamiltoniano en la forma (45), es decir, separarlo en un término independiente del tiempo  $H_0 = p^2/2m^*$  y en otro término perturbativo  $H'(t)$  conocido como Hamiltoniano de interacción, el cual está dado por

$$H'(t) = -\frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) . \quad (56)$$

Además, podemos reescribir  $H'(t)$  usando el operador de operador de velocidad  $\mathbf{v} = \partial_p H_0 = \mathbf{p}/m^*$ , esto es, si sustituimos  $\mathbf{v}$  en el operador de corriente de carga definido como  $\mathbf{J}^{(e)} = e\mathbf{v}$ , obtenemos

$$\mathbf{J}^{(e)} = \frac{e}{m^*} \mathbf{p} , \quad (57)$$

por lo tanto, sustituyendo (57) en (56) se obtiene la relación

$$H'(t) = -\frac{1}{c} \mathbf{J}^{(e)}(t) \cdot \mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) . \quad (58)$$

Consideremos ahora un potencial vectorial y un campo eléctrico que oscilan armónicamente en el tiempo con frecuencia  $\omega$  de la forma

$$\mathbf{A}^{(e)}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0^{(e)} e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} , \quad (59)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} . \quad (60)$$

Estos campos describen una onda plana con vector de onda  $\mathbf{q}$  y frecuencia  $\omega$ , donde  $\mathbf{A}_0^{(e)}$  y  $\mathbf{E}_0$  son las amplitudes del potencial vectorial y del campo eléctrico, respectivamente. Utilizando la ecuación de Maxwell  $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}/c$  y la definición del potencial vectorial  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}^{(e)}$ , se obtiene una relación directa entre el campo eléctrico y el potencial vectorial, dada por  $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}^{(e)}/c$ . Por lo tanto, al derivar (59) y usando (60) se obtiene

$$\mathbf{A}_0^{(e)} = \frac{c}{i\omega} \mathbf{E}_0 . \quad (61)$$

En particular, si se consideran campos espacialmente homogéneos ( $\mathbf{q} \rightarrow 0$ ) se obtiene que

$$\mathbf{A}^{(e)}(t) = \frac{c}{i\omega} \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t} , \quad (62)$$

de esta manera, la ecuación (58) se puede escribir como

$$H'(t) = \frac{i}{\omega} \mathbf{J}^{(e)}(t) \cdot \mathbf{E}(t) . \quad (63)$$

A partir de este Hamiltoniano de interacción se pueden determinar los coeficientes de transporte  $L_{ij}^{(\xi e)}$  que describen la respuesta del sistema a un campo eléctrico. En el contexto térmico, Luttinger (1964) mostró que la respuesta lineal a una perturbación térmica se puede obtener también por una fórmula de Kubo. En analogía con el caso electromagnético, la respuesta a una perturbación térmica ( $-\nabla T/T$ ) se puede describir introduciendo un potencial vectorial auxiliar  $\mathbf{A}^{(q)}$  que actúa como una *fuerza* para la corriente de calor  $\mathbf{J}^{(q)}$  (Luttinger, 1964; Jia et al., 2011; Dyrddal et al., 2013), de tal manera que el Hamiltoniano de interacción es de la forma (58), esto es,

$$H'(t) = -\frac{1}{c} \mathbf{J}^{(q)}(t) \cdot \mathbf{A}^{(q)}(t) , \quad (64)$$

donde el potencial vectorial está dado por

$$\mathbf{A}^{(q)}(t) = \frac{c}{i\omega} \left( -\frac{\nabla T}{T} \right) e^{-i\omega t} . \quad (65)$$

Por lo tanto, tomando en cuenta la relación (63), podemos escribir el Hamiltoniano de interacción de manera general en términos de un campo perturbativo  $\Xi^{(\nu)}(t)$  como

$$H'(t) = \frac{i}{\omega} \mathbf{J}^{(\nu)}(t) \cdot \Xi^{(\nu)}(t) , \quad (66)$$

donde los superíndices  $\nu = e, q$  denotan las corrientes eléctrica y de calor, respectivamente; explícitamente  $\Xi^{(e)}(t) = \mathbf{E}(t)$  y  $\Xi^{(q)}(t) = (-\nabla T/T)$ .

#### 4.2.2 Coeficientes fenomenológicos lineales

Sustituyendo el Hamiltoniano de interacción (66) en la fórmula de Kubo (49), se obtiene

$$\langle \hat{J}_i^{(\xi)}(t) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(t')] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(t') . \quad (67)$$

La transformada de Fourier de (67) está dada por

$$\begin{aligned} \langle \hat{J}_i^{(\xi)}(\omega) \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{J}_i^{(\xi)}(t) \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \int_{-\infty}^t dt' \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(t')] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(t') . \end{aligned} \quad (68)$$

Al multiplicar la integral por el término  $e^{i\omega\tau} e^{-i\omega\tau} = 1$  y realizar el cambio de variable  $t-t' \rightarrow \tau$  da

$$\langle \hat{J}_i^{(\xi)}(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-\tau)} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(t')] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(t-\tau) , \quad (69)$$

donde  $C_{JJ}(\tau) = \Theta(\tau) \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(\tau), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0$  es la función de correlación corriente-corriente (véase ecuación 52). En la ecuación (69) se puede identificar la transformada de Fourier del campo perturbativo definida como

$$\Xi_j^{(\nu)}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega(t-\tau)} \Xi_j^{(\nu)}(t-\tau) , \quad (70)$$

por lo tanto, podemos escribir (69) en la forma

$$\langle \hat{J}_i^{(\xi)}(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(\tau), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(\omega) . \quad (71)$$

Para garantizar la convergencia de la integral es necesario introducir un término  $i\eta$  a la frecuencia  $\omega$ , es decir,  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$  con  $\eta \rightarrow 0^+$ . Este parámetro nos permite regularizar la integral, pero se puede interpretar como una medida de los procesos de dispersión del momento del electrón debido a impurezas o cualquier otro mecanismo de disipación (Il'inskii et al., 1994). Por lo tanto, la integral (71) queda como

$$\langle \hat{J}_i^{(\xi)}(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)\tau} \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(\tau), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(\omega). \quad (72)$$

Esta expresión se puede escribir en la forma general

$$\langle \hat{J}_i^{(\xi)}(\omega) \rangle = L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega) \Xi_j^{(\nu)}(\omega), \quad (73)$$

de esta manera, el coeficiente  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  describe la respuesta lineal del sistema a una perturbación pequeña  $\Xi_j^{(\nu)}(\omega)$ , donde  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  está dado por la fórmula de Kubo

$$L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega) = \frac{1}{\hbar(\omega + i\eta)} \int_0^\infty dt e^{i(\omega+i\eta)t} \langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0. \quad (74)$$

De acuerdo a la ecuación (47) los brackets  $\langle \dots \rangle_0$  están dados por

$$\langle [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 = \sum_\nu \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_\nu(\mathbf{k})) \langle \nu\mathbf{k} | [\hat{J}_i^{(\xi)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] | \nu\mathbf{k} \rangle, \quad (75)$$

donde  $\nu = e, q$  y  $\xi = e, s, q$  denota las corrientes inducidas de carga eléctrica, de espín y de calor, respectivamente. El operador de corriente de espín está definido como  $\hat{J}_i^{(s)j} = \hbar\{\hat{v}_i, \sigma_j\}/4$ , donde  $\hat{v}_i = (\partial H/\partial k_i)/\hbar$  es el operador de velocidad y el símbolo  $\{\cdot, \cdot\}$  representa el anticonmutador. Mientras que el operador de corriente de calor está definido como  $\hat{J}_i^{(q)} = \hat{J}_i^{(h)} - \mu\hat{J}_i^{(e)}/e$ , donde  $\hat{J}_i^{(e)} = e\hat{v}_i$  es el operador de corriente de carga y  $\hat{J}_i^{(h)} = \{H, \hat{v}_i\}/2$  es el operador de corriente de energía (Mahan, 2000).

Recordemos que en el estado base el Hamiltoniano del gas de electrones está descrito por la ecuación (6). En particular, si consideramos sólo el acoplamiento espín-órbita lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$ , el campo espín-órbita  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  está dado por la ecuación (15). Tomando en

cuenta estos resultados, obtenemos que el operador de velocidad  $\hat{v}_i$  está dado por

$$\hat{v}_i = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \quad (76)$$

$$= \frac{\hbar}{m^*} k_i + \frac{1}{\hbar} \sigma_l \lambda_{li} , \quad (77)$$

donde  $\lambda_{ij} = (\hbar/2) \partial \Omega_i / \partial k_j$  está determinada sólo por los parámetros de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta_{[hkl]}$  (véase ecuación 16). Asimismo, el operador de corriente de espín  $\hat{J}_i^{(s)j}$  queda como

$$\hat{J}_i^{(s)j} = \frac{\hbar}{4} \{ \hat{v}_i, \sigma_j \} \quad (78)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \sigma_j + \frac{\hbar}{4} \frac{\partial \Omega_j(\mathbf{k})}{\partial k_i} \quad (79)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m^*} k_i \sigma_j + \frac{1}{2} \lambda_{ji} . \quad (80)$$

Mientras que el operador de corriente de calor  $\hat{J}_i^{(q)}$  toma la forma

$$\hat{J}_i^{(q)} = \frac{1}{2} \{ H, \hat{v}_i \} - \mu \hat{v}_i \quad (81)$$

$$= (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) \hat{v}_i + \frac{1}{2} \{ H_{so}, \hat{v}_i \} \quad (82)$$

$$= (\varepsilon_0(\mathbf{k}) - \mu) \hat{v}_i + \Omega_j \hat{J}_i^{(s)j} . \quad (83)$$

### 4.3 Conductividad de carga eléctrica

Ilustraremos el cálculo de los coeficientes lineales  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  tomando como ejemplo la conductividad de eléctrica  $L_{ij}^{(ee)}(\omega)$ , la cual está descrita por la fórmula de Kubo en términos de la correlación corriente-corriente. Para ello, partimos de la fórmula de Kubo (74) donde sustituimos el operador de corriente de carga eléctrica  $\hat{J}_i^{(e)} = e \hat{v}_i$ , con lo cual obtenemos

$$L_{ij}^{(ee)}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar \tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{v}_i(t), \hat{v}_j(0)] \rangle_0 , \quad \tilde{\omega} = \omega + i\eta, \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (84)$$

sustituyendo el operador de velocidad (76) se obtiene

$$L_{ij}^{(ee)}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\sigma_l(t) \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i}, \sigma_m(0) \frac{\partial \Omega_m}{\partial k_j}] \rangle_0 \quad (85)$$

$$= \frac{e^2}{4\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_m}{\partial k_j} \langle [\sigma_l(t), \sigma_m(0)] \rangle_0. \quad (86)$$

La integración en el tiempo da

$$L_{ij}^{(ee)}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_m}{\partial k_j} [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \times \left( \frac{M_{lm}(\mathbf{k})}{\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\tilde{\omega}} + \frac{M_{ml}(\mathbf{k})}{\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) + \hbar\tilde{\omega}} \right) \quad (87)$$

donde los elementos de matriz  $M_{ij}(\mathbf{k})$  están dados por

$$M_{ij}(\mathbf{k}) \equiv \langle -\mathbf{k} | \sigma_i | +\mathbf{k} \rangle \langle +\mathbf{k} | \sigma_j | -\mathbf{k} \rangle, \quad (88)$$

donde

$$\langle \nu | \sigma_i | -\nu \rangle \langle -\nu | \sigma_j | \nu \rangle = \frac{1}{\Omega_{||}^2} [\Omega_{||}^2 \delta_{ij} - \Omega_{||i} \Omega_{||j}] + i \frac{\nu}{\Omega} \epsilon_{ijk} \Omega_k, \quad (89)$$

con  $\nu = \pm 1$  y  $\boldsymbol{\Omega} = \boldsymbol{\Omega}_{||} + \Omega_z \hat{\mathbf{z}}$ . En particular, en un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo R+D[ $hkl$ ], los elementos de matriz tienen la propiedad  $M_{ij}(\mathbf{k}) = M_{ji}^*(\mathbf{k})$ .

Si definimos  $\hbar\omega_{+-} \equiv \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k})$ , es posible escribir (87) en la forma

$$L_{ij}^{(ee)}(\omega) = \frac{e^2}{4\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_m}{\partial k_j} [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \left( \frac{M_{lm}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} - \hbar\tilde{\omega}} + \frac{M_{ml}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} + \hbar\tilde{\omega}} \right). \quad (90)$$

La anisotropía que resulta de la presencia simultánea de la IEO tipo Rashba y tipo Dresselhaus[ $hkl$ ], da lugar a un comportamiento espectral muy diferente al correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico. Por este motivo, antes de mostrar el espectro de la conductividad eléctrica, en la siguiente sección se discutirá la densidad conjunta de estados  $D_{+-}(\omega)$ , considerando únicamente el acoplamiento lineal en  $\mathbf{k}$ . La importancia del estudio de  $D_{+-}(\omega)$  se debe a que usualmente en las funciones respuesta cada transición va ‘pesada’ por algún elemento de matriz, como se puede ver en la expresión (90). Si estos ‘pesos’ son constantes, la estructura en  $\omega$  quedará determinada por la densidad conjunta de

estados  $D_{+-}(\omega)$ . Por lo tanto,  $D_{+-}(\omega)$  nos permitirá describir y anticipar el comportamiento de las funciones respuesta. La sección 4.4 sintetiza los resultados obtenidos previamente en las referencias Maytorena et al. (2006) e Iglesias et al. (2010).

#### 4.4 Transiciones entre sub-bandas de espín

En el límite de temperatura cero,  $T = 0$ , la función de distribución de Fermi se convierte en una función escalón y la integral en (90) se reduce a

$$L_{ij}^{(ee)}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar^3 \tilde{\omega}} \lambda_{li} \lambda_{mj} \int' \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \left( \frac{M_{lm}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} - \hbar\tilde{\omega}} + \frac{M_{ml}(\mathbf{k})}{\hbar\omega_{+-} + \hbar\tilde{\omega}} \right), \quad (91)$$

donde  $\lambda_{ij} = (\hbar/2)\partial\Omega_i/\partial k_j$  está dada por la ecuación (16). La prima en la integral indica que la integración está restringida a la región anular entre los contornos de Fermi  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$  con  $0 < \theta < 2\pi$ , para la cual se cumple que  $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$  (Figura 19.a). Es importante destacar que las energías  $\hbar\omega_{+-} = \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k})$  que aparecen en la integral (91), son resultado del desdoblamiento de los estados de espín producido por la presencia de la interacción espín-órbita. Por lo tanto, la estructura en las funciones respuesta se puede entender en términos de procesos de absorción de energía y de transiciones verticales desde la sub-banda  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  hasta la sub-banda  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  a un ángulo determinado, i.e. en una dirección dada en el espacio  $\mathbf{k}$ .

A  $T = 0$ , la densidad conjunta de estados  $D_{+-}(\omega)$ , para las sub-bandas  $\varepsilon_\nu(\mathbf{k})$  está definida por

$$D_{+-}(\omega) = \int' \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\omega). \quad (92)$$

Esta función da el número de transiciones verticales permitidas que se pueden llevar a cabo entre  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  y  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  separadas por una energía  $\hbar\omega$ . De la misma forma, la prima en la integral indica que la región de integración se restringe para los puntos en el espacio  $\mathbf{k}$  tales que  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ ; esto define una zona anular entre los contornos de Fermi que delimita el espacio  $\mathbf{k}$  disponible para transiciones verticales, para una energía de Fermi dada (Figura 19.b). La expresión (92) también puede reescribirse como la integral de línea

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int'_{C_r(\omega)} \frac{dk_r}{|\nabla_{\mathbf{k}} \hbar\omega_{+-}(\mathbf{k})|}, \quad (93)$$

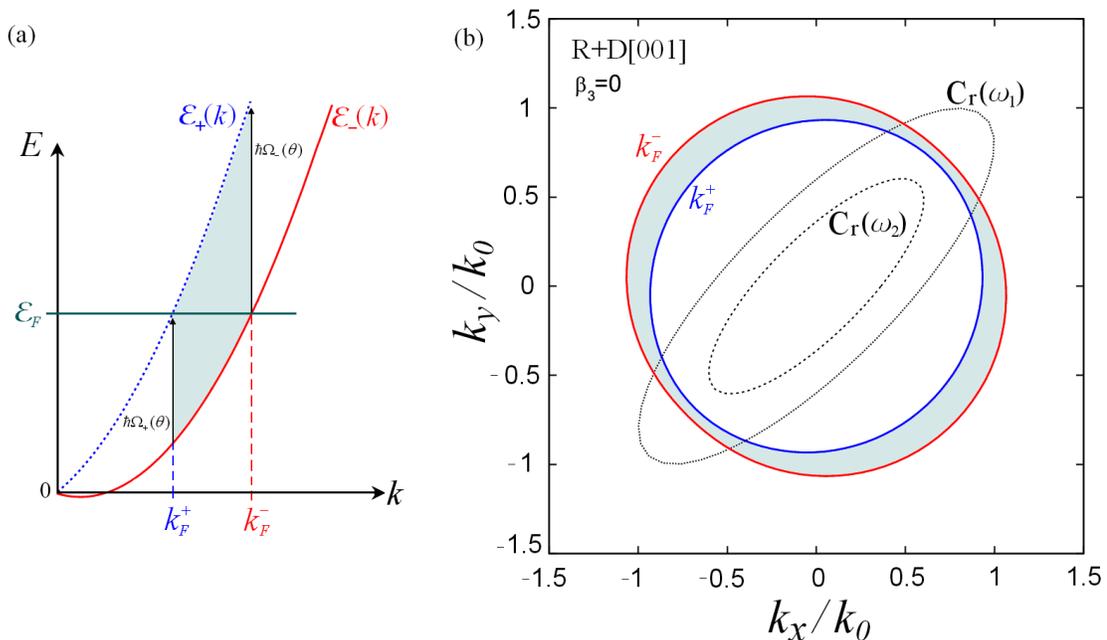
donde la curva  $C_r(\omega)$  está definida por la condición  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ , esto quiere decir que la integral se toma sólo sobre aquéllos arcos de la curva  $C_r(\omega)$  que caen en la región anular  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$  (Figura 19.b). Para determinar la forma de la curva de resonancia  $C_r(\omega)$ , recordemos que  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ . Si consideramos sólo el acoplamiento espín-órbita lineal, tenemos que  $\hbar\Omega_i/2 = \lambda_{ij} k_j$ , entonces a partir de la condición  $\hbar\omega = \hbar|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$  obtenemos que la curva de resonancia  $C_r(\omega)$  está definida por la forma cuadrática

$$\left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2 = \lambda_{ij} \lambda_{il} k_j k_l . \quad (94)$$

Por otro lado, en coordenadas polares es posible escribir (92) como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) - \hbar\omega) . \quad (95)$$

Puesto que  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = 2k\Delta(\theta)$  (veáse ecuación 22), se tiene que  $\hbar\omega_{+-} = 2k\Delta(\theta)$  y por lo tanto la condición  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ , implica a su vez que  $2k_F^+(\theta)\Delta(\theta) \leq \hbar\omega \leq 2k_F^-(\theta)\Delta(\theta)$ .



**Figura 19:** (a) A temperatura cero, los únicos estados permitidos que intervienen en las transiciones entre las sub-bandas  $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$  son aquéllos con vectores de onda  $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$  para los cuales se cumple que  $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$ . (b) La curva de resonancia  $C_r(\omega)$  está definida por los puntos  $(k_x, k_y)$  tales que  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ ; para  $\omega_1$  y  $\omega_2$  fijas, con  $\omega_2 < \omega_1$  y  $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ . Sólo la región sombreada contribuye a la absorción.

Tomando esto en cuenta, se definen las energías

$$\hbar\Omega_{\pm}(\theta) \equiv [\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta)]|_{k=k_F^{\pm}(\theta)} = 2k_F^{\pm}(\theta) \Delta(\theta) , \quad (96)$$

de tal manera que la función  $\delta$  que aparece en (95) puede escribirse en la forma

$$\delta(\hbar\omega_{+-}(k, \theta) - \hbar\omega) = \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] \frac{1}{2\Delta(\theta)} \delta\left[k - \frac{\hbar\omega}{2\Delta(\theta)}\right] . \quad (97)$$

Por lo tanto, podemos escribir la ecuación (95) como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int d\theta \frac{1}{\Delta^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] . \quad (98)$$

Además, a partir de la condición  $\varepsilon_{\pm}(k_F^{\pm}(\theta), \theta) = \varepsilon_F$ , la energías descritas en la ecuación (96) están dadas por

$$\hbar\Omega_+(\theta) = \varepsilon_F - \varepsilon_-(k_F^+(\theta)) , \quad (99)$$

$$\hbar\Omega_-(\theta) = \varepsilon_+(k_F^-(\theta)) - \varepsilon_F . \quad (100)$$

Esto significa que  $\hbar\Omega_+(\theta)$  es la energía mínima  $\hbar\omega$ , mientras que  $\hbar\Omega_-(\theta)$  la energía máxima, que se requiere absorber para que se lleven a cabo transiciones verticales desde la sub-banda  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  hasta la sub-banda  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , a un ángulo dado, esto es, en una dirección dada en el espacio  $\mathbf{k}$  entre los contornos de Fermi  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$  (Figura 19). En efecto, esto quiere decir que para una energía  $\hbar\omega$  dada, sólo aquéllos ángulos que satisfacen la condición  $\hbar\Omega_+(\theta) \leq \hbar\omega \leq \hbar\Omega_-(\theta)$  contribuyen al valor de la integral (98). Ciertamente, estos ángulos están determinados por la forma del desdoblamiento de los estados de espín  $\Delta(\theta)$  (véase ecuación 20). En particular, y como hemos visto, cuando la separación entre las sub-bandas es isotrópica  $\Delta(\theta)$  es constante, esto implica que para una  $\omega$  en la banda de absorción, toda la región angular  $0 < \theta < 2\pi$  contribuye a la integral (98). En cambio, cuando el desdoblamiento de los estados de espín es anisotrópico, sólo se deben considerar determinados ángulos.

En este contexto, en la siguientes secciones se presenta un análisis más detallado tomando como ejemplos los casos con acoplamiento Rashba y R+D[001].

#### 4.4.1 Acoplamiento isotrópico: Rashba

Consideremos ahora el caso con acoplamiento Rashba, donde, de la sección 3.3, sabemos que  $\Delta(\theta) = \alpha$  y los vectores de Fermi son círculos concéntricos con radios  $k_F^\pm = \sqrt{k_F^2 + k_{so}^2} \mp k_{so}$ , donde  $k_{so} = m^* \alpha / \hbar^2$  (veáse Figura 14). Tomando esto en cuenta, de la ecuación (96) se sigue que las energías  $\hbar\Omega_\pm = 2\alpha k_F^\pm$ , son independientes del ángulo y dependen esencialmente del parámetro de acoplamiento  $\alpha$ . Con el propósito de interpretar este resultado, en la Figura 20.b. se muestra la región angular en el espacio  $\mathbf{k}$  disponible para las transiciones de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , como función de la energía  $\hbar\omega$ ; el límite inferior de la región angular está determinado por la curva  $\hbar\Omega_+(\theta)$ , mientras que el límite superior lo determina  $\hbar\Omega_-(\theta)$ . Esta figura muestra que el desdoblamiento isotrópico de los estados de espín, produce que para una  $\omega$  en la banda de absorción, toda la región angular  $0 < \theta < 2\pi$  contribuya al valor de la integral (98). Precisamente, a partir de la ecuación (98) se obtiene que la densidad conjunta de estados está dada por

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha^2}, \quad 2\alpha k_F^+ \leq \hbar\omega \leq 2\alpha k_F^-. \quad (101)$$

Esto quiere decir que para una  $\alpha$  dada,  $D_{+-}(\omega)$  crece linealmente como función de la frecuencia, tal como se puede observar en la Figura 20.a. Por otra parte, suponiendo que  $(k_{so}/k_F)^2 \ll 1$ , se obtiene que las frecuencias características (96) están dadas por

$$\hbar\omega_\pm \equiv \hbar\Omega_\pm = 2\alpha k_F \mp \frac{2m^* \alpha^2}{\hbar^2}. \quad (102)$$

Esto implica que las transiciones directas de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  se llevan a cabo en un ancho de banda dado por

$$\Delta\varepsilon = \hbar\omega_- - \hbar\omega_+ = \frac{4m^* \alpha^2}{\hbar^2}. \quad (103)$$

Esta relación muestra que  $\Delta\varepsilon$  es independiente de la frecuencia  $\omega$  y depende principalmente del parámetro de acoplamiento  $\alpha$ . Se obtiene de esta manera que la magnitud del parámetro de acoplamiento determina el ancho de banda  $\Delta\varepsilon$  y las frecuencias características  $\hbar\omega_\pm$  donde se observa estructura en  $D_{+-}(\omega)$  (Figura 20.a).

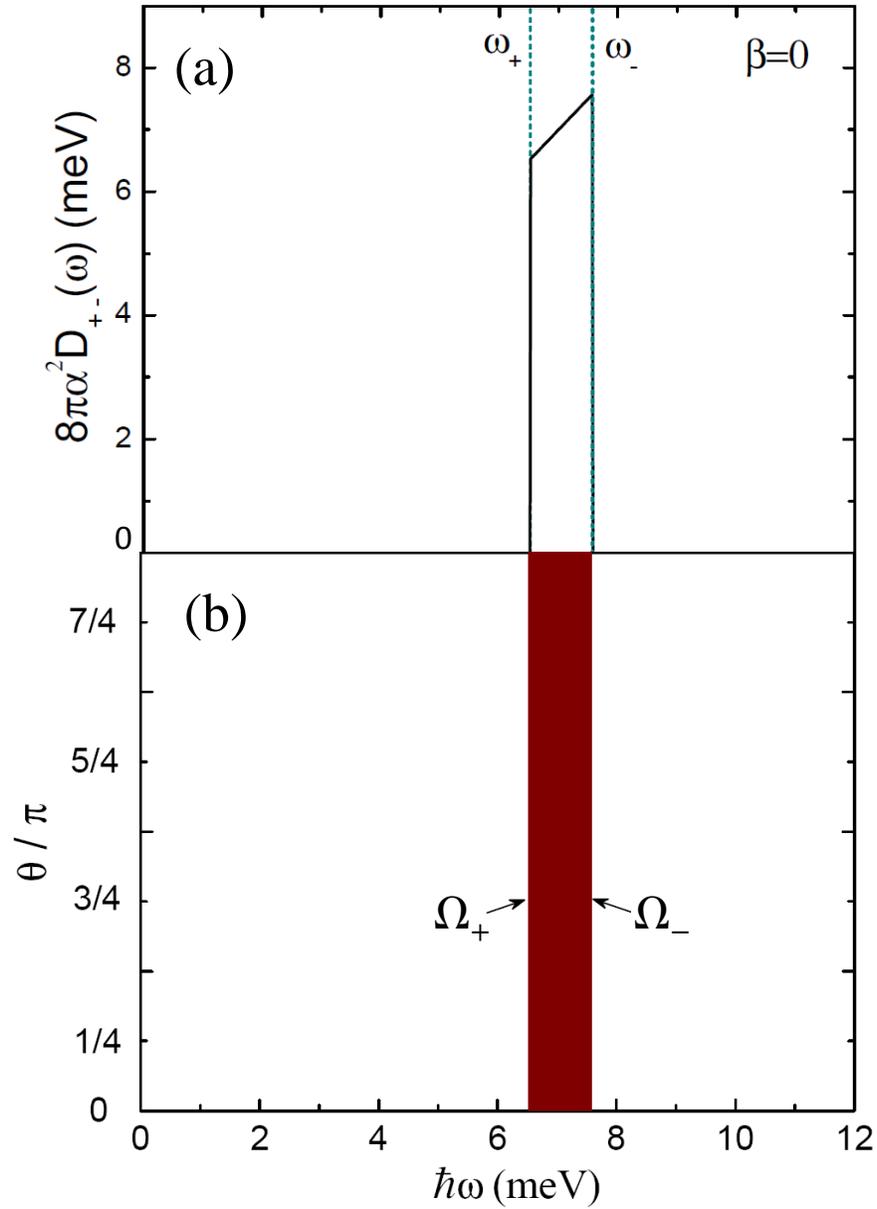


Figura 20: (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento Rashba.(b) Región angular en el espacio  $k$  disponible para las transiciones de  $\varepsilon_-(k)$  a  $\varepsilon_+(k)$ , se observa que todas las direcciones contribuyen igual.

#### 4.4.2 Acoplamiento anisotrópico: $\mathbf{R}+\mathbf{D}[001]$

En un GE2D con acoplamiento conjunto  $\mathbf{R}+\mathbf{D}[001]$ , el desdoblamiento de los estados de espín está descrito por la función angular  $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}} \sin 2\theta$  (ecuación 20). Usando (16) en la ecuación (94), se obtiene que la curva de resonancia está dada por

$$k_x^2 + k_y^2 - \left( \frac{2\alpha\beta_{[001]}}{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2} \right) 2k_x k_y = \frac{(\hbar\omega)^2}{4(\alpha^2 + \beta_{[001]}^2)}. \quad (104)$$

Ahora bien, la rotación de ejes mediante la transformación  $k_x = (\tilde{k}_x - \tilde{k}_y)/\sqrt{2}$  y  $k_y = (\tilde{k}_x + \tilde{k}_y)/\sqrt{2}$ , permite reescribir (104) en la forma

$$\frac{\tilde{k}_x^2}{\left( \frac{\hbar\omega}{2(\alpha - \beta_{[001]})} \right)^2} + \frac{\tilde{k}_y^2}{\left( \frac{\hbar\omega}{2(\alpha + \beta_{[001]})} \right)^2} = 1, \quad (105)$$

de modo que la curva  $C_r(\omega)$  describe una elipse rotada cuyo semieje mayor dado por  $k_a(\omega) = \hbar\omega/2 |\alpha - \beta_{[001]}|$ , se encuentra en  $\theta_+ \equiv \pi/4$  o  $5\pi/4$ . Mientras que en  $\theta_- \equiv 3\pi/4$  o  $7\pi/4$ , se encuentra el semieje menor  $k_b(\omega) = \hbar\omega/2 |\alpha + \beta_{[001]}|$ . En la Figura 21 se muestran los contornos de Fermi  $k_F^\pm(\theta)$  y la curva  $C_r(\omega)$  a distintas frecuencias. Vemos que al aumentar  $\omega$ , la curva  $C_r(\omega)$  se hace también más grande y eventualmente llegará a zonas de menor ocupación, hasta salirse completamente de la región anular entre los contornos de Fermi.

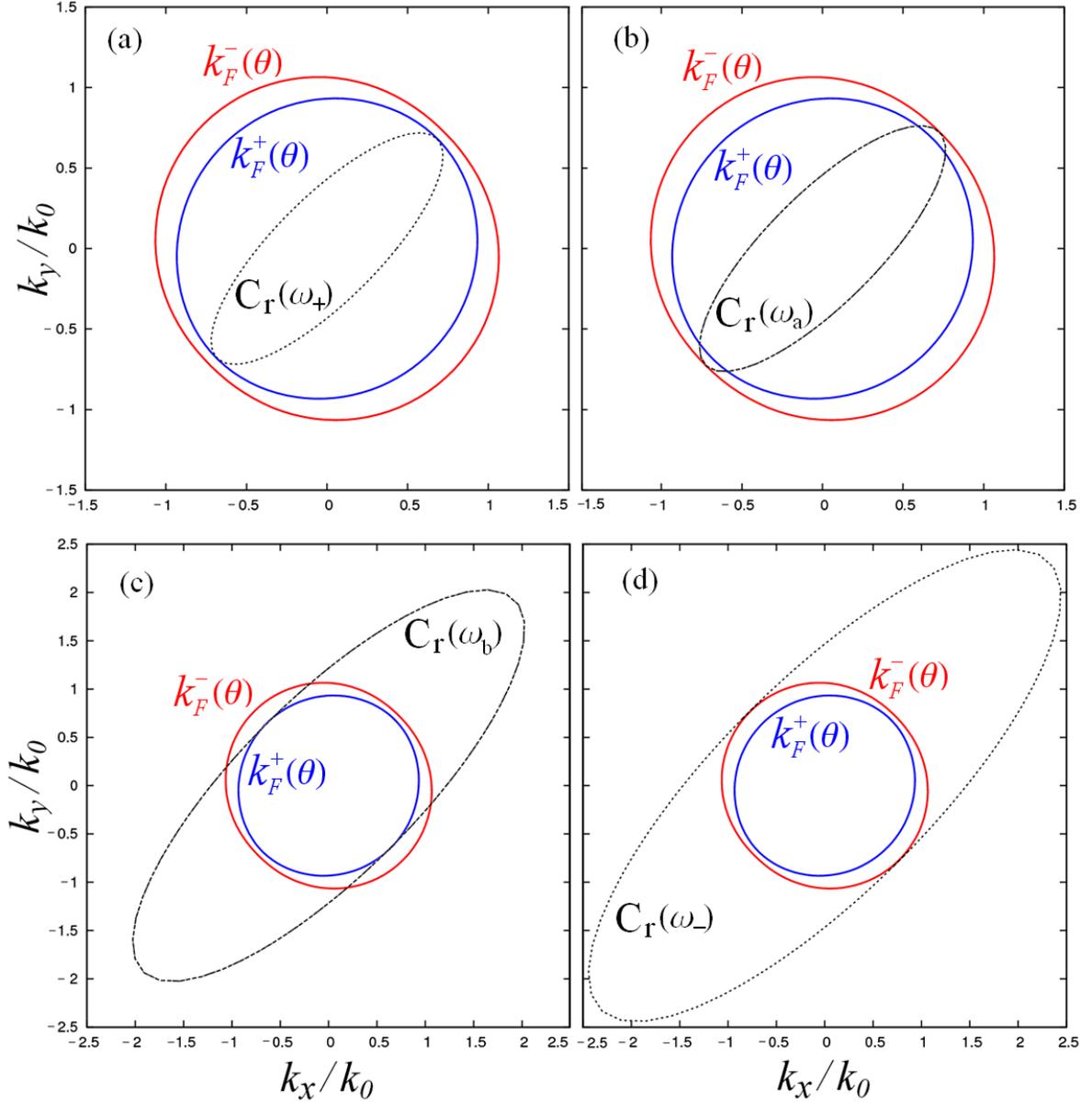
En particular, notemos que en  $\theta_+ = \pi/4$  o  $5\pi/4$ , la energía mínima necesaria para inducir transiciones verticales de  $\varepsilon_-(k, \theta)$  a  $\varepsilon_+(k, \theta)$  (Figura 19.a), involucra un estado cuyo vector de onda cae sobre el contorno de Fermi  $k_F^+(\theta)$ , por lo tanto

$$\hbar\omega_+ = \hbar\Omega_+(\theta_+) = 2k_F |\alpha - \beta_{[001]}| - \frac{2m^*}{\hbar^2} (\alpha - \beta_{[001]})^2, \quad (106)$$

en este caso, el semieje mayor de la elipse coincide con  $k_a(\omega) = k_F^+(\theta_+)$  (Figura 21.a). También en la dirección  $\theta_+$ , un estado con vector de onda que cae en el contorno de Fermi  $k_F^-(\theta)$ , requiere una energía para inducir transiciones dada por

$$\hbar\omega_a \equiv \hbar\Omega_-(\theta_+) = 2k_F |\alpha - \beta_{[001]}| + \frac{2m^*}{\hbar^2} (\alpha - \beta_{[001]})^2, \quad (107)$$

aquí el semieje mayor de la elipse es  $k_a(\omega) = k_F^-(\theta_+)$  (Figura 21.b).



**Figura 21:** La curva  $C_r(\omega)$  describe una elipse rotada con semieje mayor  $k_a(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha - \beta_{[001]}|$  y semieje menor  $k_b(\omega) = \hbar\omega/2|\alpha + \beta_{[001]}|$ . Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas  $\varepsilon_{\pm}(k, \theta)$  son (a)  $\hbar\omega_+$ , (b)  $\hbar\omega_a$ , (c)  $\hbar\omega_b$  y (d)  $\hbar\omega_-$ , con  $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$ . Los parámetros usados son  $\alpha = 0.16$  eVÅ,  $\beta_{[001]} = 0.5\alpha$ ,  $n = 5 \times 10^{11}$  cm $^{-2}$  y  $m^* = 0.05 m_0$ .

Si siguiendo un procedimiento análogo ahora en la dirección  $\theta_- = 3\pi/4$  o  $7\pi/4$ , se tiene que la energía mínima requerida para inducir transiciones es

$$\hbar\omega_b \equiv \hbar\Omega_+(\theta_-) = 2k_F|\alpha + \beta_{[001]}| - \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha + \beta_{[001]})^2, \quad (108)$$

y el semieje menor de la elipse coincide con  $k_b(\omega) = k_F^+(\theta_-)$  (Figura 21.c). Mientras que para un estado con vector de onda en  $k_F^-(\theta)$ , la energía involucrada en las transiciones está dada por

$$\hbar\omega_- = \hbar\Omega_-(\theta_-) = 2k_F|\alpha + \beta_{[001]}| + \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha + \beta_{[001]})^2, \quad (109)$$

donde el semieje menor es  $k_b(\omega) = k_F^-(\theta_-)$  (Figura 21.d).

A partir de estos resultados se tiene que  $\omega_+ < \omega_a < \omega_b < \omega_-$ . En este caso, el ancho de banda de absorción  $\Delta\varepsilon$  está dado por

$$\Delta\varepsilon = 4k_F [\beta_{[001]}\Theta(\alpha - \beta_{[001]}) + \alpha\Theta(\beta_{[001]} - \alpha)] + \frac{4m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[001]}^2), \quad (110)$$

donde  $\Theta(x)$  es la función escalón unitaria. La presencia simultánea del acoplamiento R+D[001] da como resultado un ancho de banda de absorción hasta un orden de magnitud mayor con respecto al caso donde sólo hay acoplamiento Rashba, para valores típicos de  $\alpha$ ,  $\beta_{[001]}$  y  $n$ . Esto se puede apreciar en las Figuras 20 y 22.

En la Figura 22.a se muestra la densidad conjunta de estados para el caso con acoplamiento R+D[001]. Los picos que se observan en  $D_{+-}(\omega)$  corresponden a excitaciones electrónicas que involucran estados con vectores de onda que caen sobre la curva  $C_r(\omega)$ , estas resonancias ocurren precisamente en las energías características  $\hbar\omega_+$ ,  $\hbar\omega_a$ ,  $\hbar\omega_b$  y  $\hbar\omega_-$ . Mientras que en la Figura 22.b se muestra la región angular en el espacio  $\mathbf{k}$  disponible para las transiciones verticales de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , como función de la energía  $\hbar\omega$ ; sólo la región sombreada contribuye a la absorción. La Figura 22.b muestra que, en efecto, el desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín restringe los valores de  $\mathbf{k}$  involucrados en las transiciones, esto es, a una  $\omega$  en la banda de absorción sólo en ciertos ángulos se pueden llevar a cabo las transiciones que contribuyen a  $D_{+-}(\omega)$ . Además, es interesante notar que la forma del espectro de  $D_{+-}(\omega)$  es claramente distinta del caso isotrópico, debido a que  $D_{+-}(\omega)$  se vuelve asimétrica y el ancho de banda de absorción  $\Delta\varepsilon$  es mayor que el caso con acoplamiento Rashba (véase Figura 20.a); la forma asimétrica de  $D_{+-}(\omega)$  puede considerarse, por lo tanto, consecuencia directa del desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín descrito por la función angular  $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta$  (ecuación (20)).

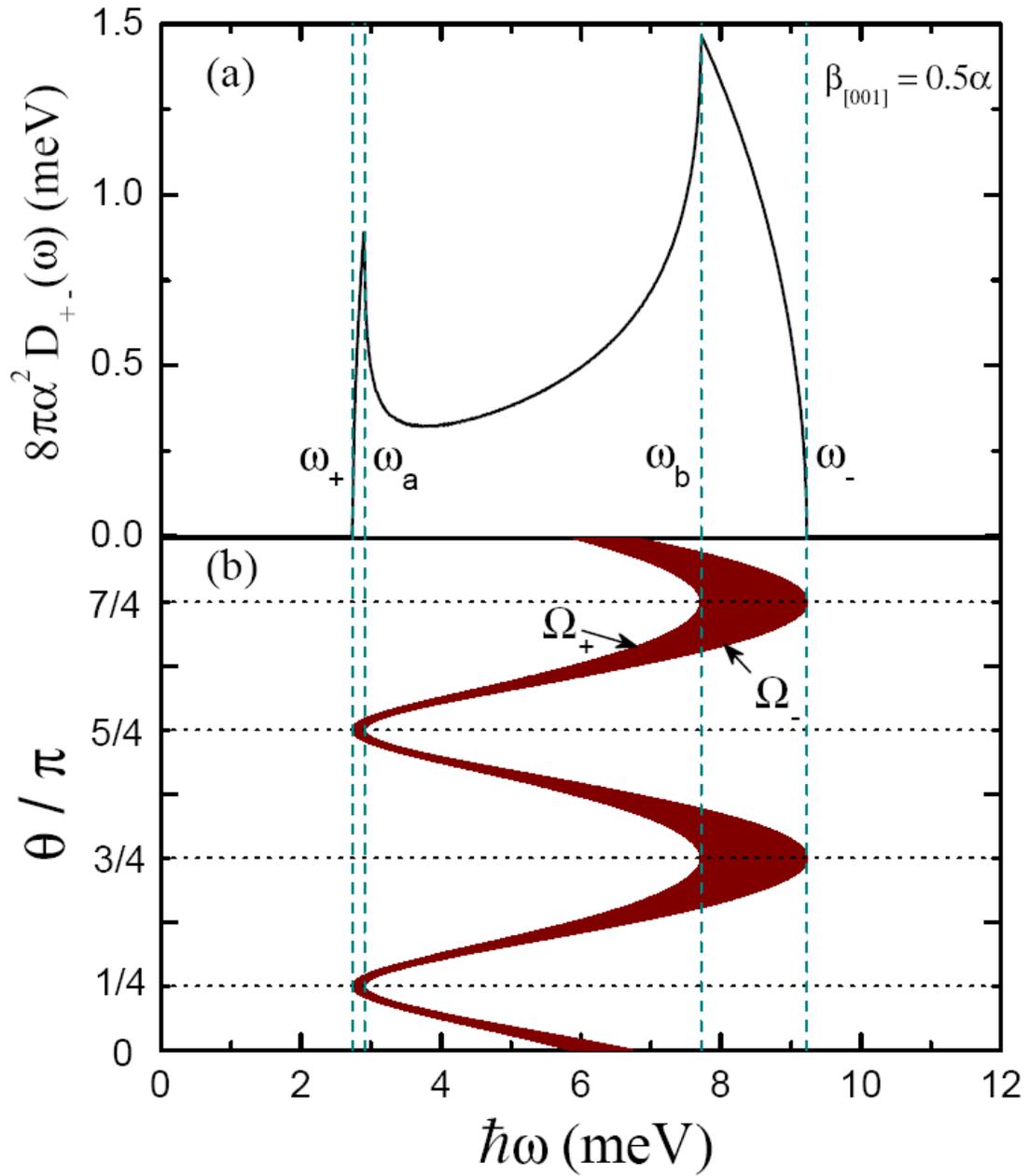


Figura 22: (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[001].(b) Región angular en el espacio k disponible para las transiciones de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , donde  $\omega_+ = \Omega_+(\pi/4)$ ,  $\omega_a = \Omega_-(\pi/4)$ ,  $\omega_b = \Omega_+(3\pi/4)$ ,  $\omega_- = \Omega_-(3\pi/4)$ .

### 4.4.3 Acoplamiento anisotrópico: R+D[110]

Finalmente, realizando un procedimiento análogo al desarrollado en la sección 4.4.2, es posible obtener las expresiones de las frecuencias características correspondientes al caso con acoplamiento R+D[110]. Por tal motivo, en esta sección se presentan sólo los resultados principales.

En un gas de electrones en presencia del acoplamiento R+D[110], el desdoblamiento de los estados de espín está dado por la función angular  $\Delta(\theta) = \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} \cos^2 \theta$  (ecuación 20). En este caso, se obtiene que la curva de resonancia  $C_r(\omega)$  está dada por la ecuación

$$\frac{k_x^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}}\right)^2} + \frac{k_y^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2\alpha}\right)^2} = 1. \quad (111)$$

Esta ecuación describe una elipse con semieje mayor  $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$  en la dirección  $\theta_+ \equiv \pi/2$  o  $3\pi/2$ , y semieje menor  $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$  en  $\theta_- \equiv 0$  o  $\pi$ . En la Figura 23 se muestran los contornos de Fermi  $k_F^\pm(\theta)$  y la curva  $C_r(\omega)$  a distintas frecuencias. Se observa que la curva  $C_r(\omega)$  crece al aumentar el valor de  $\omega$ , como ocurre en el caso con acoplamiento R+D[001] mostrado en la Figura 21. Las frecuencias características  $\omega_+$ ,  $\omega_a$ ,  $\omega_b$  y  $\omega_-$  (Figura 23), están dadas por

$$\hbar\omega_+ = \hbar\Omega_+(\theta_+) = 2\alpha k_F - \frac{2m^*}{\hbar^2}\alpha^2, \quad (112)$$

$$\hbar\omega_- = \hbar\Omega_-(\theta_-) = 2k_F\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} + \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2), \quad (113)$$

$$\hbar\omega_a = \hbar\Omega_-(\theta_+) = 2\alpha k_F + \frac{2m^*}{\hbar^2}\alpha^2, \quad (114)$$

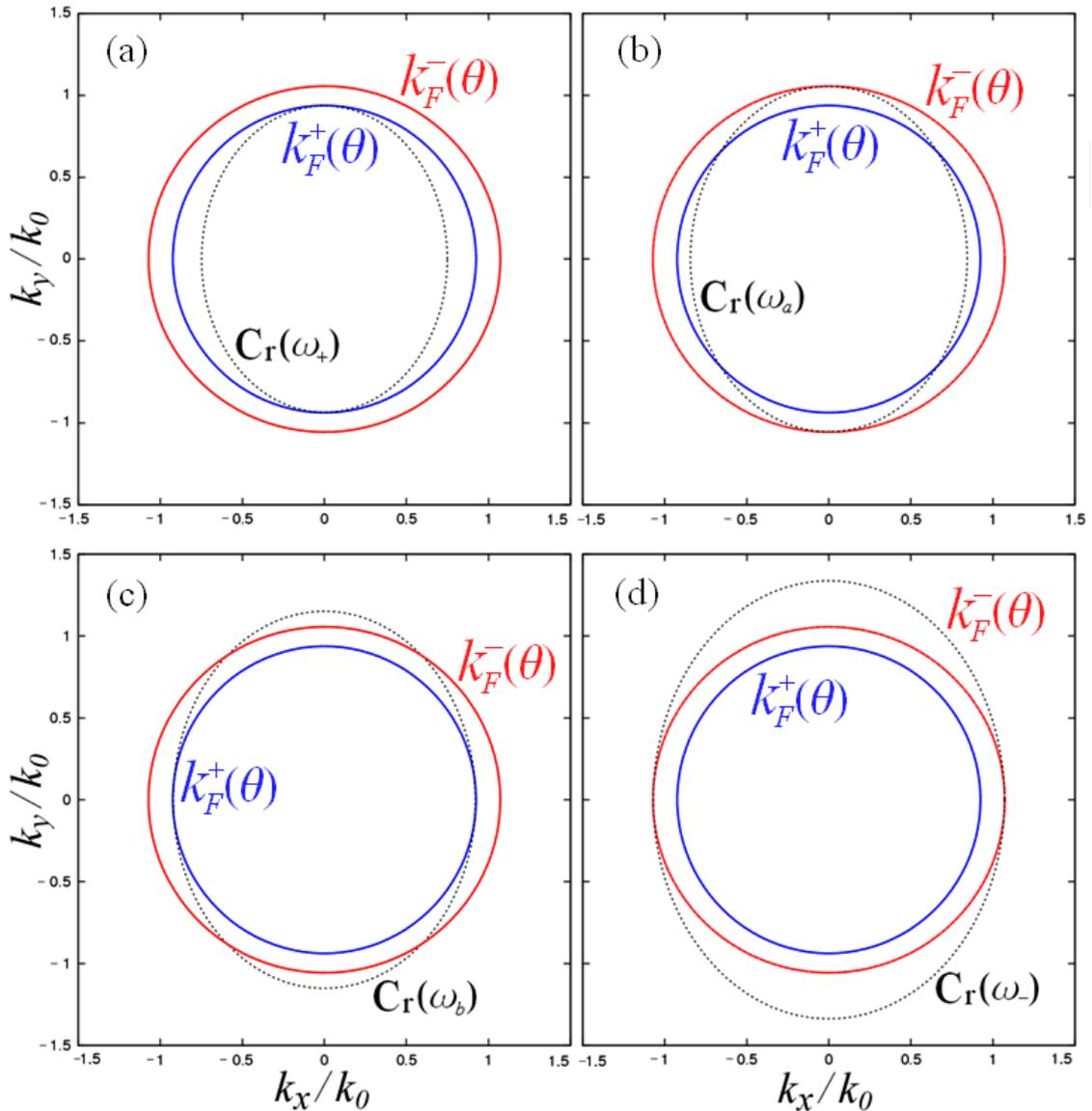
$$\hbar\omega_b = \hbar\Omega_+(\theta_-) = 2k_F\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} - \frac{2m^*}{\hbar^2}(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2). \quad (115)$$

En este caso el ancho de banda de absorción  $\Delta\varepsilon = \hbar\omega_- - \hbar\omega_+$  es

$$\Delta\varepsilon = 2k_F \left[ \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2} - \alpha \right] + \frac{2m^*}{\hbar^2}(2\alpha^2 + \beta_{[110]}^2). \quad (116)$$

Vemos que  $\Delta\varepsilon$  depende esencialmente de la magnitud de los parámetros de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta_{[110]}$ , como sucede en el casos considerados previamente (veánse ecuaciones (103) y (110)).

En la Figura 24.a se muestra  $D_{+-}(\omega)$  correspondiente al caso con acoplamiento R+D[110]. Podemos ver que la forma del espectro de  $D_{+-}(\omega)$  es más simétrica si se compara con el caso con acoplamiento R+D[001] mostrado en la Figura 22.a. Dicha simetría es resultado de la función angular  $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta$ . Además en la Figura 24.b se observa que el desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín producido por el acoplamiento R+D[110], también restringe los valores de  $\mathbf{k}$  involucrados en las transiciones de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  a una energía  $\hbar\omega$ .



**Figura 23:** La curva  $C_r(\omega)$  describe una elipse rotada con semieje mayor  $k_a(\omega) = \hbar\omega/2\alpha$  y semieje menor  $k_b(\omega) = \hbar\omega/2\sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2}$ . Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas  $\varepsilon_{\pm}(k, \theta)$  son (a)  $\hbar\omega_{\pm}$ , (b)  $\hbar\omega_a$ , (c)  $\hbar\omega_b$  y (d)  $\hbar\omega_{-}$ , con  $\omega_{+} < \omega_a < \omega_b < \omega_{-}$ . Los parámetros usados son  $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$ ,  $\beta_{[110]} = 0.75\alpha$ ,  $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  y  $m^* = 0.05 m_0$ .

En general, el entendimiento de la densidad conjunta de estados nos permite anticipar las frecuencias en las que los espectros de las funciones respuesta mostrarán estructura. Esta información será útil en las siguientes secciones para describir el comportamiento espectral de los coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$ .

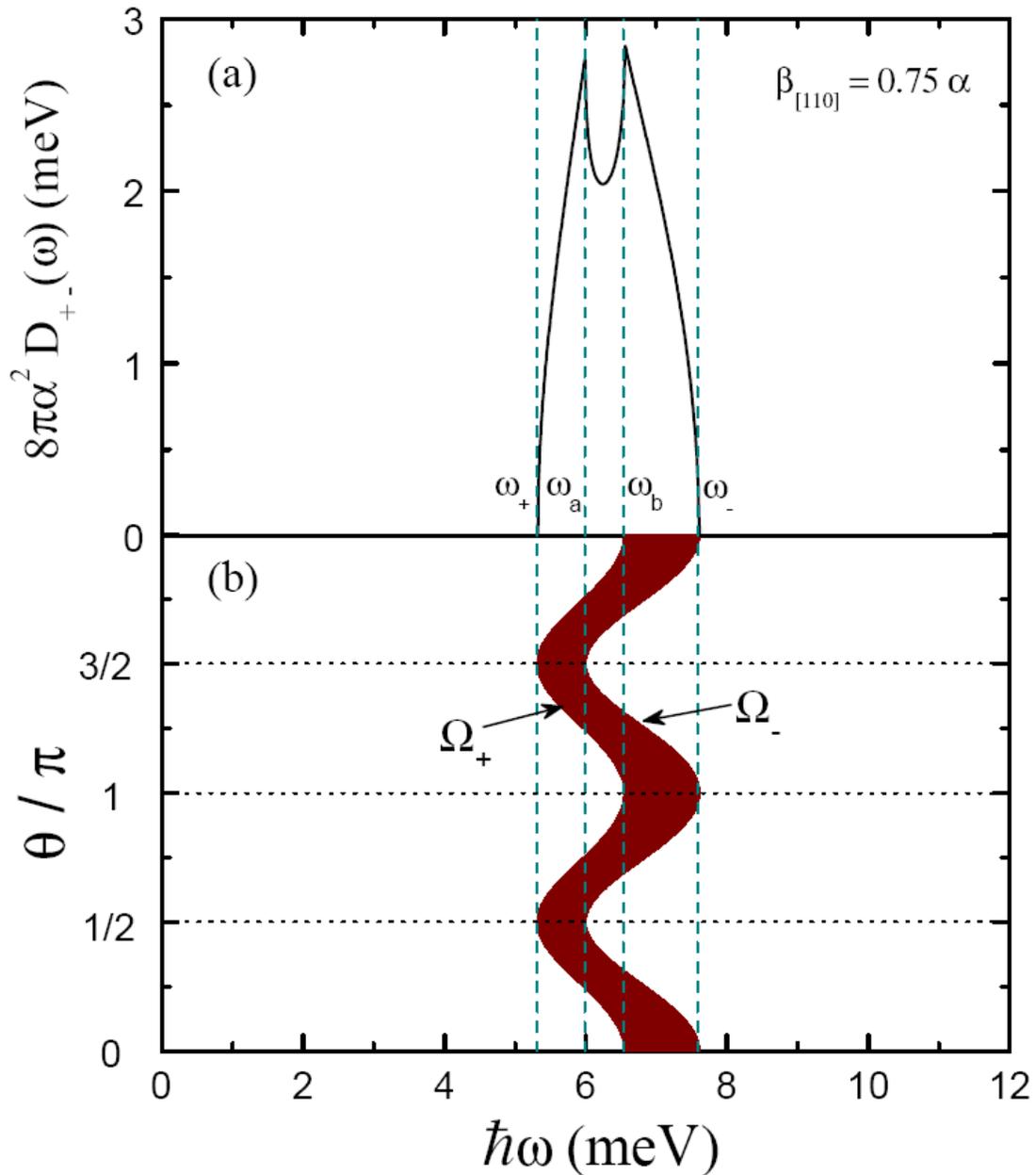


Figura 24: (a) Densidad conjunta de estados de un GE2D con acoplamiento R+D[110].(b) Región angular en el espacio k disponible para las transiciones de  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , donde  $\omega_+ = \Omega_+(\pi/2)$ ,  $\omega_a = \Omega_-(\pi/2)$ ,  $\omega_b = \Omega_+(\pi)$ ,  $\omega_- = \Omega_-(\pi)$ .

#### 4.5 Dependencia de la temperatura de los coeficientes fenomenológicos

Usando los resultados de las secciones anteriores, en lo que sigue se muestran los cálculos de la dependencia de la temperatura de los coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$ . Como ejemplo consideraremos, como lo hicimos antes, la conductividad de carga eléctrica  $L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ .

Analicemos primero el caso correspondiente al acoplamiento Rashba. En la Figura 25.a se muestra el cálculo numérico de la parte real de la conductividad eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ , dada por la ecuación (90), como función de la frecuencia  $\omega$  a diferentes temperaturas. En primer lugar, observamos que a  $T = 0$  (curva negra) la conductividad toma un valor constante en el rango de frecuencias  $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_-$ . De lo estudiado con anterioridad, sabemos que el origen de las frecuencias características  $\omega_{\pm}$  es resultado del desdoblamiento isotrópico de los estados de espín (véase la ecuación 102). Por lo tanto, la estructura en  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  se puede entender en términos de procesos de absorción de energía y transiciones entre las sub-bandas  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  y  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , a un ángulo determinado en el espacio  $\mathbf{k}$ .

En el límite de temperatura cero, la función de distribución de Fermi se convierte en una función escalón, por lo tanto la absorción está permitida sólo en un rango de frecuencias  $\Delta\omega$  bien definido, el cual está determinado por la ecuación (103). No obstante, al aumentar la temperatura ocurre un ensanchamiento térmico de la función de distribución de Fermi, de tal manera que ahora esta absorción se puede realizar a frecuencias  $\omega$  fuera del rango  $\Delta\omega$  definido a  $T = 0$ ; esto se ilustra en la Figura 25.a cuando  $T = 20$  K (curva roja). Para corroborar estos resultados, en la Figura 25.b se muestra  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la temperatura  $T$  a distintas frecuencias. Observamos que a  $T = 0$  sólo hay estructura en la conductividad para aquéllas  $\omega$  en  $\Delta\omega$ , como es el caso de  $\hbar\omega = 5.5$  meV; sólo al aumentar la temperatura, la conductividad tiene estructura en frecuencias  $\omega$  que están fuera de  $\Delta\omega$ , tales como  $\hbar\omega = 5$  meV y  $\hbar\omega = 6.5$  meV. Asimismo, se observa que al aumentar la temperatura  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega) \rightarrow 0$ . Estos resultados son consistentes con los reportados en la literatura (Li et al., 2008).

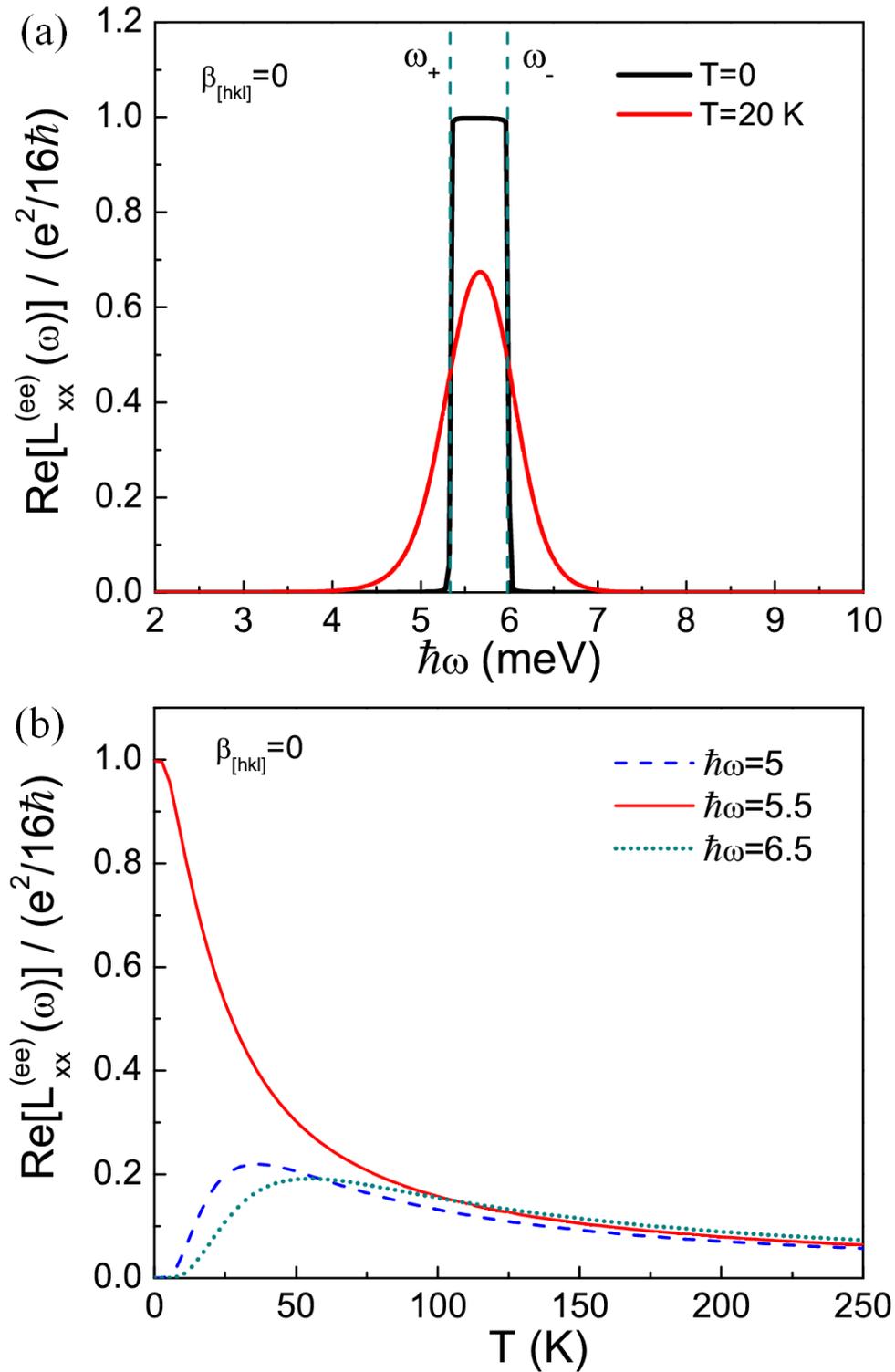


Figura 25: (a) Contribución espín-órbita tipo Rashba a la conductividad de carga eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia, para distintos valores de la temperatura. (b)  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la temperatura, para distintos valores de la frecuencia. Los parámetros usados son  $\alpha = 0.16 \text{ eV}\text{\AA}$ ,  $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $m^* = 0.05 m_0$  y  $E_F = 23.7 \text{ meV}$ .

Pasamos ahora al caso correspondiente al acoplamiento conjunto R+D[001]. En la Figura 26 se muestra el cálculo numérico de la componente longitudinal  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia  $\omega$  a diferentes temperaturas. En particular, a  $T = 0$  se observa estructura en las frecuencias características  $\omega_{\pm}, \omega_a$  y  $\omega_b$  las cuales, de acuerdo a lo estudiado en la sección 4.4.2, sabemos que son resultado de ciertas transiciones intersub-banda determinadas por la anisotropía del acoplamiento R+D[001] (véase Figura 22). Por lo tanto, podemos concluir que el comportamiento espectral de la conductividad eléctrica es resultado del desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín descrito por la función angular  $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta$  (ecuación 20). En la figura también observamos que a  $T = 20$  K hay estructura en un mayor intervalo de frecuencias que a  $T = 0$ , lo cual es consecuencia del ensanchamiento térmico de la función de distribución de Fermi, tal como ocurre en el caso donde sólo hay acoplamiento Rashba (Figura 25.a).

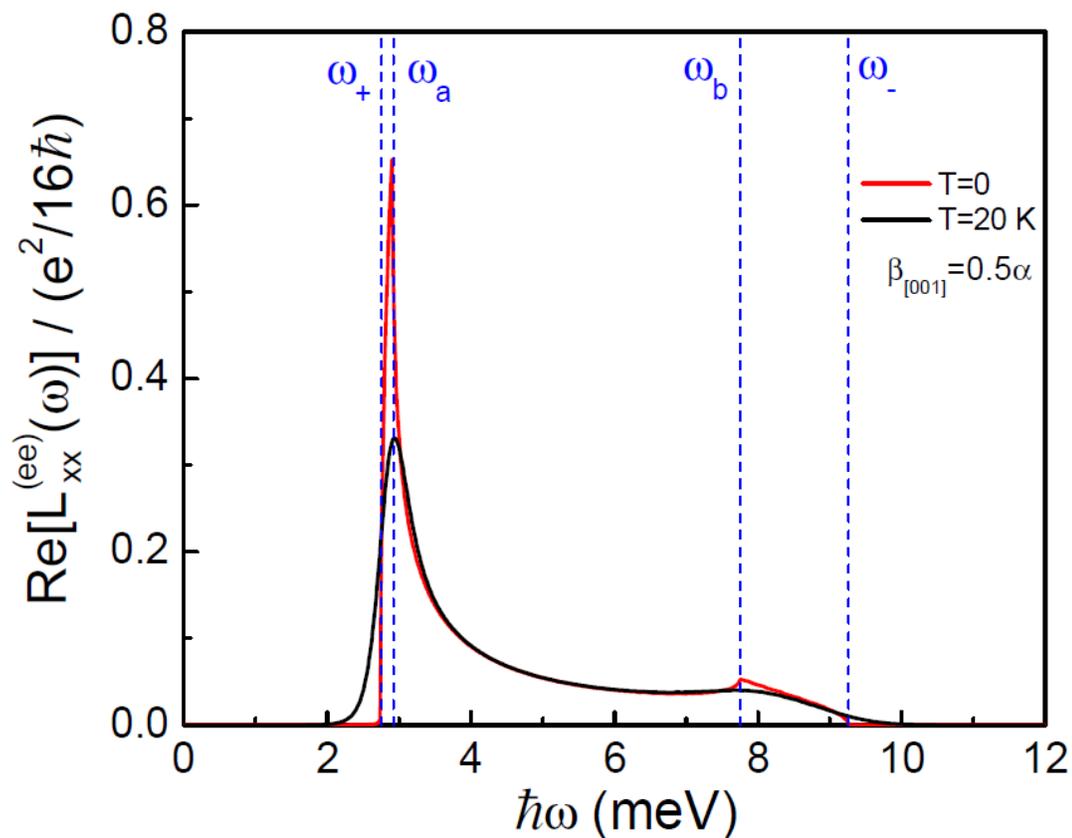


Figura 26: Contribución espín-órbita R+D[001] a la conductividad de carga eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia, a  $T = 0$  y  $T = 20$  K. Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 25.

Por último, consideramos el caso correspondiente al acoplamiento R+D[110]. En la Figura 27 se muestra  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia  $\omega$  a diferentes temperaturas. Se puede observar que el espectro de  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  es más simétrico comparado con el caso con acoplamiento R+D[001] mostrado en la Figura 26, dicha simetría se debe a la función angular  $\Delta^2(\theta) = \alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2\theta$  correspondiente al acoplamiento R+D[110]. También se observa estructura en las correspondientes frecuencias características  $\omega_{\pm}, \omega_a$  y  $\omega_b$ . Por lo tanto, siguiendo un análisis similar al caso con acoplamiento R+D[001], podemos concluir que el comportamiento espectral de  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  es resultado de ciertas transiciones intersub-banda, las cuales están determinadas por la anisotropía del acoplamiento R+D[110] (veáse Figura 24).

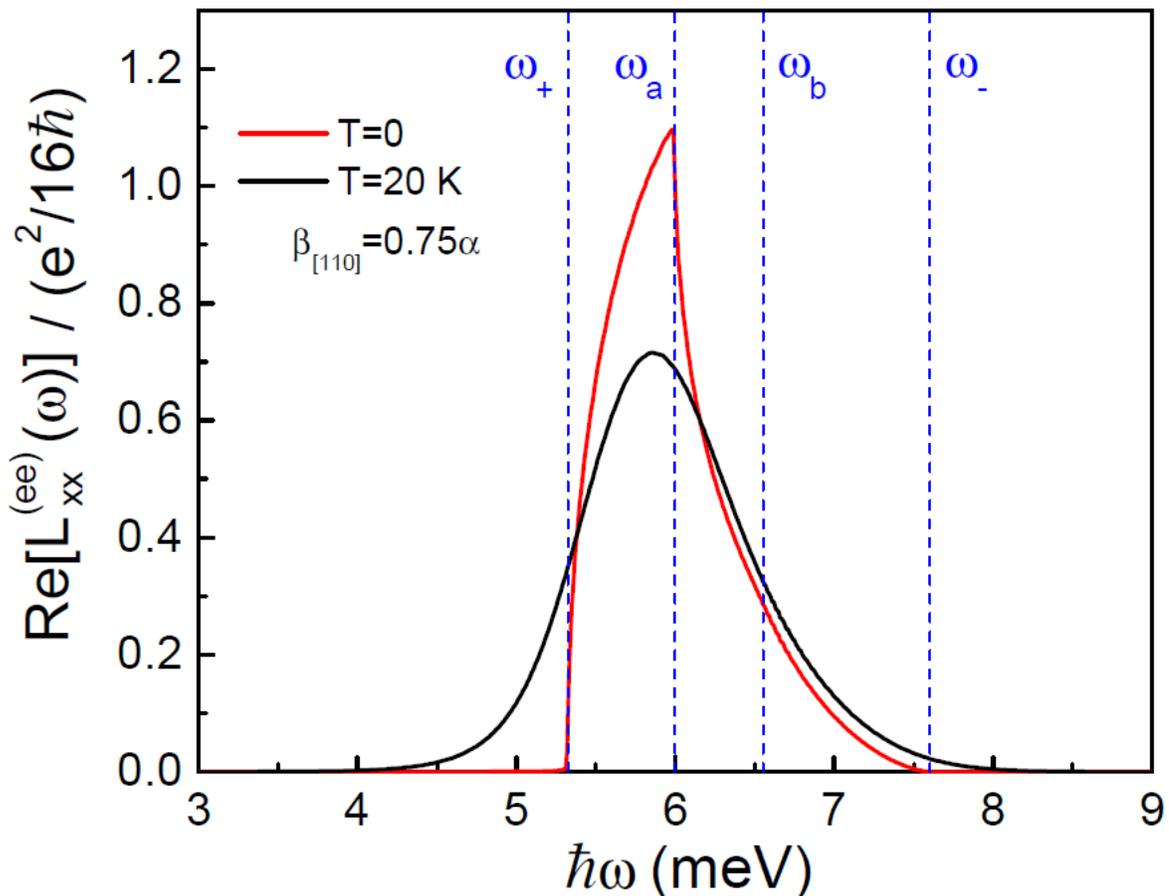


Figura 27: Contribución espín-órbita R+D[110] a la conductividad de carga eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia, a  $T = 0$  y  $T = 20$  K. Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 25.

Finalmente, se verifica que los coeficientes  $L_{ij}^{(se)z}$ ,  $L_{ij}^{(sq)z}$  y  $L_{ij}^{(eq)}$  muestran un comportamiento espectral cualitativamente similar al coeficiente  $L_{ij}^{(ee)}$  descrito en esta sección. En general, los resultados obtenidos nos permiten concluir que las propiedades espectrales de las funciones respuesta  $L_{ij}^{(\xi\nu)}$  también se pueden entender en términos de procesos de absorción de energía y transiciones verticales entre las sub-bandas  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  y  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ .

#### 4.6 Resumen de resultados

En este capítulo utilizamos el formalismo de la teoría de la respuesta lineal para obtener y evaluar las expresiones generales de los coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$ , en respuesta lineal a campos eléctricos y gradientes de temperatura que se aplican en el plano de un GE2D con interacción espín-órbita R+D[ $hkl$ ].

En la sección 4.4 se analizó la densidad conjunta de estados reportada previamente en la literatura (Maytorena et al., 2006; Iglesias et al., 2010), con el objetivo de entender y describir la forma y estructura de los coeficientes  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$ . Los resultados de la sección 4.4 nos permitieron concluir que la forma espectral que se observa en las Figuras 25, 26 y 27, es resultado de ciertas transiciones verticales que se pueden realizar entre las sub-bandas  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  y  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$  separadas por una energía  $\hbar\omega$ . Dichas transiciones están determinadas por el tipo de interacción espín-órbita presente en el gas de electrones. Nuestros resultados muestran que la anisotropía que resulta de la presencia simultánea del acoplamiento Rashba y Dresselhaus[ $hkl$ ], da lugar a un comportamiento espectral diferente del correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico.

Además, observamos que al aumentar la temperatura ocurre un ensanchamiento térmico de la función de distribución de Fermi, de tal forma que la absorción se puede realizar a frecuencias  $\omega$  fuera del rango  $\Delta\omega$  definido a  $T = 0$ . Estos resultados como función de la temperatura, sugieren una nueva posibilidad de acceder a los estados de espín a través de perturbaciones térmicas, además de la conocida modulabilidad de los parámetros de acoplamiento.

## 5. Efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico

---

En sistemas con interacción espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$ , se han derivado fórmulas que conectan las conductividades eléctrica  $L_{ij}^{(ee)}$  y de espín  $L_{ij}^{(se)k}$ . De esta manera, vía la IEO, se han establecido conexiones entre las corrientes eléctrica y de espín inducidas por un campo eléctrico. Estas conexiones pueden resultar útiles pues, en principio, en un experimento es más fácil detectar una corriente eléctrica que una corriente de espín (Dimitrova, 2005; Erlingsson et al., 2005; Shekhter et al., 2005; Maytorena et al., 2006; Raichev, 2007).

En este capítulo extendemos estas relaciones para incluir conexiones entre las corrientes eléctrica y de espín como respuesta a un gradiente de temperatura. A través de dichas conexiones, válidas estrictamente para los acoplamientos Rashba y Dresselhaus[ $hkl$ ] lineal en  $\mathbf{k}$ , demostraremos que el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico se anula (Iglesias et al., 2014). Este resultado difiere drásticamente de la predicción de Z. Ma (2010), único trabajo sobre el tema, y que además considera únicamente el acoplamiento Rashba. En este sentido, en el estudio de Alomar et al. (2015) donde proponen un transistor de espín vía el efecto termoeléctrico en un GE2D con acoplamiento Rashba (véase Figura 11.b), reportan la anulación del efecto Seebeck de espín cuando los contactos no son magnéticos.

### 5.1 Termocorriente Hall de espín

Recordemos que en la sección 4.1 se discutió que la presencia simultánea de un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y un gradiente de temperatura  $\nabla T$ , puede inducir corrientes de carga eléctrica  $\mathbf{J}^{(e)}$  y de espín  $\mathbf{J}^{(s)k}$ . En el régimen de respuesta lineal, las correspondientes ecuaciones fenomenológicas de transporte están dadas por (34) y (36), las cuales a su vez se pueden escribir en la forma (37) y (39), respectivamente. En este contexto, usualmente en el estudio de los fenómenos termoeléctricos se considera que el sistema está eléctricamente aislado, de tal forma que no hay una corriente eléctrica neta que fluye en el sistema, esto es,  $\mathbf{J}^{(e)} = 0$  (Nolas et al., 2001); en este caso, de acuerdo a la ecuación (37) un gradiente de temperatura puede inducir un campo eléctrico interno, conocido como campo termoeléctrico, dado por

$$E_i = S_{ij} \nabla_j T, \quad (117)$$

donde  $S_{ij}$  es el coeficiente Seebeck o termopotencia, y según la ecuación (41) está dado por

$$S_{ij} = \frac{1}{T} [L^{(ee)}]_{il}^{-1} L_{lj}^{(eq)} . \quad (118)$$

Bajo estas condiciones, podría preguntarse si este campo puede generar una corriente de espín vía el efecto termoeléctrico, es decir, si es posible generar un efecto Hall de espín inducido por un gradiente de temperatura pero a través del efecto termoeléctrico. Este problema ha sido abordado únicamente por Z. Ma (2010), quien calculó la conductividad Hall de espín vía el efecto termoeléctrico en un GE2D sólo con acoplamiento Rashba (estos resultados se discutirán en la sección 5.3.1). Este fenómeno también se conoce como efecto Nernst de espín. En el presente capítulo, extenderemos este fenómeno incorporando el caso de un GE2D con acoplamiento conjunto R+D[ $hkl$ ]. Esto es importante pues la anisotropía del desdoblamiento de los estados de espín abre la posibilidad de lograr un control sobre los estados de espín mediante variaciones de la frecuencia y dirección de la perturbación externa aplicada, así como de la modulabilidad de los parámetros de acoplamiento (veáanse Figuras 4 y 5).

Consideremos un GE2D aislado eléctricamente, de tal forma que  $\mathbf{J}^{(e)} = 0$ , por lo tanto, de acuerdo a la ecuación (39) un gradiente de temperatura  $\nabla_j T$  que se aplica en el plano del gas puede inducir, a través del efecto termoeléctrico, una *termocorriente de espín*  $J_i^{(s)k}$  dada por

$$J_i^{(s)k} = \Sigma_{ij}^{(s)k} \nabla_j T , \quad (119)$$

donde el tensor  $\Sigma_{ij}^{(s)k}$  recibe el nombre de *termoconductividad de espín*, el cual describe una termocorriente de espín que fluye en la dirección  $i$  con el espín polarizado en la dirección  $k$ , a causa de un gradiente de temperatura en la dirección  $j$ , y está dado por

$$\Sigma_{ij}^{(s)k} = \frac{1}{T} \left[ T L_{il}^{(se)k} S_{lj} - L_{ij}^{(sq)k} \right] . \quad (120)$$

Si se define, por analogía con el caso termoeléctrico (118), una *termopotencia de espín*  $S_{ij}^{(s)k}$  (Borge et al., 2013) como

$$S_{ij}^{(s)k} = \frac{1}{T} [L^{(se)k}]_{il}^{-1} L_{lj}^{(sq)k} , \quad (121)$$

entonces, la ecuación (120) se puede escribir en la forma

$$\Sigma_{ij}^{(s)k} = L_{il}^{(se)k} \left( S_{lj} - S_{lj}^{(s)k} \right) . \quad (122)$$

Sin pérdida de generalidad, en particular consideraremos un gradiente de temperatura  $\nabla T$  a lo largo de la dirección  $x$ , es decir,  $\nabla_y T = 0$  y  $\nabla_x T \neq 0$ , por lo tanto las únicas componentes en (120) son

$$\Sigma_{xx}^{(s)k} = \frac{1}{T} \left[ T \left( L_{xx}^{(se)k} S_{xx} + L_{xy}^{(se)k} S_{yx} \right) - L_{xx}^{(sq)k} \right] , \quad (123)$$

$$\Sigma_{yx}^{(s)k} = \frac{1}{T} \left[ T \left( L_{yx}^{(se)k} S_{xx} + L_{yy}^{(se)k} S_{yx} \right) - L_{yx}^{(sq)k} \right] . \quad (124)$$

La componente transversal  $\Sigma_{yx}^{(s)k}$ , llamada *termoconductividad Hall de espín*, describe una termocorriente Hall de espín  $J_y^{(s)k}$  que fluye perpendicular al gradiente de temperatura  $\nabla_x T$ , es decir, describe un efecto Hall de espín vía el efecto termoeléctrico. Mientras que la conductividad longitudinal  $\Sigma_{xx}^{(s)k}$ , es relevante para el efecto tipo Seebeck de espín que relaciona a una termocorriente de espín  $J_x^{(s)k}$  que fluye paralela al gradiente de temperatura  $\nabla_x T$ .

En las siguientes secciones se calculará la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)k}$  mencionada previamente. Para lograrlo, procederemos de la siguiente manera. Primero, se calcularán los coeficientes  $L_{ij}^{(\xi\nu)}$  tomando en cuenta el acoplamiento espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$ ; en este proceso, encontraremos fórmulas que conectan los coeficientes  $L_{ij}^{(e\nu)}$  y  $L_{ij}^{(s\nu)k}$ . Finalmente, tales conexiones nos permitirán demostrar que la termoconductividad  $\Sigma_{ij}^{(s)k}$  se cancela de forma exacta (Iglesias et al., 2014).

## 5.2 Conexiones entre los coeficientes termoespintrónicos

De acuerdo a lo estudiado en el capítulo 4, sabemos que la contribución del acoplamiento espín-órbita a la conductividad  $L_{ij}^{(e\nu)}(\omega)$ , con  $\nu = e, q$ , se puede determinar por la fórmula de Kubo (74) en términos de la correlación corriente de carga eléctrica-corriente  $\nu$ , esto es,

$$L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_i^{(e)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 , \quad \tilde{\omega} = \omega + i\eta, \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (125)$$

donde los brackets están dados por

$$\langle [\hat{J}_i^{(e)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 = \sum_{\nu} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})) \langle \nu \mathbf{k} | [\hat{J}_i^{(e)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] | \nu \mathbf{k} \rangle . \quad (126)$$

La integración por partes de (125) da

$$\begin{aligned} L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \left[ \frac{1}{i\tilde{\omega}} e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_i^{(e)}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0^{\infty} - \frac{1}{i\tilde{\omega}} \int_0^{\infty} dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\hat{J}_i^{(e)}(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle \right] \\ &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \langle [\hat{J}_i^{(e)}(0), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle + \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^{\infty} dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\hat{J}_i^{(e)}(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle . \end{aligned} \quad (127)$$

Al evaluar numéricamente el primer término de (127) se obtiene que  $\langle [\hat{J}_i^{(e)}(0), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle = 0$ , de modo que la ecuación (127) se reduce a

$$L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^{\infty} dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\hat{J}_i^{(e)}(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle . \quad (128)$$

Para obtener la evolución temporal del operador de corriente de carga  $\hat{J}_i^{(e)}$ , usaremos la ecuación de movimiento de Heisenberg

$$i\hbar \frac{d\hat{J}_i^{(e)}}{dt} = [\hat{J}_i^{(e)}, H] = e[\hat{v}_i, H] , \quad (129)$$

donde  $\hat{v}_i$  es el operador de velocidad y el Hamiltoniano  $H$  está dado por la ecuación (6). De acuerdo a lo estudiado con anterioridad, sabemos que si sólo se considera el acoplamiento espín-órbita lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$ , el campo espín órbita  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  y el operador de velocidad  $\hat{v}_i$  están dados por las ecuaciones (15) y (77), respectivamente; por lo tanto, si usamos estas ecuaciones en (129) obtenemos

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{J}_i^{(e)}}{dt} &= \frac{e}{\hbar} [\sigma_m \lambda_{mi}, \sigma_l \lambda_{ln} k_n] \\ &= \frac{e}{\hbar} \lambda_{mi} \lambda_{ln} k_n [\sigma_m, \sigma_l] \\ &= \frac{i2e}{\hbar} \epsilon_{mlp} \lambda_{mi} \lambda_{ln} k_n \sigma_p , \end{aligned} \quad (130)$$

donde se usó la regla de conmutación de las matrices de Pauli  $[\sigma_m, \sigma_l] = i2\epsilon_{mlp}\sigma_p$ , además recordemos que  $\lambda_{ij} = (\hbar/2)\partial\Omega_i/\partial k_j$  está dada por la ecuación (16) y es una matriz determi-

nada sólo por los parámetros de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta_{[hkl]}$ .

Por otro lado, de acuerdo a la ecuación (80), el operador de corriente de espín  $\hat{J}_i^{(s)j}$  está dado por

$$\hat{J}_i^{(s)j} = \frac{\hbar^2}{2m^*} k_i \sigma_j + \frac{1}{2} \lambda_{ji} . \quad (131)$$

Podemos despejar el término  $k_i \sigma_j$  de (131) y sustituirlo en (130), de modo que

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{J}_i^{(e)}}{dt} &= \frac{i2e}{\hbar} \frac{2m^*}{\hbar^2} \epsilon_{pml} \lambda_{mi} \lambda_{ln} \left( \hat{J}_n^{(s)p} - \frac{\lambda_{pn}}{2} \right) \\ &= \frac{i4em^*}{\hbar^3} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_n)_p \hat{J}_n^{(s)p} - \frac{i2em^*}{\hbar^3} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_n)_p \lambda_{pn} , \end{aligned} \quad (132)$$

donde  $\boldsymbol{\lambda}_i$  es el vector con componentes  $\lambda_{ij}$  definido por la  $j$ -ésima columna de la matriz (16).

Tomando en cuenta que  $(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_n)_p \lambda_{pn} = (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_n) \cdot \boldsymbol{\lambda}_n = 0$ , obtenemos

$$\frac{d\hat{J}_i^{(e)}}{dt} = \frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k \hat{J}_l^{(s)k} . \quad (133)$$

Con este resultado podemos escribir la ecuación (128) como

$$\begin{aligned} L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [ \frac{4em^*}{\hbar^4} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k \hat{J}_l^{(s)k}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0) ] \rangle \\ &= \frac{i4em^*}{\hbar^5\tilde{\omega}^2} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [ \hat{J}_l^{(s)k}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0) ] \rangle . \end{aligned} \quad (134)$$

En esta expresión podemos identificar la conductividad de espín  $L_{lj}^{(s\nu)k}(\omega)$ , por lo tanto la ecuación (134) se puede escribir en la forma

$$L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = \frac{i4em^*}{\hbar^4\tilde{\omega}} (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k L_{lj}^{(s\nu)k}(\omega) . \quad (135)$$

De esta manera obtenemos un resultado importante, una fórmula que relaciona la conductividad  $L_{ij}^{(e\nu)}(\omega)$  con la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$ . Además, esta relación se puede reescribir en la forma

$$L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = i \left( \frac{G_0}{\Sigma_0} \right) \left[ \frac{m^* (\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k / \hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \right] L_{lj}^{(s\nu)k}(\omega) , \quad (136)$$

donde el término entre los corchetes es adimensional. La expresión (136) está escrita en

términos del cuanto de conductancia eléctrica  $G_0 = e^2/2\pi\hbar$  y la unidad de la conductancia Hall de espín  $\Sigma_0 = e/8\pi$ .

Como ejemplo de aplicación de la relación (136), vamos a considerar la conductividad Hall de espín  $L_{xy}^{(sq)z}(\omega)$  inducida térmicamente en un GE2D con acoplamiento R+D[001] lineal en  $\mathbf{k}$ . En la Figura 28 se muestra el cálculo numérico de la componente  $\text{Re}L_{xy}^{(sq)z}(\omega)$ , como función de la frecuencia  $\omega$  a una temperatura fija; en este caso se utilizaron distintos valores del parámetro de acoplamiento  $\beta_{[001]}$ , manteniendo fijo el valor de  $\alpha$ . En primer lugar, observamos que la estructura del espectro depende de la frecuencia  $\omega$  y de los parámetros de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta_{[001]}$ . Cabe mencionar que, a bajas temperaturas, las resonancias ocurren cerca de las frecuencias características  $\omega_{\pm}, \omega_a$  y  $\omega_b$  (no dibujadas en la figura), las cuales son resultado de ciertas transiciones intersub-banda determinadas por la anisotropía del acoplamiento R+D[001], tal como se dicutió en la sección 4.4.2.

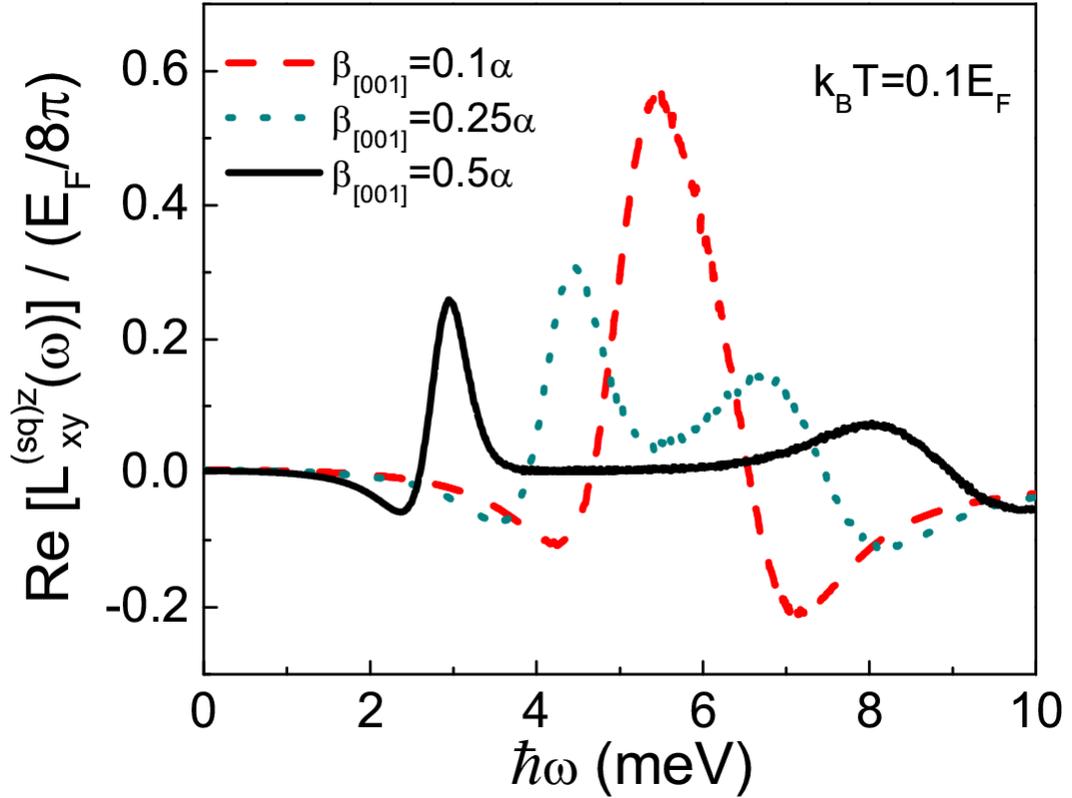


Figura 28: Contribución espín-órbita a la conductividad de espín  $\text{Re}L_{xy}^{(sq)z}(\omega)$  como función de la frecuencia  $\omega$ , para distintos valores de  $\beta_{[001]}$ . Los parámetros usados son  $\alpha = 0.16 \text{ eV}\text{\AA}$ ,  $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $m^* = 0.05 m_0$  y  $E_F = 23.7 \text{ meV}$ .

Por otro parte, a partir de la ecuación (136) vemos que las componentes de la conductividad termoeléctrica  $L_{ij}^{(eq)}(\omega)$  están relacionadas con las componentes de la conductividad de espín  $L_{ij}^{(sq)z}(\omega)$ . Podemos decir por tanto que el comportamiento espectral de  $L_{ij}^{(eq)}(\omega)$  también se pueden entender en términos de procesos de absorción de energía y transiciones intersub-banda.

A partir de estos resultados, podemos concluir que las características espectrales mostradas en la Figura 28 sugieren nuevas posibilidades de manipular el espín vía perturbaciones térmicas, además de la conocida modulabilidad de los parámetros de acoplamiento  $\alpha$  y  $\beta_{[hkl]}$ .

En este punto es importante señalar que, en presencia de la interacción espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$ , diversos autores han derivado fórmulas que relacionan la conductividad eléctrica  $L_{ij}^{(ee)}$  y la conductividad Hall de espín  $L_{ij}^{(se)k}$ , fórmulas que a su vez han permitido establecer relaciones entre la corriente eléctrica  $J_i^{(e)}$ , la corriente de espín  $J_i^{(s)k}$  y la densidad de espín  $S_i$  inducidas por un campo eléctrico (Dimitrova, 2005; Erlingsson et al., 2005; Shekhter et al., 2005; Maytorena et al., 2006; Raichev, 2007; Iglesias et al., 2010). Dichas relaciones pueden ser útiles pues, en principio, en un experimento resulta más fácil detectar una densidad de espín que una corriente de espín. No obstante, la relación entre la conductividad termoeléctrica  $L_{ij}^{(eq)}$  y la conductividad Hall de espín  $L_{ij}^{(sq)k}$  inducida térmicamente, no ha sido reportada previamente (Iglesias et al., 2014).

En este contexto, a partir de la ecuación (136) es posible obtener una relación entre la corriente eléctrica  $J_i^{(e)}(\omega)$  y la corriente de espín  $J_i^{(s)k}(\omega)$ ; esto se logra sustituyendo (136) en la ecuación (34), con lo cual se obtiene

$$\begin{aligned} J_i^{(e)}(\omega) &= L_{ij}^{(ee)}(\omega) E_j + L_{ij}^{(eq)}(\omega) \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right) \\ &= i \left( \frac{G_0}{\Sigma_0} \right) \left[ \frac{m^*(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k / \hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \right] \left[ L_{lj}^{(se)k}(\omega) E_j + L_{lj}^{(sq)k}(\omega) \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right) \right], \end{aligned} \quad (137)$$

aquí se puede identificar la corriente de espín  $J_l^{(s)k}(\omega)$ , por lo tanto, obtenemos la fórmula

$$J_i^{(e)}(\omega) = i \left( \frac{G_0}{\Sigma_0} \right) \left[ \frac{m^*(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k / \hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \right] J_l^{(s)k}(\omega). \quad (138)$$

Ésta también es una fórmula importante, ya que sugiere que bajo condiciones de corriente

eléctrica cero entonces la termocorriente de espín se cancela, esto es, si  $J_i^{(e)}(\omega) = 0$  se tiene que  $J_i^{(s)k}(\omega) = 0$  (Iglesias et al., 2014).

### 5.3 Cancelación de la termoconductividad de espín

Precisamente, con el objetivo de ilustrar la cancelación de la termocorriente de espín  $J_i^{(s)k}(\omega)$ , en las siguientes secciones se calculará explícitamente la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)k}(\omega)$  dada por la ecuación (120), para lo cual es necesario calcular los coeficientes Seebeck  $S_{ij}(\omega)$  y  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$ . Mostraremos que  $\Sigma_{ij}^{(s)k}(\omega)$  se cancela, aún cuando de manera individual los coeficientes  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  son distintos de cero (véanse las Figuras 25, 26, 27 y 28). Se considerarán los casos correspondientes al acoplamiento R+D[ $hkl$ ] lineal en  $\mathbf{k}$  (15).

#### 5.3.1 Acoplamiento isotrópico

Para comenzar este análisis consideremos el caso de un GE2D con acoplamiento isotrópico, por ejemplo, con acoplamiento Rashba ( $\alpha \neq 0$ ,  $\beta_{[hkl]} = 0$ ). En este caso, de la ecuación (16) se sigue que  $\boldsymbol{\lambda}_x = -\alpha \hat{\mathbf{y}}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}_y = \alpha \hat{\mathbf{x}}$  y  $\boldsymbol{\lambda}_z = 0$ , por lo tanto  $\boldsymbol{\lambda}_x \times \boldsymbol{\lambda}_y = \alpha^2 \hat{\mathbf{z}}$ , esto implica que la energía característica en la ecuación (136) se reduce a

$$\frac{m^*(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k}{\hbar^2} = \frac{m^*\alpha^2}{\hbar^2} \epsilon_{ilk} \delta_{kz}, \quad (139)$$

es decir, sólo la componente  $k = z$  es distinta de cero. Usando (139) en (138) tenemos que  $J_x^{(e)} \propto J_y^{(s)z}$  y  $J_y^{(e)} \propto -J_x^{(s)z}$ , por lo tanto si  $J_i^{(e)} = 0$  entonces  $J_i^{(s)z} = 0$ , es decir, la termocorriente de espín se cancela si no hay una corriente eléctrica que fluye a través del sistema.

Tomando en cuenta las ecuaciones (136) y (139), en lo que sigue, nos enfocaremos únicamente en el coeficiente  $L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega)$ . Recordemos que las conductividades de espín  $L_{ij}^{(se)z}(\omega)$  y  $L_{ij}^{(sq)z}(\omega)$  describen una corriente de espines polarizados en la dirección  $z$ , que se transportan en la dirección  $i$  como respuesta a un campo eléctrico y a un gradiente de temperatura en la dirección  $j$ , respectivamente (sección 4.1).

Al evaluar numéricamente la conductividad  $L_{ij}^{(e\nu)}(\omega)$  obtenemos que es diagonal e isotrópica, esto es,  $L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = L_{xx}^{(e\nu)}(\omega) \delta_{ij}$ ; este resultado implica a su vez que el tensor  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1}$  también

es diagonal y está dado por  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1} = (1/L_{xx}^{(ee)}) \delta_{ij}$ . De manera similar, obtenemos que la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega)$  es no diagonal sino que  $L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega) = L_{xy}^{(s\nu)z}(\omega) \epsilon_{ijz}$ . El uso de estas propiedades de simetría puede ayudar considerablemente a simplificar los cálculos, por ejemplo, del coeficiente Seebeck o la termoconductividad de espín como lo veremos a continuación.

Usando las propiedades de simetría mencionadas previamente y la energía (139), obtenemos que la ecuación (136) se reduce a

$$L_{xx}^{(e\nu)}(\omega) = i \frac{G_0}{\Sigma_0} \left[ \frac{m^* \alpha^2 / \hbar^2}{\hbar \tilde{\omega}} \right] L_{yx}^{(s\nu)z}(\omega) . \quad (140)$$

Ahora bien, de acuerdo a la ecuación (118) las componentes del coeficiente Seebeck  $S_{ij}(\omega)$  son

$$S_{xx} = \frac{1}{T} \left( [L^{(ee)}]_{xx}^{-1} L_{xx}^{(eq)} + [L^{(ee)}]_{xy}^{-1} L_{yx}^{(eq)} \right) , \quad (141)$$

$$S_{yx} = \frac{1}{T} \left( [L^{(ee)}]_{yx}^{-1} L_{xx}^{(eq)} + [L^{(ee)}]_{yy}^{-1} L_{yx}^{(eq)} \right) . \quad (142)$$

Tomando en cuenta que  $L_{ij}^{(e\nu)}$  y  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1}$  son diagonales, de la ecuación (142) obtenemos que  $S_{yx}(\omega) = 0$ , mientras que el coeficiente  $S_{xx}(\omega)$  dado por la ecuación (141) se reduce a

$$S_{xx} = \frac{1}{T} \frac{L_{xx}^{(eq)}}{L_{xx}^{(ee)}} . \quad (143)$$

Para calcular termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}(\omega)$  emplearemos los resultados obtenidos hasta ahora. Analicemos primero la componente  $\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega)$  dada por la ecuación (123). Como se dijo antes,  $S_{yx}(\omega) = 0$  y la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega)$  es no diagonal, por lo tanto, usando estos resultados en (123) obtenemos que  $\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega) = 0$ .

De manera similar, analicemos ahora la termoconductividad Hall de espín  $\Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega)$  dada

por la ecuación (124). Sustituyendo (143) en (124) da

$$\Sigma_{yx}^{(s)z} = \frac{1}{T} [TL_{yx}^{(se)z} S_{xx} - L_{yx}^{(sq)z}] \quad (144)$$

$$= \frac{1}{T} \left[ L_{yx}^{(se)z} \frac{L_{xx}^{(eq)}}{L_{xx}^{(ee)}} - L_{yx}^{(sq)z} \right], \quad (145)$$

y usando la relación (140) en (145), obtenemos que

$$\Sigma_{yx}^{(s)z} = \frac{1}{T} \left[ L_{yx}^{(se)z} \frac{L_{yx}^{(sq)z}}{L_{yx}^{(se)z}} - L_{yx}^{(sq)z} \right] = 0, \quad (146)$$

es decir, la termoconductividad Hall de espín  $\Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega)$  también se cancela, como ocurre con la componente  $\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega)$ . Estos resultados demuestran de manera explícita que, en efecto, la termocorriente de espín  $J_i^{(s)z}(\omega)$  se cancela bajo condiciones de corriente eléctrica cero, tal como lo establece la relación (138).

Como se mencionó previamente, Z. Ma (2010) calculó vía fórmulas de Kubo la parte real de la termoconductividad Hall de espín denotada por  $\sigma_{TH}^{SH} \equiv \mathbb{Re}\Sigma_{yx}^{(s)z}$ , para ello consideró un GE2D aislado eléctricamente y en presencia del acoplamiento Rashba. En dicho trabajo se reporta que

$$\sigma_{TH}^{SH} = \frac{1}{T} \mathbb{Re} [TL_{yx}^{(se)z} S_{xx} - L_{yx}^{(sq)z}]. \quad (147)$$

Notemos que ésta expresión es formalmente idéntica a la ecuación (144). En la Figura 29 se muestra el resultado de Z. Ma de la conductividad  $\sigma_{TH}^{SH}$  como función de la temperatura  $T$  y del parámetro de acoplamiento Rashba denotado por  $\lambda$ , manteniendo fijo el valor de la frecuencia  $\omega$ . Mientras que en el recuadro de la figura se muestra  $\sigma_{TH}^{SH}$  a una temperatura fija, como función de  $\omega$  y a distintos valores de  $\lambda$ . Se observa que la conductividad  $\sigma_{TH}^{SH}$  no se cancela en un determinado intervalo de frecuencias y para ciertos valores del parámetro de acoplamiento  $\lambda$ .

No obstante, de acuerdo a nuestro análisis la termoconductividad Hall de espín se cancela, tal como se muestra en la ecuación (146), resultado que contradice lo reportado por Z. Ma. La diferencia entre ambos resultados radica en el hecho de que Z. Ma considera sólo la parte

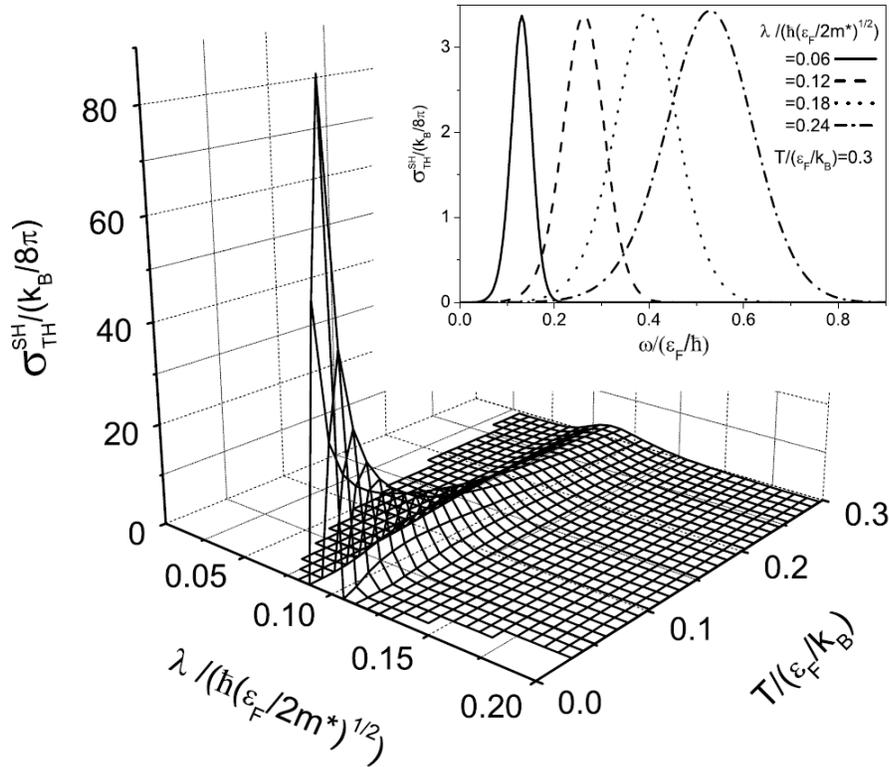
real del coeficiente Seebeck, es decir, considera que

$$S_{xx} = \Re \left[ \frac{1}{T} \frac{L_{xx}^{(eq)}}{L_{xx}^{(ee)}} \right], \quad (148)$$

de tal forma que al sustituir (148) en (147), obtiene

$$\sigma_{TH}^{SH} = \frac{1}{T} \Re \left[ L_{yx}^{(se)z} \Re \left( \frac{L_{xx}^{(eq)}}{L_{xx}^{(ee)}} \right) - L_{yx}^{(sq)z} \right]. \quad (149)$$

La evaluación de esta expresión conduce a la Figura 29. Ciertamente, el coeficiente Seebeck es un coeficiente complejo y en nuestro análisis, mostrado previamente, lo tratamos de esa manera. No resulta evidente que exista alguna condición o restricción física por la cual se tendría que considerar solamente la parte real del coeficiente Seebeck y descartar la contribución que proviene de la parte imaginaria.



**Figura 29:** Contribución espín-órbita a la parte real de la termoconductividad Hall de espín,  $\sigma_{TH}^{SH}$ , como función del parámetro de acoplamiento Rashba  $\lambda$  y la temperatura  $T$ . Aquí se usó  $\hbar\omega = 0.2E_F$  y sólo hay acoplamiento tipo Rashba. El recuadro muestra  $\sigma_{TH}^{SH}$  como función de la frecuencia para distintos valores del parámetro  $\lambda$  a una temperatura fija de  $k_B T = 0.3E_F$  (Ma, 2010).

### 5.3.2 Acoplamiento R+D[001]

Analizaremos ahora el caso de un GE2D con acoplamiento conjunto R+D[001], y para ello seguiremos un procedimiento análogo al de la sección anterior.

En este caso, de la ecuación (16) tenemos que  $\boldsymbol{\lambda}_x = -\beta_{[001]} \hat{\mathbf{x}} - \alpha \hat{\mathbf{y}}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}_y = \alpha \hat{\mathbf{x}} + \beta_{[001]} \hat{\mathbf{y}}$  y  $\boldsymbol{\lambda}_z = 0$ , entonces  $\boldsymbol{\lambda}_x \times \boldsymbol{\lambda}_y = (\alpha^2 - \beta_{[001]}^2) \hat{\mathbf{z}}$ . Por lo tanto, la energía característica que aparece en la ecuación (136) está dada por

$$\frac{m^*(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k}{\hbar^2} = \frac{m^*(\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)}{\hbar^2} \epsilon_{ilk} \delta_{kz}, \quad (150)$$

es decir, sólo la componente  $k = z$  es distinta de cero. Así, de (138) y (150) se tiene que  $J_x^{(e)} \propto J_y^{(s)z}$  y  $J_y^{(e)} \propto -J_x^{(s)z}$ , y por lo tanto  $J_i^{(e)} = 0$  implica que  $J_i^{(s)z} = 0$ , como ocurre cuando sólo está presente el acoplamiento Rashba.

A partir de la evaluación numérica obtenemos las relaciones de simetría  $L_{xx}^{(e\nu)}(\omega) = L_{yy}^{(e\nu)}(\omega)$ ,  $L_{xy}^{(e\nu)}(\omega) = L_{yx}^{(e\nu)}(\omega)$ ,  $L_{xx}^{(s\nu)z}(\omega) = -L_{yy}^{(s\nu)z}(\omega)$  y  $L_{xy}^{(s\nu)z}(\omega) = -L_{yx}^{(s\nu)z}(\omega)$ . Usando estas relaciones de simetría y la energía (150) en la ecuación (136), obtenemos

$$\begin{pmatrix} L_{xj}^{(e\nu)}(\omega) \\ L_{yj}^{(e\nu)}(\omega) \end{pmatrix} = i \frac{G_0}{\Sigma_0} \left( \frac{m^*(\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)/\hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \right) \begin{pmatrix} L_{yj}^{(s\nu)z}(\omega) \\ -L_{xj}^{(s\nu)z}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (151)$$

Usando estas relaciones para reescribir el coeficiente Seebeck en términos de  $L^{(s\nu)z}$ , no es difícil demostrar que las componentes longitudinal y transversal de la termocorriente de espín (123) y (124) se cancelan,  $\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega) = \Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega) = 0$ .

### 5.3.3 Acoplamiento R+D[110]

De manera análoga, en la presente sección se muestra la cancelación de la termoconductividad de espín considerando un GE2D con acoplamiento R+D[110].

Como se hizo antes, a partir de la ecuación (16) tenemos que  $\boldsymbol{\lambda}_x = -\alpha \hat{\mathbf{y}} + \beta_{[110]} \hat{\mathbf{z}}$ ,  $\boldsymbol{\lambda}_y = \alpha \hat{\mathbf{x}}$

y  $\boldsymbol{\lambda}_z = 0$ , entonces  $\boldsymbol{\lambda}_x \times \boldsymbol{\lambda}_y = \alpha\beta_{[110]} \hat{\mathbf{y}} + \alpha^2 \hat{\mathbf{z}}$ . Por lo tanto, la energía en la ecuación (136) es

$$\frac{m^*(\boldsymbol{\lambda}_i \times \boldsymbol{\lambda}_l)_k}{\hbar^2} = \frac{m^*\alpha^2}{\hbar^2} \epsilon_{ilk} \delta_{kz} + \frac{m^*\alpha\beta_{[110]}}{\hbar^2} \epsilon_{ilz} \delta_{ky}. \quad (152)$$

Notablemente, además de la componente  $k = z$ , aparece una componente en la dirección  $k = y$ , esto representa una diferencia significativa respecto a los casos con acoplamiento Rashba y R+D[001] (véase ecuaciones (139) y (150)). En consecuencia, al sustituir (152) en la ecuación (136) obtenemos

$$L_{ij}^{(e\nu)}(\omega) = i \frac{G_0}{\Sigma_0} \frac{m^*\alpha/\hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \epsilon_{ilz} \left( \alpha L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega) + \beta_{[110]} L_{ij}^{(s\nu)y}(\omega) \right). \quad (153)$$

Además, encontramos las siguientes relaciones de simetría. El coeficiente  $L_{ij}^{(e\nu)}(\omega)$  es diagonal y anisotrópico, esto es,  $L_{xx}^{(e\nu)}(\omega) \neq L_{yy}^{(e\nu)}(\omega)$ , por lo tanto el tensor  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1}$  también es diagonal y está dado por  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1} = (1/L_{ij}^{(ee)}) \delta_{ij}$ . En lo que se refiere a la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$ , se obtiene que  $L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega)$  es no diagonal y anisotrópico,  $L_{xy}^{(s\nu)z}(\omega) \neq L_{yx}^{(s\nu)z}(\omega)$ . También encontramos la relación  $\beta_{[110]} L_{ij}^{(s\nu)z}(\omega) = \alpha L_{ij}^{(s\nu)y}(\omega)$ , o equivalentemente  $\beta_{[110]} J_l^{(s)z}(\omega) = \alpha J_l^{(s)y}(\omega)$ . Estos resultados conducen de nuevo a una conexión de la forma  $J_i^{(e)} \propto \epsilon_{ilz} J_l^{(s)z}$ , lo cual implica que la termocorriente de espín se anula cuando  $J_i^{(e)} = 0$ . Además, usando estas propiedades de simetría, la ecuación (153) se reduce a

$$\begin{pmatrix} L_{xx}^{(e\nu)}(\omega) \\ L_{yy}^{(e\nu)}(\omega) \end{pmatrix} = i \frac{G_0}{\Sigma_0} \left( \frac{m^*(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2)/\hbar^2}{\hbar\tilde{\omega}} \right) \begin{pmatrix} L_{yx}^{(s\nu)z}(\omega) \\ -L_{xy}^{(s\nu)z}(\omega) \end{pmatrix}. \quad (154)$$

Cabe destacar que Raichev (2007) derivó relaciones similares sólo cuando  $\nu = e$ , es decir, relaciones entre las conductividades de carga  $L_{ij}^{(ee)}(\omega)$  y Hall de espín  $L_{ij}^{(se)z}(\omega)$  inducidas por un campo eléctrico.

Pasamos ahora al cálculo del coeficiente Seebeck  $S_{ij}$ . Tomando en cuenta que  $L_{ij}^{(e\nu)}$  y  $[L^{(e\nu)}]_{ij}^{-1}$  son diagonales, de la ecuación (142) obtenemos, explícitamente, que  $S_{yx} = 0$ . De

manera similar, de la ecuación (141) obtenemos que la componente  $S_{xx}$  se reduce a

$$S_{xx} = \frac{1}{T} \frac{L_{xx}^{(eq)}}{L_{xx}^{(ee)}}. \quad (155)$$

Es importante observar que estos resultados son similares a los obtenidos en el caso con acoplamiento Rashba, por lo tanto, siguiendo un procedimiento análogo al de la sección 5.3.1 (véase de la ecuación (143) a la (146)), se puede demostrar que la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}$  se cancela.

Por lo tanto, en general, hemos demostrado que en un GE2D con acoplamiento espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$  aislado eléctricamente, la termocorriente de espín  $J_i^{(s)k}(\omega)$  inducida por un gradiente de temperatura se cancela.

#### 5.4 Resumen de resultados

En este capítulo se derivaron nuevas relaciones que establecen una conexión entre las conductividades  $L_{ij}^{(eq)k}$  y  $L_{ij}^{(sq)k}$  asociadas a la conductividad termoeléctrica y la conductividad de espín generada térmicamente, respectivamente. Para ello se consideró el caso de un GE2D con interacción espín-órbita lineal  $\mathbf{k}$ . Una consecuencia importante de estas conexiones entre las conductividades  $L_{ij}^{(\xi\nu)}$  es que, bajo condiciones de corriente eléctrica cero, la termocorriente de espín  $J_i^{(s)z}$  inducida por un gradiente de temperatura se anula.

Además, en la sección 5.1 se estableció que la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}$  se puede escribir en la forma

$$\Sigma_{ij}^{(s)z} = \frac{1}{T} \left[ T L_{il}^{(se)z} S_{lj} - L_{ij}^{(sq)z} \right] \quad (156)$$

$$= L_{il}^{(se)z} \left( S_{lj} - S_{lj}^{(s)z} \right), \quad (157)$$

es decir, en términos del coeficiente Seebeck  $S_{ij}$  y del coeficiente Seebeck de espín  $S_{lj}^{(s)z}$ . De tal manera que los resultados presentados en sección 5.3 se podrían condensar demostrando que  $S_{lj} = S_{lj}^{(s)z}$ . Este análisis se realizará precisamente en el siguiente capítulo considerando el acoplamiento lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$ .

Las ecuaciones (156) y (157) muestran que la corriente de espín  $J_i^{(s)z} = \Sigma_{ij}^{(s)z} \nabla_j T$  se origina

por dos contribuciones. Una de estas contribuciones se origina directamente por la acción del gradiente de temperatura, caracterizada por el coeficiente  $L^{(sq)z}$ . La otra contribución es generada por el campo termoeléctrico a través del efecto Hall de espín. Los resultados presentados en este capítulo permiten mostrar explícitamente que estas contribuciones se cancelan una a la otra, lo cual implica que la corriente de espín  $J_i^{(s)z}$  se anula.

Podemos concluir que esta cancelación de la corriente de espín  $J_i^{(s)z}$  se produce por la dependencia lineal en  $\mathbf{k}$  del Hamiltoniano de interacción espín-órbita y por la correspondiente naturaleza de los estados de espín.

## 6. Contribución espín-órbita cúbica a los fenómenos termoespintrónicos

---

Las investigaciones realizadas sobre fenómenos que dependen del espín en sistemas semiconductores con IEO, se han restringido principalmente al caso de la IEO que depende de forma lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$  del electrón. Este se debe a que en pozos cuánticos suficientemente angostos el término lineal se vuelve dominante frente al término cúbico. No obstante, estudios recientes en esta clase de sistemas sugieren que el término cúbico de la IEO de Dresselhaus tiene efectos importantes en la dinámica del espín, por ejemplo, en el transporte o en la acumulación de espín, elementos que son importantes en el efecto Hall de espín (Chang et al., 2009). En este contexto, en el régimen de frecuencia finita Li et al. (2013) reportan que en pozos cuánticos crecidos en la dirección [001], la conductividad eléctrica es cero a cualquier frecuencia cuando los parámetros lineales de Rashba ( $\alpha$ ) y Dresselhaus ( $\beta_1$ ) son iguales,  $\alpha = \beta_1$ . Sin embargo, la presencia del término cúbico del acoplamiento Dresselhaus da como resultado que tal conductividad no se cancele aún cuando  $\alpha = \beta_1$ . En el mismo sistema, Wang et al. (2009) demuestran que la polarización de espín inducida por un campo eléctrico estático depende fuertemente de la densidad electrónica debido a la presencia del término cúbico del acoplamiento Dresselhaus.

En el capítulo anterior mostramos que la anulación del efecto Hall de espín de tipo termoelectrico se debe al hecho particular de que la IEO considerada es lineal en  $\mathbf{k}$ , resultado que refuta la predicción hecha por Ma (2010). No obstante, resulta natural cuestionarnos si esta cancelación se mantiene si incorporamos los términos cúbicos además de los términos lineales de la IEO. Por este motivo, en este capítulo extendemos el análisis presentado en el capítulo anterior y consideraremos la contribución cúbica del acoplamiento Dresselhaus. Tomaremos como ejemplo el caso de un pozo cuántico crecido en la dirección cristalográfica [001]. Mostraremos que al considerar la contribución espín-órbita cúbica en  $\mathbf{k}$ , la termocorriente de espín no se anula. De esta manera, podemos concluir que, efectivamente, dicha anulación es estrictamente válida para IEO lineal.

## 6.1 Interacción espín-órbita cúbica en $\mathbf{k}$

De acuerdo a lo estudiado en la sección 3.1, el Hamiltoniano que describe la interacción espín-órbita de Dresselhaus de menor orden en  $\mathbf{k}$  está dado por (3)

$$H_D^{3d} = \beta_3 [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (158)$$

donde  $\beta_3$  es un parámetro efectivo de acoplamiento y  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z) = (\mathbf{k}_{||}, k_z)$  (Dresselhaus, 1955; Winkler, 2003). En un pozo cuántico suficientemente angosto crecido en la dirección [001], las componentes del vector de onda normal al plano del gas se promedian, esto es,  $k_z \rightarrow \langle \hat{k}_z \rangle = \langle i\partial_z \rangle = 0$  y  $k_z^2 \rightarrow \langle \hat{k}_z^2 \rangle$ , de modo que (158) se reduce a

$$H_D^{[001]} = \beta_3 [k_y \langle \hat{k}_z^2 \rangle \sigma_y - k_x \langle \hat{k}_z^2 \rangle \sigma_x] + \beta_3 [k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y]. \quad (159)$$

Si definimos  $\beta_1 = \beta_3 \langle \hat{k}_z^2 \rangle$ , el Hamiltoniano puede escribirse en la forma <sup>1</sup>

$$H_D^{[001]} = \beta_1 (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) + \beta_3 (k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y). \quad (160)$$

Por lo tanto, el Hamiltoniano de un electrón que se encuentra en el GE2D con interacción espín-órbita R+D[001] lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$  es

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \alpha(k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta_1 (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x) + \beta_3 (k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y), \quad (161)$$

donde  $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ , de modo que el correspondiente campo espín-órbita está dado por

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = (\alpha k_y - \beta_1 k_x + \beta_3 k_x k_y^2) \hat{\mathbf{x}} + (\beta_1 k_y - \alpha k_x - \beta_3 k_y k_x^2) \hat{\mathbf{y}}. \quad (162)$$

Antes de continuar, recordemos que el objetivo de este capítulo es estudiar la contribución cúbica de la IEO al efecto Hall de espín de tipo termoelectrico. Para ello, es necesario primero calcular los coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  y después usarlos en la termoconductividad de espín dada por la ecuación (120). De acuerdo a lo discutido en las secciones 4.4 y 4.5, sabemos que a bajas temperaturas, la estructura en  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  se puede entender en términos

---

<sup>1</sup>Por simplicidad cambiamos la notación usada en capítulo anteriores, ahora escribimos  $\beta_1 \equiv \beta_{[001]}$ .

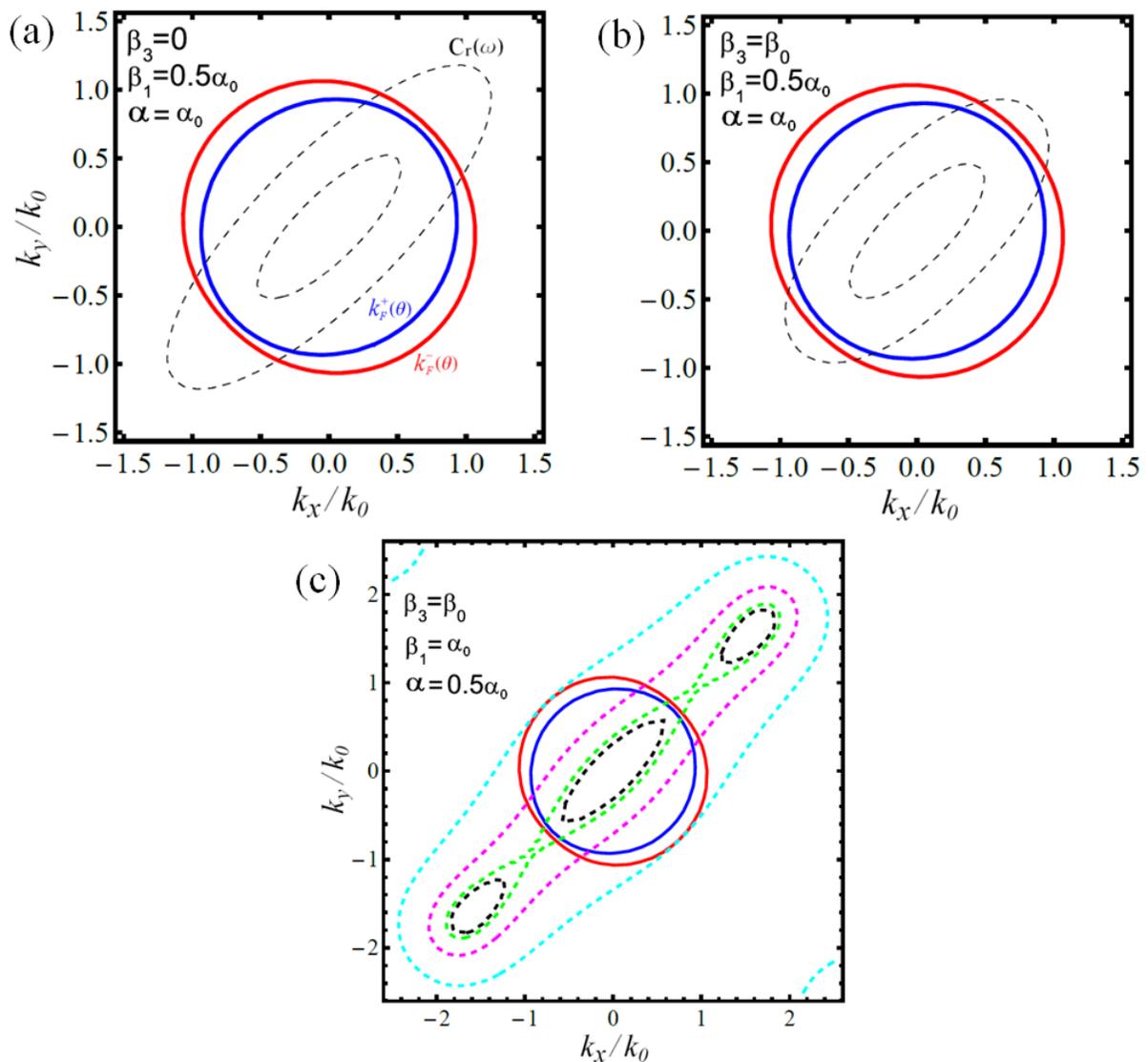
de procesos de absorción de energía y transiciones verticales entre las sub-bandas  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  y  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ , en una dirección determinada en el espacio  $\mathbf{k}$ . Estas transiciones involucran estados con vectores de onda que caen sobre una curva de resonancia  $C_r(\omega)$  determinada por la condición  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar|\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})| = \hbar\omega$  (véanse Figuras 21, 22 y 26). En lo que sigue, extenderemos este análisis para incorporar el campo espín-órbita (162) que considera los términos cúbicos en  $\mathbf{k}$  de la IEO.

Analicemos primero los contornos de Fermi y la curva de resonancia  $C_r(\omega)$ . Recordemos que, a  $T = 0$ , al nivel de Fermi cada sub-banda  $\varepsilon_-(k, \theta)$  y  $\varepsilon_+(k, \theta)$  tiene un vector de onda distinto  $k_F^-(\theta)$  y  $k_F^+(\theta)$  respectivamente, determinados por la condición  $\varepsilon_\nu(k_F^\nu, \theta) = \varepsilon_F$  con  $\nu = \pm 1$ , donde las sub-bandas de energía  $\varepsilon_\nu(k_F^\nu, \theta)$  están descritas por la ecuación (8). Sustituyendo (162) en (8) obtenemos que la ecuación  $\varepsilon_\nu(k_F^\nu, \theta) = \varepsilon_F$  representa un polinomio de orden tres en  $k$ , sin embargo, de las tres raíces que son solución de dicho polinomio sólo una de ellas tiene sentido físico y es, precisamente,  $k_F^\nu(\theta)$ .

En la Figura 30 se muestran los contornos de Fermi  $k_F^\nu(\theta)$  correspondientes a distintos valores de los parámetros de acoplamiento  $\alpha$ ,  $\beta_1$  y  $\beta_3$ . Observamos que cualitativamente no hay un cambio significativo en la forma de los contornos en los casos con  $\beta_3 = 0$  (Figura 30.a) y  $\beta_3 \neq 0$  (Figuras 30.b y 30.c). También en la Figura 30 se muestran las curvas de resonancia  $C_r(\omega)$  correspondientes a diferentes frecuencias  $\omega$ . En este caso, observamos que  $C_r(\omega)$  depende fuertemente de  $\omega$  y de los parámetros de acoplamiento; esto se ve con mayor claridad en la Figura 30.c donde la naturaleza cúbica del campo espín-órbita (162) se ve reflejada en la forma de la curva  $C_r(\omega)$ . Además, tomando en cuenta el análisis de la sección 4.4, sabemos que los estados involucrados en las transiciones  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ , son aquellos cuyos vectores de onda que caen sobre la curva  $C_r(\omega)$  y dentro de la región anular  $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ .

En este contexto, en la Figura 31.a se muestra el cálculo numérico, a temperatura  $T = 0$ , de la parte real de la conductividad eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$ , correspondiente a los casos  $\beta_3 = 0$  y  $\beta_3 \neq 0$ . En ambos casos observamos que la conductividad  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  tiene cualitativamente la misma forma y comportamiento espectral. También en ambos casos se observan resonancias en las frecuencias características  $\omega_\pm$ ,  $\omega_a$  y  $\omega_b$ , las cuales de acuerdo a lo estudiado en la sección 4.4.2, sabemos que son resultado de transiciones verticales de la sub-banda  $\varepsilon_-(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_+(\mathbf{k})$

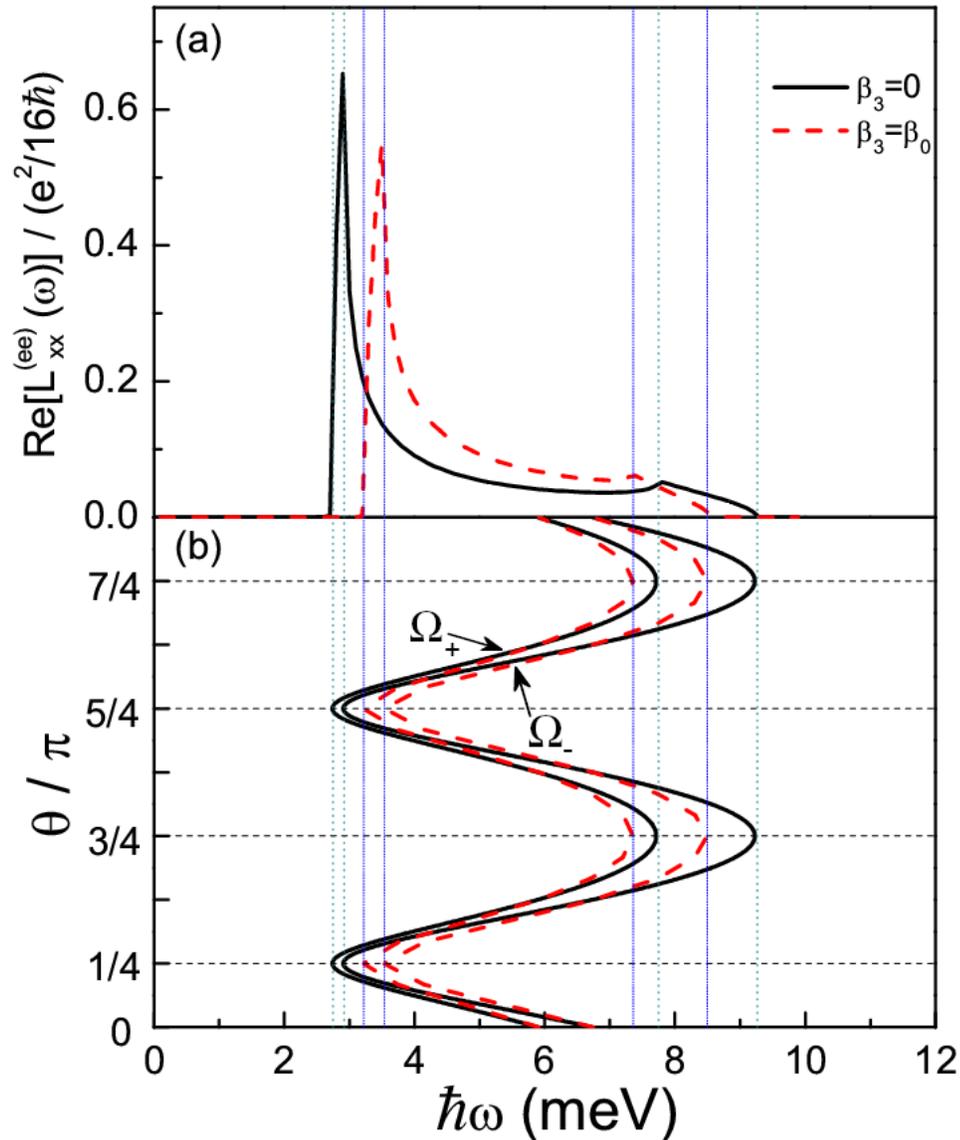
separadas por una energía  $\hbar\omega$ .



**Figura 30:** Contornos de Fermi correspondientes a distintos valores de los parámetros de acoplamiento. La curva de resonancia  $C_r(\omega)$  está definida por los puntos  $(k_x, k_y)$  tales que  $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = |\hbar\Omega(\mathbf{k})| = \hbar\omega$ . Los parámetros usados son  $\alpha_0 = 0.16 \text{ eV\AA}$ ,  $\beta_0 = 1 \times 10^{-22} \text{ eVcm}^3$ ,  $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ,  $m^* = 0.05 m_0$  y  $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ .

Para complementar este último punto, en la Figura 31.b se muestra la región angular en el espacio  $\mathbf{k}$  disponible para dichas transiciones, como función de la energía  $\hbar\omega$ ; el límite inferior está determinado por la curva  $\hbar\Omega_+(\theta)$  y el límite superior lo determina  $\hbar\Omega_-(\theta)$  (véase ecuación 96). En la Figura 31.b vemos que las transiciones sólo se pueden llevar a cabo en ciertos ángulos, esto es, en valores específicos de  $\mathbf{k}$ ; esto es consecuencia del desdoblamiento anisotrópico de los estados de espín producido por el campo espín-órbita (162), como se

observa en la Figura 30. Además, en la Figura 31.b se puede ver que en el caso  $\beta_3 \neq 0$  se estrecha el rango de frecuencias en el cual se pueden realizar las transiciones, respecto al caso  $\beta_3 = 0$ . Un comportamiento similar se observa en la conductividad Hall de espín  $\text{Re}L_{xy}^{(se)z}(\omega)$  mostrada en la Figura 32.



**Figura 31:** (a) Contribución espín-órbita a la conductividad de carga eléctrica  $\text{Re}L_{xx}^{(ee)}(\omega)$  como función de la frecuencia, a  $T = 0$  y con distintos valores del parámetro de acoplamiento  $\beta_3$ . (b) Región angular en el espacio  $\mathbf{k}$  disponible para las transiciones de  $\varepsilon_{-}(\mathbf{k})$  a  $\varepsilon_{+}(\mathbf{k})$ . Los parámetros usados son,  $\alpha = \alpha_0$ ,  $\beta_1 = \alpha_0/2$ , con  $\alpha_0 = 0.16 \text{ eV}\text{\AA}$ ,  $\beta_0 = 1 \times 10^{-22} \text{ eVcm}^3$ ,  $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  y  $m^* = 0.05 m_0$ .

En las Figuras 31 y 32 podemos ver que los coeficientes  $L_{ij}^{(\xi\nu)}(\omega)$  son diferentes en los casos cuando  $\beta_3 = 0$  o  $\beta_3 \neq 0$ . También observamos que, para los valores de  $\beta_3$  usados en las figuras, la forma y el comportamiento espectral son cualitativamente similares si  $\beta_3 = 0$  o

$\beta_3 \neq 0$ , conforme el valor de  $\beta_3$  crece la diferencia entre ambos casos es cada vez más notoria. En la siguiente sección usaremos estos resultados para calcular la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}$  que describe el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico.

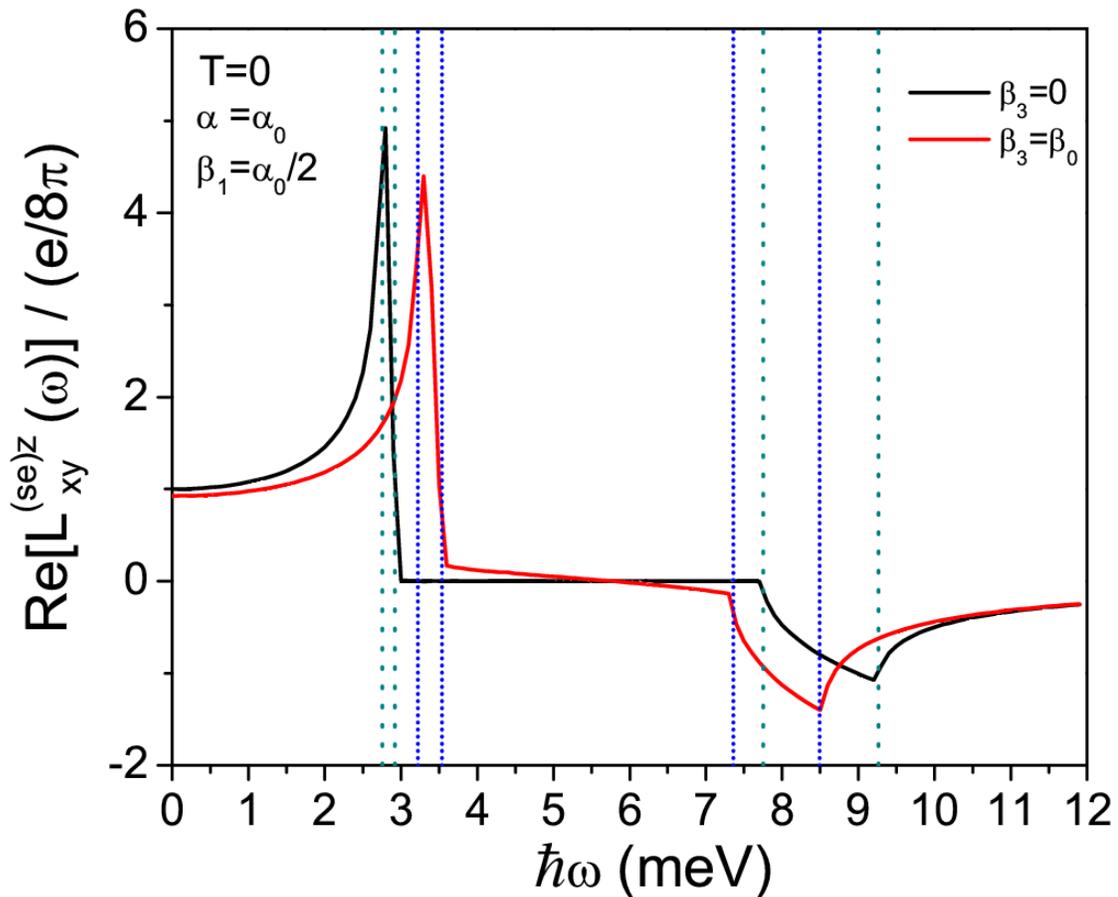


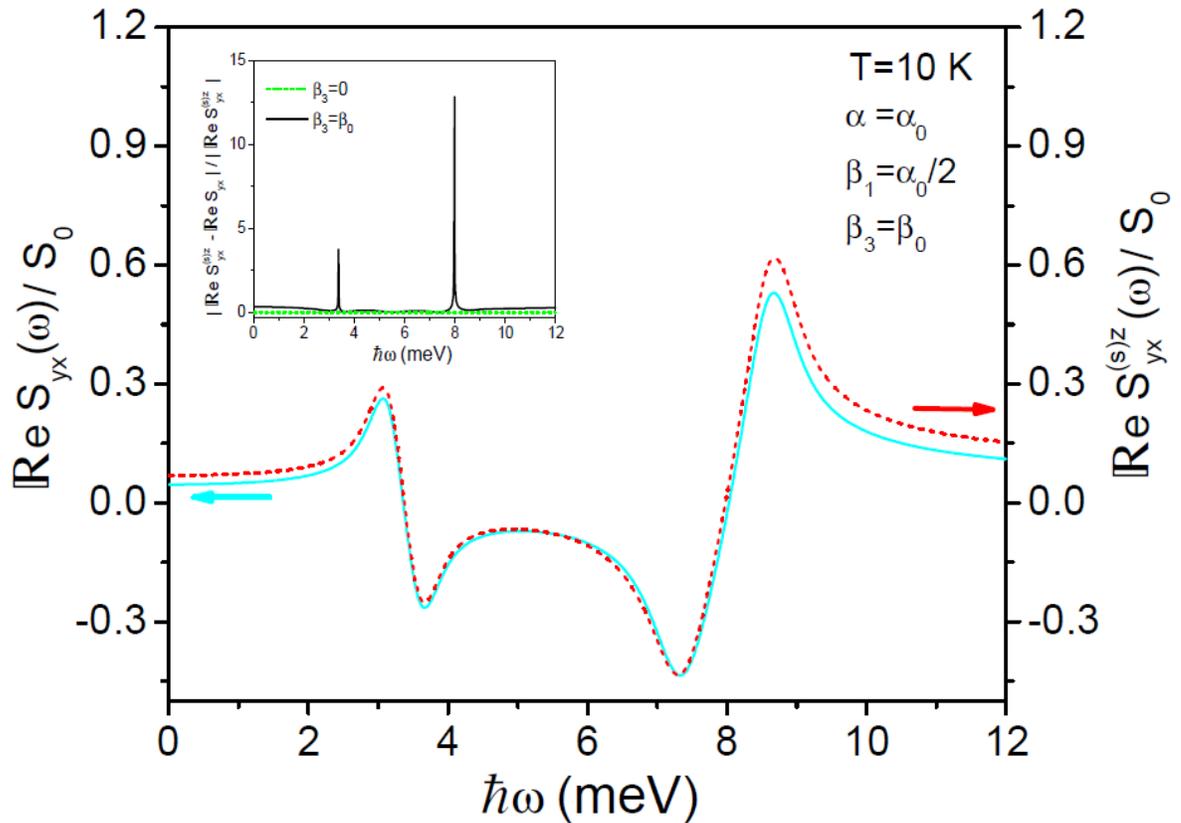
Figura 32: Contribución espín-órbita a la conductividad Hall de espín  $\Re L_{xy}^{(se)z}(\omega)$  como función de la frecuencia, a  $T = 0$  y con distintos valores del parámetro de acoplamiento  $\beta_3$ . Se usaron los mismos parámetros que en la Figura 31.

## 6.2 Termoconductividad Hall de espín

En el capítulo 5 se discutió que, bajo condiciones de corriente eléctrica cero, un gradiente de temperatura  $\nabla_j T$  puede inducir una termocorriente de espín  $J_i^{(s)z}$  a través del efecto termoeléctrico, esto es,  $J_i^{(s)z} = \Sigma_{ij}^{(s)z} \nabla_j T$ , donde la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}$  se puede escribir en la forma

$$\Sigma_{ij}^{(s)z} = L_{il}^{(se)z} \left( S_{lj} - S_{lj}^{(s)z} \right), \quad (163)$$

es decir, en términos de los coeficientes Seebeck  $S_{ij}$  y Seebeck de espín  $S_{ij}^{(s)z}$  dados por las ecuaciones (118) y (121), respectivamente. La relación (163) muestra que si  $S_{ij} = S_{ij}^{(s)z}$  entonces  $\Sigma_{ij}^{(s)z} = 0$ . Demostrar dicha igualdad entre los coeficientes Seebecks es una forma alternativa a la presentada en el capítulo anterior, que nos permite determinar si la termoconductividad de espín se anula. Por este motivo, en esta sección se presentan los cálculos de  $S_{ij}$  y  $S_{ij}^{(s)z}$  tomando en cuenta la contribución lineal y cúbica en  $\mathbf{k}$  del acoplamiento R+D[001], esto con el objetivo de discernir la presencia efectiva del término cúbico frente a la contribución lineal.



**Figura 33:** Coeficiente Seebeck  $\text{Re}S_{yx}(\omega)$  (eje derecho) y coeficiente Seebeck de espín  $\text{Re}S_{yx}^{(s)z}(\omega)$  (eje izquierdo) como función de la frecuencia, donde  $S_0 = k_B/e$ . En el recuadro se muestra la diferencia porcentual  $|\text{Re}S_{yx}^{(s)z} - \text{Re}S_{yx}|/|\text{Re}S_{yx}^{(s)z}|$ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Figura 31.

En la Figura 33 se muestran los cálculos numéricos de las componentes  $S_{yx}(\omega)$  del coeficiente Seebeck y  $S_{yx}^{(s)z}(\omega)$  del coeficiente Seebeck de espín, correspondientes al caso cuando se tiene la presencia conjunta del acoplamiento R+D[001] lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$  ( $\beta_3 \neq 0$ ). Se observa que ambas curvas tienen una forma y un comportamiento espectral similar, lo cual se

puede ver con mayor claridad en el recuadro de la Figura 33, donde se muestra la diferencia porcentual  $|\mathbb{R}eS_{yx}^{(s)z} - \mathbb{R}eS_{yx}|/|\mathbb{R}eS_{yx}^{(s)z}|$ . No obstante, de acuerdo a la ecuación (163), esta diferencia que se observa entre los coeficientes implica que la termoconductividad de espín  $\Sigma_{ij}^{(s)z}(\omega)$  no se anula puesto que  $S_{yx}(\omega) \neq S_{yx}^{(s)z}(\omega)$ .

En la Figura 34 se muestran los cálculos numéricos de las componentes  $\mathbb{R}e\Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega)$  y  $\mathbb{R}e\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega)$ , para distintos valores del parámetro  $\beta_3$ . Se observa que  $\mathbb{R}e\Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega) = \mathbb{R}e\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega) = 0$  cuando  $\beta_3 = 0$ , lo cual coincide con los resultados obtenidos en el capítulo 5 donde sólo consideramos la contribución lineal en  $\mathbf{k}$  del acoplamiento Dresselhaus. En cambio, cuando  $\beta_3 \neq 0$  se observa que la conductividad  $\mathbb{R}e\Sigma_{ij}^{(s)z}(\omega)$  no se anula, por el contrario, al aumentar el valor del parámetro  $\beta_3$  la conductividad  $\mathbb{R}e\Sigma_{ij}^{(s)z}(\omega)$  también aumenta.

Por lo tanto, con estos resultados podemos concluir que el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico se anula cuando se toma en cuenta únicamente la contribución espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$ . Esta anulación se debe a que en el caso  $\alpha = \beta_1$  y  $\beta_3 = 0$ , el campo espín-órbita  $\Omega(\mathbf{k})$  no depende de la dirección de  $\mathbf{k}$ , como consecuencia existe una dirección fija de cuantización, por lo tanto todos los mecanismos intrínsecos de relajación de espín se cancelan (Raichev, 2007).

### 6.3 Resumen de resultados

En este capítulo analizamos la acción conjunta del término lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$  del acoplamiento R+D[001]. En este caso se produce un desdoblamiento de los estados de espín anisotrópico. Dicha anisotropía se ve reflejada en los coeficientes fenomenológicos mostrados en las Figuras 31, 32 y 33, donde además se observa que al considerar el acoplamiento cúbico ( $\beta_3 \neq 0$ ), los coeficientes son diferentes con respecto al caso donde sólo se toma en cuenta el acoplamiento lineal ( $\beta_3 = 0$ ). Ciertamente, esta diferencia depende de la magnitud del parámetro  $\beta_3$  y es cada vez más notoria conforme el valor de  $\beta_3$  aumenta.

Un resultado destacable es que la presencia del término cúbico produce que los coeficientes Seebeck  $S_{ij}$  y Seebeck de espín  $S_{ij}^{(s)z}$  sean distintos, lo cual tiene como consecuencia que el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico no se anule. Estos resultados nos permiten concluir que, en efecto, dicha anulación ocurre y es estrictamente válida para el acoplamiento espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$ , tal como se demostró en el capítulo 5.

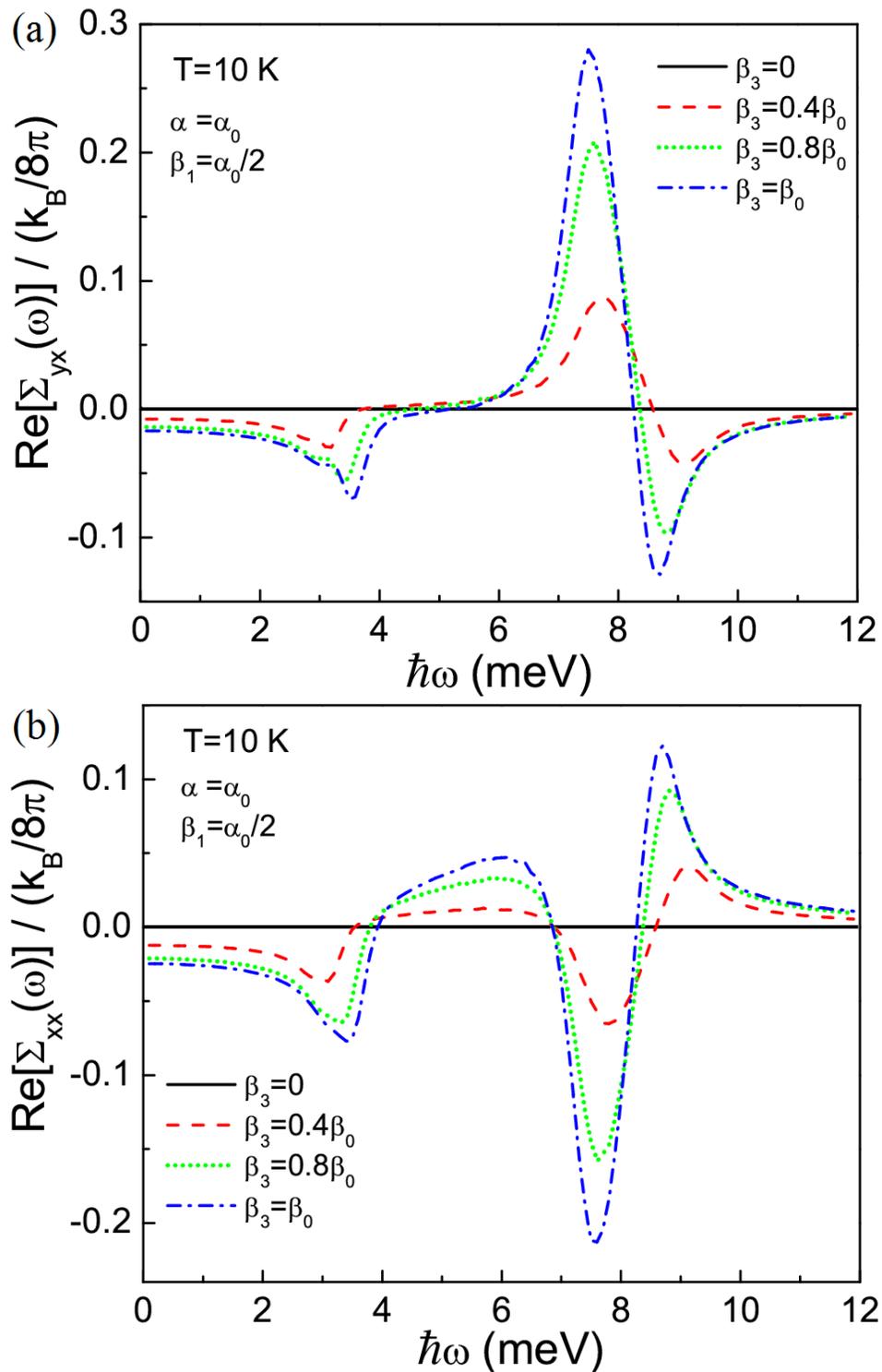


Figura 34: Contribución espín-órbita a las conductividades (a)  $\text{Re}\Sigma_{yx}^{(s)z}(\omega)$  y (b)  $\text{Re}\Sigma_{xx}^{(s)z}(\omega)$  como función de la frecuencia  $\omega$ , a distintos valores del parámetro  $\beta_3$ . Se utilizaron los mismos parámetros que en la Figura 31.

## 7. Polarización de espín inducida por un gradiente de temperatura

---

A lo largo de este trabajo hemos discutido cómo la interacción espín-órbita proporciona una vía de acceso para controlar el espín del electrón, lo cual da lugar a distintos fenómenos espintrónicos y termoespintrónicos. El fenómeno de orientación de espines electrónicos inducida por campos eléctricos, vía la interacción espín-órbita, es un tema de especial interés en la espintrónica de semiconductores. El campo eléctrico que se aplica en el plano del GE2D, actúa sobre portadores de carga en movimiento como un campo magnético intrínseco por medio del cual es posible orientar los espines sin la necesidad de utilizar campos magnéticos o materiales magnéticos.

Como se mencionó en el capítulo 2.2, diversos trabajos teóricos y experimentales han reportado que un campo eléctrico puede inducir una polarización de espín en un GE2D con acoplamiento Rashba y Dresselhaus[ $hkl$ ] (veánse Figuras 4 y 5). Recientemente se ha propuesto teóricamente su contraparte térmica, es decir, una polarización de espín inducida por un gradiente de temperatura en un GE2D en presencia sólo del acoplamiento Rashba (Wang et al., 2010; Dyrđal et al., 2013) o sólo con acoplamiento Dresselhaus[001] lineal y cúbico en  $\mathbf{k}$  (Wang et al., 2009). No obstante, hasta la fecha no se han estudiados los efectos de la coexistencia de los acoplamientos R+D[ $hkl$ ].

Tomando en cuenta las investigaciones realizadas, en este capítulo se estudia este fenómeno incorporando la acción conjunta de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus[ $hkl$ ] lineales en  $\mathbf{k}$ . Además, en analogía con el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico analizado en el capítulo 5, estudiamos la generación de una polarización de espín vía el efecto termoeléctrico.

### 7.1 Polarizabilidad de espín

El operador de espín del electrón está descrito por las matrices de Pauli como  $\mathbf{S} = \hbar \boldsymbol{\sigma}/2$ , de tal forma que el valor esperado del operador de espín de un electrón que se encuentre en un GE2D está dado por

$$\langle \mathbf{S} \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle. \quad (164)$$

Supongamos que al tiempo  $t = t_0$  se aplica una perturbación externa, descrita por el Hamiltoniano  $H'(t)$ . Debido a que hay IEO es posible determinar la evolución temporal del operador de espín (164) por la fórmula de Kubo

$$\langle \sigma_i(t) \rangle = \langle \sigma_i \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\sigma_i(t), H'(t')] \rangle_0, \quad \tilde{\omega} = \omega + i\eta, \quad \eta \rightarrow 0^+ \quad (165)$$

En el capítulo 3 se discutió que el campo espín-órbita  $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$  no genera una polarización espontánea de espín (véase ecuación 14), esto implica que el término  $\langle \sigma_i \rangle_0 = 0$  debido a que antes de aplicar la perturbación no hay una polarización neta de espines en el GE2D. Por lo tanto, la ecuación (165) se reduce a

$$\langle \sigma_i(t) \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\sigma_i(t), H'(t')] \rangle_0. \quad (166)$$

Recordemos que los brackets  $\langle \dots \rangle_0$  representan un promedio cuántico y térmico respecto al Hamiltoniano  $\hat{H}_0$  (véase ecuación 47), esto es

$$\langle [\sigma_i(t), \hat{H}'(t')] \rangle_0 = \sum_{\nu} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})) \langle \nu\mathbf{k} | [\sigma_i(t), \hat{H}'(t')] | \nu\mathbf{k} \rangle, \quad (167)$$

donde  $|\nu\mathbf{k}\rangle$  son los espinores (9) y  $f(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k})) = (1 + e^{(\varepsilon_{\nu}(\mathbf{k}) - \mu)/k_B T})^{-1}$  es la función de distribución de Fermi y  $\mu$  es el potencial químico. Por lo tanto,  $\langle \dots \rangle_0$  representan una integración sobre la distribución de Fermi en el espacio  $\mathbf{k}$ .

Consideremos, como lo hicimos en el capítulo 4, que el Hamiltoniano de interacción  $H'(t)$  es de la forma (66), esto es,  $H'(t) = (i/\omega)\mathbf{J}^{(\nu)}(t) \cdot \mathbf{\Xi}^{(\nu)}(t)$ , donde los superíndices  $\nu = e, q$  denotan las corrientes eléctrica y de calor, respectivamente, y el correspondiente campo perturbativo es  $\mathbf{\Xi}^{(e)}(t) = \mathbf{E}(t)$  y  $\mathbf{\Xi}^{(q)}(t) = (-\nabla T/T)$ . Por lo tanto, al sustituir  $H'(t)$  en (166) y calcular la transformada de Fourier obtenemos que

$$\langle \sigma_i(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^{\infty} dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\sigma_i(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0 \Xi_j^{(\nu)}(\omega). \quad (168)$$

Esta expresión se puede escribir en la forma general

$$\langle S_i(\omega) \rangle = \frac{\hbar}{2} \langle \sigma_i(\omega) \rangle \equiv \frac{\hbar}{2} \gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) \Xi_j^{(\nu)}(\omega), \quad (169)$$

y de acuerdo a la ecuación (168) la función  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega)$  está dada por

$$\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\sigma_i(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle_0. \quad (170)$$

El tensor  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega)$  recibe el nombre de *polarizabilidad de espín* y describe la orientación de espín  $S_i(\omega)$  como respuesta a un campo perturbativo  $\Xi_j^{(\nu)}(\omega)$ .

Como se mencionó previamente, la polarizabilidad de espín (170) representa una integración sobre la distribución de Fermi  $f(\varepsilon, \mu) = (1 + e^{(\varepsilon-\mu)/k_B T})^{-1}$ , la cual se puede escribir como

$$f(\varepsilon, \mu) = \int_{\mu_{min}}^\infty d\mu' \Theta(\mu' - \varepsilon) \frac{\partial f(\mu, \mu')}{\partial \mu'} \quad (171)$$

$$= \int_\varepsilon^\infty d\mu' \frac{\partial f(\mu, \mu')}{\partial \mu'} \quad (172)$$

$$= \int_{\mu_{min}}^\infty d\mu' \Theta(\mu' - \varepsilon) \frac{1}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{\mu - \mu'}{2k_B T}\right)}, \quad (173)$$

donde  $\Theta(\mu' - \varepsilon)$  es la función de distribución de Fermi a temperatura cero. Usando (173) en (170), se obtiene que

$$\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega, \eta, T, \mu) = \int_{\mu_{min}}^\infty d\mu' \frac{\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega, \eta, 0, \mu')}{4k_B T \cosh^2\left(\frac{\mu - \mu'}{2k_B T}\right)}, \quad (174)$$

esto quiere decir que la polarizabilidad de espín a una temperatura dada se puede calcular como una integral sobre la función de distribución a temperatura cero (Maldague, 1978; Ferry et al., 1997).

En las siguientes secciones seguiremos un procedimiento análogo al de la sección 5.2 para derivar fórmulas que relacionan la polarizabilidad de espín  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega)$  con la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$ . Para ello consideraremos sólo el acoplamiento espín-órbita lineal en  $\mathbf{k}$  dado por la ecuación (15). Es importante destacar que, vía la IEO, estas relaciones permiten establecer una conexión entre la densidad de espín y distintos tipos de corrientes.

## 7.2 Relaciones entre la polarizabilidad y la conductividad de espín

Al integrar por partes la polarizabilidad de espín (170) se obtiene

$$\begin{aligned}\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) &= \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \left[ \frac{1}{i\tilde{\omega}} e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\sigma_i(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle|_0^\infty - \frac{1}{i\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\sigma_i(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle \right] \\ &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \langle [\sigma_i(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle + \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\sigma_i(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle .\end{aligned}\quad (175)$$

La evaluación numérica del primer término de la ecuación da como resultado  $\langle [\sigma_i(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle = 0$ , de modo que

$$\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) = \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}^2} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle \left[ \frac{d\sigma_i(t)}{dt}, \hat{J}_j^{(\nu)}(0) \right] \rangle .\quad (176)$$

Utilizamos la ecuación de movimiento de Heisenberg para calcular la evolución temporal del operador  $\sigma_i$ . Si se considera sólo el acoplamiento lineal obtenemos

$$\begin{aligned}i\hbar \frac{d\sigma_i}{dt} &= [\sigma_i, H] \\ &= [\sigma_i, \sigma_l \lambda_{ln} k_n] \\ &= \lambda_{ln} k_n [\sigma_i, \sigma_l]\end{aligned}\quad (177)$$

$$= i2\epsilon_{ilp} \lambda_{ln} k_n \sigma_p ,\quad (178)$$

donde se usó de la regla de conmutación de las matrices de Pauli  $[\sigma_i, \sigma_l] = i2\epsilon_{ilp} \sigma_p$  y el operador de velocidad dado por la ecuación (77). Por otro lado, sabemos que el operador de corriente espín  $\hat{J}_i^{(s)j}$  está dado por la ecuación (80), de tal forma que al despejar el término  $k_i \sigma_j$  de (80) y sustituirlo en (178), obtenemos

$$\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) = \frac{i4m^*}{\hbar^4 \tilde{\omega}^2} \epsilon_{ilp} \lambda_{ln} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_n^{(s)p}(t), \hat{J}_j^{(\nu)}(0)] \rangle .\quad (179)$$

Aquí podemos indentificar la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$ , de tal forma que la relación entre la polarizabilidad de espín  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}$  y  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$  está dada por

$$\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega) = \frac{i4m^*}{\hbar^3 \tilde{\omega}} \epsilon_{ilp} \lambda_{ln} L_{nj}^{(s\nu)p}(\omega) .\quad (180)$$

Esta relación implica que las características espectrales de  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}$  serán similares a las características que presenta la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$  (veáse Figura 28). Por ejemplo, en presencia sólo del acoplamiento Rashba, la ecuación (180) se reduce a

$$\gamma_{xy}^{(\sigma q)}(\omega) = -\frac{i4m^*}{\hbar^3\tilde{\omega}} \alpha L_{xy}^{(sq)z}(\omega). \quad (181)$$

Cabe destacar que se han reportado fórmulas similares a (180), las cuales relacionan la polarizabilidad de espín  $\gamma_{ij}^{(\sigma e)}(\omega)$  y la conductividad de espín  $L_{ij}^{(se)k}(\omega)$  como respuesta a un campo eléctrico (Raichev, 2007; Iglesias et al., 2010). Sin embargo, no se ha reportado la relación entre las conductividades  $\gamma_{ij}^{(\sigma q)}(\omega)$  y  $L_{ij}^{(sq)k}(\omega)$  que describen la respuesta a un gradiente de temperatura.

### 7.3 Cancelación de la polarización de espín

En el capítulo 5 nos preguntamos sobre la posibilidad de un efecto Hall de espín inducido por un gradiente de temperatura pero vía el efecto termoeléctrico, y mostramos que dicho efecto se anula debido a conexiones entre la corriente de espín  $J_i^{(s)k}$  y la corriente eléctrica  $J_i^e$ , válidas sólo en presencia del acoplamiento R+D[ $hkl$ ] lineal en  $\mathbf{k}$ . Ahora resulta natural cuestionarnos si un gradiente podría generar una polarización de espín a través del efecto termoeléctrico, y si las relaciones (180) tienen como consecuencia que este efecto también se anule.

Fenomenológicamente, la orientación de espín  $\mathbf{S}$  en respuesta lineal a un campo eléctrico  $\mathbf{E}$  y un gradiente de temperatura  $\nabla T$  se puede escribir como (Dyrdal et al., 2013)

$$S_i(\omega) = \frac{\hbar}{2} \gamma_{ij}^{(\sigma e)}(\omega) E_j + \frac{\hbar}{2} \gamma_{ij}^{(\sigma q)}(\omega) \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right), \quad (182)$$

Sustituyendo la relación (180) en (182) obtenemos

$$S_i(\omega) = \frac{i2m^*}{\hbar^2\tilde{\omega}} \epsilon_{ilp} \lambda_{ln} \left[ L_{nj}^{(se)p}(\omega) E_j + L_{nj}^{(sq)p}(\omega) \left( -\frac{\nabla_j T}{T} \right) \right]. \quad (183)$$

En esta ecuación podemos identificar la corriente de espín  $J_n^{(s)p}(\omega)$ , por lo tanto, obtenemos la fórmula

$$S_i(\omega) = \frac{i2m^*}{\hbar^2\tilde{\omega}} \epsilon_{ilp} \lambda_{ln} J_n^{(s)p}(\omega). \quad (184)$$

Esta expresión establece una conexión entre la corriente de espín  $J_i^{(s)z}(\omega)$  y la densidad de espín  $S_i(\omega)$ . Por ejemplo, consideremos el caso de un GE2D con acoplamiento R+D[001]. En este caso, de las ecuaciones (16) y (184) obtenemos

$$S_x(\omega) = \frac{i2m^*}{\hbar^2\tilde{\omega}} [\beta_{[001]}J_y^{(s)z} - \alpha J_x^{(s)z}] , \quad (185)$$

$$S_y(\omega) = \frac{i2m^*}{\hbar^2\tilde{\omega}} [\beta_{[001]}J_x^{(s)z} - \alpha J_y^{(s)z}] . \quad (186)$$

En el capítulo 5 se derivó una relación entre la corriente de espín  $J_i^{(s)z}(\omega)$  y la corriente eléctrica  $J_i^{(e)}(\omega)$  dada por la ecuación (138). Cuando no hay una corriente eléctrica neta que fluye en el sistema, como ocurre normalmente en el estudio de los fenómenos termoeléctricos, encontramos que  $J_i^{(s)z}(\omega) = 0$ . De manera particular, en presencia del acoplamiento R+D[001] mostramos que  $J_x^{(e)} \propto J_y^{(s)z}$  y  $J_y^{(e)} \propto -J_x^{(s)z}$ , de tal forma que  $J_i^{(s)z} = 0$  cuando  $J_i^{(e)} = 0$ . Por lo tanto, de las ecuaciones (185) y (186) vemos que si  $J_i^{(s)z}(\omega) = 0$  entonces  $S_i(\omega)$  también se anula. De manera análoga, se puede mostrar que en presencia del acoplamiento R+D[ $hkl$ ] lineal en  $\mathbf{k}$ , la orientación de espín  $S_i(\omega) = 0$  cuando  $J_i^{(e)}(\omega) = 0$ .

#### 7.4 Resumen de resultados

En este capítulo se calculó el tensor de polarizabilidad de espín  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega)$ , el cual describe la orientación de espín  $S_i(\omega)$  como respuesta a un campo eléctrico y a un gradiente de temperatura. En presencia de la IEO lineal en  $\mathbf{k}$ , se derivaron fórmulas que establecen una relación entre la polarizabilidad de espín  $\gamma_{ij}^{(\sigma\nu)}(\omega)$  con la conductividad de espín  $L_{ij}^{(s\nu)k}(\omega)$ . Como se discutió previamente, diversos autores han destacado la importancia de este tipo de relaciones debido a que permiten establecer una conexión entre la densidad de espín y distintos tipos de corrientes. Además, como consecuencia de dichas conexiones se mostró que, bajo condiciones de corriente eléctrica cero, el fenómeno de orientación de espín inducida por un gradiente de temperatura se anula. Por lo tanto, podemos concluir que la cancelación de este efecto termoespintrónico es resultado precisamente de la dependencia lineal en  $\mathbf{k}$  de la interacción espín-órbita, como ocurre con el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico estudiado en el capítulo 5.

## 8. Conclusiones

---

La presente tesis tuvo como objetivo realizar un estudio teórico de los fenómenos de la corriente de espín y la orientación de espines como respuesta a un gradiente de temperatura, a través de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus presente en heteroestructuras semiconductoras con estructura cristalina tipo zincblenda. Para lograr este objetivo se utilizó la teoría fenomenológica de transporte para obtener los correspondientes coeficientes fenomenológicos  $L_{ij}^{\xi\nu}(\omega)$  en respuesta lineal a un gradiente de temperatura y a un campo eléctrico en el régimen dinámico. Este cálculo combina el estudio a frecuencia finita con el efecto conjunto de los acoplamientos Rashba y Dresselhaus. Se analizaron los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras crecidas en las principales direcciones cristalográficas [001], [111] y [110], donde la interacción espín-órbita es significativa.

La interacción espín-órbita presente en esta clase de sistemas produce un desdoblamiento de los estados de espín, esto abre la posibilidad de que se llevan a cabo transiciones verticales entre las sub-bandas de espín. El estudio de la densidad conjunta de estados, a temperatura  $T = 0$ , nos permite concluir que la estructura y el comportamiento espectral de los coeficientes  $L_{ij}^{\xi\nu}(\omega)$  se pueden entender en términos de procesos de absorción de energía y transiciones verticales, los cuales tienen lugar en un ancho de banda de absorción determinado por el tipo de interacción espín-órbita y la densidad electrónica  $n$ . Los resultados obtenidos al evaluar los coeficientes  $L_{ij}^{\xi\nu}(\omega)$  muestran que, en efecto, la anisotropía que resulta de la presencia simultánea del acoplamiento R+D[001] o R+D[110], da lugar a un comportamiento espectral diferente del correspondiente a los casos en que sólo existe acoplamiento isotrópico (sólo Rashba o Dresselhaus).

Al aumentar la temperatura ocurre un ensanchamiento térmico de la función de distribución de Fermi, en consecuencia las transiciones se pueden realizar en un ancho de banda mayor que el correspondiente al caso  $T = 0$ . Por lo tanto, estos resultados como función de la temperatura, sugieren una nueva posibilidad de acceder a los estados de espín a través de perturbaciones térmicas, además de la conocida modulabilidad de los parámetros de acoplamiento y la densidad electrónica.

Por otro lado, se derivaron nuevas relaciones que conectan las corriente eléctrica, corriente

de espín y la orientación de espines como respuesta a un gradiente de temperatura, válidas estrictamente para acoplamiento  $R+D[hkl]$  lineal en el vector de onda  $\mathbf{k}$  del electrón. A través de dichas conexiones, se obtuvo uno de los principales resultados de esta tesis, la anulación del efecto Hall de espín inducido por un gradiente de temperatura pero a través del efecto termoeléctrico, es decir, bajo condiciones de corriente eléctrica cero como ocurre normalmente en el estudio de los fenómenos termoeléctricos. Este resultado refuta la predicción hecha por Z. Ma (2010), único trabajo sobre el tema y que además sólo considera el acoplamiento Rashba.

Además, se mostró que la presencia del término cúbico del acoplamiento Dresselhaus, da como resultado que el efecto Hall de espín de tipo termoeléctrico no se anule. De esta forma se corroboró que, efectivamente, dicha anulación es resultado de la dependencia lineal en  $\mathbf{k}$  de la interacción espín-órbita y por la correspondiente naturaleza de los estados de espín. Este resultado es potencialmente útil para discernir la presencia efectiva del término cúbico frente a la contribución lineal.

En general, los resultados obtenidos nos permiten concluir que la presencia simultánea de la interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus ofrece una nueva posibilidad de controlar los estados de espín mediante perturbaciones térmicas y eléctricas en el régimen dinámico. De esta manera, al incorporar el grado de libertad del espín a los fenómenos termoeléctricos que se han estudiado ampliamente, se abre una familia de nuevos efectos termoespintrónicos que aún no están completamente explorados y que pueden ser potencialmente útiles para aumentar la eficiencia y versatilidad de los dispositivos termoeléctricos actuales.

### **Trabajo a futuro**

Existen diversas líneas de investigación en las cuales es posible seguir trabajando y de esta manera dar continuidad a la investigación desarrollada en esta tesis. Resulta natural extender este estudio a otro tipo de sistemas, por ejemplo en gases de huecos bidimensionales o en grafeno, donde la IEO también desempeña un rol importante. De igual manera, resulta interesante estudiar estos fenómenos en sistemas semiconductores que presentan diferentes tipos esfuerzos internos, donde la presencia de un tensor de esfuerzo actúa sobre el espín

de los electrones como si se tratase de un nuevo tipo de IEO. También se puede considerar la presencia de un campo magnético externo aplicado en el plano de un GE2D, debido a que se sabe que dicho campo produce una orientación de espín fuera del plano del gas. El entendimiento de estos fenómenos puede ser útil para investigaciones experimentales en estos sistemas.

## Lista de referencias bibliográficas

- Adachi, H., Uchida, K., Saitoh, E., Ohe, J., Takahashi, S., y Maekawa, S. (2010). Gigantic enhancement of spin Seebeck effect by phonon drag. *Appl. Phys. Lett.*, **97**(25): 252506.
- Adachi, H., Ohe, J., Takahashi, S., y Maekawa, S. (2011). Linear-response theory of spin Seebeck effect in ferromagnetic insulators. *Phys. Rev. B*, **83**(9): 094410.
- Adachi, H., Uchida, K., Saitoh, E., y Maekawa, S. (2013). Theory of the spin Seebeck effect. *Rep. Prog. Phys.*, **76**: 036501.
- Alomar, M. I., Serra, L., y Sánchez, D. (2015). Seebeck effects in two-dimensional spin transistor. *Phys. Rev. B*, **91**(7): 075418.
- Awschalom, D., Loss, D., y Samarth, N. (2002). *Semiconductor spintronics and quantum computation*. Springer. Alemania. 311 pp.
- Bader, S. D. y Parkin, S. S. P. (2010). Spintronics. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.*, **1**: 71–88.
- Baibich, M. N., Broto, J. M., Fert, A., Nguyen Van Dau, F., Petroff, F., Eitenne, P., Creuzet, G., Friederich, A., y Chazelas, J. (1988). Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, **61**(21): 2472.
- Bauer, G. E. W., MacDonald, A. H., y Maekawa, S. (2010). Spin caloritronics. *Solid State Commun.*, **150**(11-12): 459–460.
- Bauer, G. E. W., Saitoh, E., y van Wees, B. J. (2012). Spin caloritronics. *Nat. Mater.*, **11**(5): 391–399.
- Borge, J., Gorini, C., y Raimondi, R. (2013). Spin thermoelectrics in a disordered Fermi gas. *Phys. Rev. B*, **87**(8): 085309.
- Bruus, H. y Flensberg, K. (2004). *Many-body quantum theory in condensed matter physics: An introduction*. Oxford University Press. Gran Bretaña. 435 pp.
- Bychkov, Y. A. y Rashba, E. I. (1984). Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *J. Phys. C.*, **17**(33): 6039–6045.
- Callen, H. B. (1981). *Termodinámica*. Editorial AC. Madrid. 368 pp.
- Cartoixà, X., Ting, D. Z.-Y., y Chang, Y.-C. (2005). Suppression of the D'yakonov-Perel' spin relaxation mechanism for all spin components in [111] zincblende quantum wells. *Phys. Rev. B*, **71**(4): 045313.
- Cartoixà, X., Wang, L.-W., Ting, D. Z.-Y., y Chang, Y.-C. (2006). Higher-order contributions to Rashba and Dresselhaus effects. *Phys. Rev. B*, **73**(20): 205341.
- Chang, R. S., Chu, C. S., y Mal'shukov, A. G. (2009). Competing interplay between Rashba and cubic- $k$  Dresselhaus spin-orbit interactions in spin-Hall effect. *Phys. Rev. B*, **79**(19): 195314.

- Chaplik, A. V., Entin, M. V., y Magarill, L. I. (2002). Spin orientation of electrons by electric field in 2D systems without inversion symmetry. *Physica E*, **13**: 744.
- Cheng, S.-G., Xing, Y., Sun, Q.-F., y Xie, X. C. (2008). Spin Nernst effect and Nernst effect in two-dimensional electron systems. *Phys. Rev. B*, **78**(4): 045302.
- Cheol, H., Hyun, J., Eom, J., Chang, J., Hee, S., y Johnson, M. (2009). Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor. *Science*, **325**(5947): 1515–1518.
- Datta, S. y Das, B. (1990). Electronic analog of the electro-optic modulator. *Appl. Phys. Lett.*, **56**(7): 665–667.
- Davies, J. H. (1998). *The physics of low-dimensional semiconductor: an introduction*. Cambridge University Press. Cambridge. 460 pp.
- Dimitrova, O. V. (2005). Spin-Hall conductivity in a two-dimensional Rashba electron gas. *Phys. Rev. B*, **71**(24): 245327.
- Dresselhaus, G. (1955). Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Phys. Rev.*, **100**(2): 580–586.
- D'yakonov, M. I. y Kachorovskii, V. Y. (1986). Spin relaxation of two-dimensional electrons in noncentrosymmetric semiconductors. *Sov. Phys. Semicond.*, **20**(1): 110–112.
- D'yakonov, M. I. y Perel', V. I. (1971a). Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Phys. Lett. A*, **35**(6): 459–460.
- D'yakonov, M. I. y Perel', V. I. (1971b). Possibility of orienting electron spins with current. *Sov. Phys. JETP Lett.*, **13**(11): 467–469.
- Dyrdal, A., Inglot, M., Dugaev, V. K., y Barnas, J. (2013). Thermally induced spin polarization of a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **87**(24): 245309.
- Edelstein, V. M. (1990). Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. *Solid State Commun.*, **73**(3): 233–235.
- Engel, H.-A., Halperin, B. I., y Rashba, E. I. (2005). Theory of spin Hall conductivity in n-doped GaAs. *Phys. Rev. Lett.*, **95**(16): 166605.
- Erlingsson, S. I., Schliemann, J., y Loss, D. (2005). Spin susceptibilities, spin densities, and their connection to spin currents. *Phys. Rev. B*, **71**(3): 035319.
- Ferry, D. K. y Goodnick, S. M. (1997). *Transport in nanostructures*. Cambridge University Press. Cambridge. 512 pp.
- Ganichev, S. D., Bel'kov, V. V., Golub, L. E., Ivchenko, E. L., Schneider, P., Giglberger, S., Eroms, J., De Boeck, J., Borghs, G., Wegscheider, W., Weiss, D., y Prettl, W. (2004a). Experimental separation of Rashba and Dresselhaus spin splittings in semiconductor quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, **92**(25): 256601.
- Ganichev, S. D., Danilov, S. N., Schneider, P., Bel'kov, V. V., Golub, L. E., Wegscheider, W., Weiss, D., y Prettl, W. (2004b). Can an electric current orient spins in quantum wells? *cond-mat/0403641v1*.

- Hao, Y. F. (2012). Rashba and Dresselhaus spin-orbit interaction in semiconductor quantum wells. *Eur. Phys. J. B.*, **85**(2): 84.
- Heide, M., Bihlmayer, G., Mavropoulos, P., Bringer, A., y Blugel, S. (2006). Scientific Highlight of the Month: Spin-orbit driven physics at surfaces. *Psi-k Newsletter*, **78**: 111–145.
- Hernandez, F. G. G., Nunes, L. M., Gusev, G. M., y Bakarov, A. K. (2013). Observation of the intrinsic spin Hall effect in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **88**(16): 161305.
- Hirsch, J. E. (1999). Spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, **83**(9): 1834–1837.
- Iglesias, P. E. y Maytorena, J. A. (2014). Absence of thermospin current of a spin-orbit-coupled two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. B*, **89**(15): 155432.
- Il'inskii, Y. A. y Keldysh, L. V. (1994). *Electromagnetic response of a material media*. Springer, primera edición. Nueva York. 316 pp.
- Inoue, J., Bauer, G. E. W., y Molenkamp, L. W. (2004). Suppression of the persistent spin Hall current by defect scattering. *Phys. Rev. B*, **70**(4): 041303.
- Jacquod, P., Whitney, R. S., Meair, J., y Buttiker, M. (2012). Onsager relations in coupled electric, thermoelectric, and spin transport: The tenfold way. *Phys. Rev. B*, **86**(15): 155118.
- Jaworski, C. M., Yang, J., Mack, S., Awschalom, D. D., Heremans, J. P., y Myers, R. C. (2010). Observation of the spin-Seebeck effect in a ferromagnetic semiconductor. *Nat. Mater.*, **9**(11): 898–903.
- Jia, C. y Berakdar, J. (2011). Thermoelectric effect of multiferroic oxide interfaces. *Appl. Phys. Lett.*, **98**(4): 042110–3.
- Johnson, M. y Silsbee, R. H. (1987). Thermodynamic analysis of interfacial transport and of the thermomagnetolectric system. *Phys. Rev. B*, **13**(10): 4959–4972.
- Jungwirth, T., Wunderlich, J., y Olejnik, K. (2012). Spin Hall effect devices. *Nat. Mater.*, **11**(5): 382–390.
- Kato, Y. K., Myers, R. C., Gossard, A. C., y Awschalom, D. (2004a). Current-induced spin polarization in strained semiconductor. *Phys. Rev. Lett.*, **93**(17): 176601.
- Kato, Y. K., Myers, R. C., Gossard, A. C., y Awschalom, D. D. (2004b). Observation of the spin Hall effect in semiconductors. *Science*, **306**(5703): 1910–1913.
- Kubo, R. (1957). Statistical-mechanical theory of irreversible processes. I. General theory and simple applications to magnetic and conduction problems. *J. Phys. Soc. Jpn.*, **12**(6): 570–586.
- Li, Z., Ma, Z., y Zhang, C. (2008). Temperature dependence of the intrinsic spin Hall effect in Rashba spin-orbit coupled systems. *EPL*, **82**(6): 67003.

- Li, Z., Marsiglio, F., y Carbotte, J. P. (2013). Vanishing of interband light absorption in a persistent spin helix state. *Sci. Rep.*, **3**: 2828.
- Liu, X. y Xie, X. (2010). Spin Nernst effect in the absence of a magnetic field. *Solid State Commun.*, **150**(11-12): 471–474.
- Luo, J., Munekata, H., Fang, F. F., y Stiles, P. J. (1990). Effects of inversion asymmetry on electron energy band structures in GaSb/InAs/GaSb quantum wells. *Phys. Rev. B*, **41**(11): 7685–7693.
- Ma, Z. (2010). Spin Hall effect generated by a temperature gradient and heat current in a two-dimensional electron gas. *Solid State Commun.*, **150**(11-12): 510–513.
- Mahan, G. D. (2000). *Many-particle physics*. Kluwer Academic/Plenum Publishers, tercera edición. Nueva York. 785 pp.
- Maldague, P. F. (1978). Many-body corrections to the polarizability of the two-dimensional electron gas. *Surf. Sci.*, **73**: 296.
- Maytorena, J. A., López-Bastidas, C., y Mireles, F. (2006). Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems. *Phys. Rev. B*, **74**(23): 235313.
- Mohanty, P., Zolfagharkhani, G., Kettermann, S., y Fulde, P. (2004). Spin-mechanical device for detection and control of spin current by nanomechanical torque. *Phys. Rev.*, **70**(19): 195301.
- Murakami, S., Nagaosa, N., y Zhang, S.-C. (2003). Dissipationless quantum spin current at room temperature. *Science*, **301**(5638): 1348–1351.
- Nitta, J., Akazaki, T., y Takayanagi, H. (1997). Gate control of spin-orbit interaction in an inverted  $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$  heterostructure. *Phys. Rev. B*, **78**(7): 1335.
- Nolas, G. S., Sharp, J., y Goldsmid, H. J. (2001). *Thermoelectrics: basics principles and new materials developments*. Springer. Alemania. 292 pp.
- Ong, N. P. (2008). Solid-state physics: Recipe for spin currents. *Nature*, **455**(7214): 741–743.
- Onoda, S., Sugimoto, N., y Nagaosa, N. (2008). Quantum transport theory of anomalous electric, thermoelectric, and thermal Hall effects in ferromagnets. *Phys. Rev. B*, **77**(16): 165103.
- Pletyukhov, M. y Shnirman, A. (2009). Spin density response by electromagnetic waves in a two-dimensional electron gas with both Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, **79**(3): 033303.
- Poshakinskiy, A. V. y Tarasenko, S. A. (2013). Effect of Dresselhaus spin-orbit coupling on spin dephasing in asymmetric and macroscopically symmetric (110)-grown quantum wells. *Phys. Rev. B*, **87**(23): 235301.
- Raichev, O. E. (2007). Frequency dependence of induced spin polarization and spin current in quantum wells. *Phys. Rev. B*, **75**(20): 205340.

- Sales, B. C. (2002). Thermoelectric materials: Smaller is cooler. *Science*, **295**(5558): 1248–1249.
- Schäpers, T., Engels, G., Lange, J., Klocke, T., Hollfelder, M., y Luth, H. (1998). Effects of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{InP}$  quantum wells for B. *J. Appl. Phys.*, **83**(8): 4324.
- Schliemann, J. (2006). Spin Hall effect. *Int. J. Mod. Phys. B*, **20**(9): 1015–1036.
- Schliemann, J. y Loss, D. (2004). Dissipation effects in spin-Hall transport of electrons and holes. *Phys. Rev. B*, **69**(16): 165315.
- Shekhter, A., Khodas, M., y Finkel'stein, A. M. (2005). Chiral spin resonance and spin-Hall conductivity in the presence of the electron-electron interaction. *Phys. Rev. B*, **71**(16): 165329.
- Sherman, E. Y., Najmaie, A., y Sipe, J. E. (2005). Spin current injection by intersubband transitions in quantum wells. *Appl. Phys. Lett.*, **86**(12): 122103.
- Sih, V., Myers, R. C., Kato, Y. K., Lau, W. H., Gossard, A. C., y Awschalom, D. D. (2005). Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases. *Nat. Phys.*, **1**(1): 31–35.
- Silov, A. Y., Blajnov, P. A., Wolter, J. H., Hey, R., Ploog, K. H., y Averkiev, N. S. (2004). Current-induced spin polarization at a single heterojunction. *Appl. Phys. Lett.*, **85**(24): 5929–5931.
- Silsbee, R. H. (2004). Spin-orbit induced coupling of charge current and spin polarization. *J. Phys.: Condens. Matter*, **16**: R179–R207.
- Sinitsyn, N. A., Hankiewicz, E. M., Teizer, W., y Sinova, J. (2004). Spin Hall and diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B*, **70**(8): 081312.
- Sinova, J., Culcer, D., Niu, Q., Sinitsyn, N. A., Jungwirth, T., y MacDonald, A. H. (2004). Universal intrinsic spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, **92**(12): 126603.
- Stern, N. P., Ghosh, S., Xiang, G., Zhu, M., Samarth, N., y Awschalom, D. D. (2006). Current-induced spin polarization and the spin Hall effect at room temperature. *Phys. Rev. Lett.*, **97**(12): 126603.
- Trushin, M. y Schliemann, J. (2007). Anisotropic current-induced spin accumulation in the two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling. *Phys. Rev.*, **75**(15): 155323.
- Uchida, K., Takahashi, S., Harii, K., Ieda, J., Koshibae, W., Ando, K., Maekawa, S., y Saitoh, E. (2008). Observation of the spin Seebeck effect. *Nature*, **455**(7214): 778–781.
- Uchida, K., Xiao, J., Adachi, H., Ohe, J., Takahashi, S., Ieda, J., Ota, T., Kajiwara, Y., Umezawa, H., Kawai, H., Bauer, G. E. W., Maekawa, S., y Saitoh, E. (2010). Spin Seebeck insulator. *Nature materials*, **9**(11): 894–897.

- Valenzuela, S. O. y Tinkham, M. (2006). Direct electronic measurement of the spin Hall effect. *Nature*, **442**(7099): 176–179.
- Wang, C. M., Cui, H. T., y Lin, Q. (2009). Current-induced spin polarization for a general two-dimensional electron system. *Phys. Status Solidi B*, **246**(10): 2301.
- Winkler, R. (2003). *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*. Springer. Berlin. 228 pp.
- Wunderlich, J., Kaestner, B., Sinova, J., y Jungwirth, T. (2005). Experimental observation of the spin-Hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor systems. *Phys. Rev. Lett.*, **94**(4): 047204.
- Xiao, J., Bauer, G. E. W., Uchida, K., Saitoh, E., y Maekawa, S. (2010). Theory of magnon-driven spin Seebeck effect. *Phys. Rev. B*, **81**(21): 214418.
- Zhang, S. (2000). Spin Hall effect in the presence of spin diffusion. *Phys. Rev. Lett.*, **85**(2): 393–396.
- Ziman, J. M. (1972). *Principles of the theory of solids*. Cambridge University Press, segunda edición. Cambridge. 435 pp.
- Zutić, I., Fabian, J., y Das Sarma, S. (2004). Spintronics: fundamentals and applications. *Rev. Mod. Phys.*, **76**(2): 323.