

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



**Maestría en Ciencias
en Nanociencias**

**Efecto de la orientación cristalográfica en la conductividad
Hall de espín y fase de Berry de un gas electrónico con
interacción espín-órbita**

Tesis

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

Presenta:

Daniel Albino Muñoz Santana

Ensenada, Baja California, México
2018

Tesis defendida por
Daniel Albino Muñoz Santana

y aprobada por el siguiente comité

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova
Director de Tesis

Miembros del comité

Dra. Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez

Dr. Ernesto Cota Araiza

Dr. Santiago Camacho López



Dr. Sergio Fuentes Moyado
Coordinador del Posgrado en Nanociencias

Dra. Rufina Hernández Martínez
Directora de Estudios del Posgrado

Daniel Albino Muñoz Santana © 2018

Queda prohibida la reproducción parcial o total de esta obra sin el permiso formal y explícito del autor y director de tesis.

Resumen de la tesis que presenta **Daniel Albino Muñoz Santana** como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Nanociencias.

Efecto de la orientación cristalográfica en la conductividad Hall de espín y fase de Berry de un gas electrónico con interacción espín-órbita

Resumen aprobado por:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdoba
Director de Tesis

En esta tesis se estudian funciones respuesta dinámicas, tales como la conductividad de carga y la conductividad de espín, de un gas electrónico bidimensional (GE2D) con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} para una dirección de crecimiento arbitraria. Se investiga el efecto de la orientación del gas sobre estas cantidades, para lo cual, primero se deriva el Hamiltoniano espín-órbita que corresponde a dicha dirección arbitraria; se obtienen expresiones generales (fórmulas de Kubo) de los tensores de conductividad de carga y espín, sin especificar una forma funcional explícita del campo vectorial espín-órbita, mediante la teoría de respuesta lineal. Para el caso particular de una interacción espín-órbita Rashba y Dresselhaus lineal en \mathbf{k} , estas expresiones presentan un prefactor que depende de los parámetros espín-órbita y de la orientación cristalina. A partir de dicho prefactor, es posible determinar las condiciones bajo las cuales se anulan la absorción óptica y la corriente de espín. Al realizar los cálculos numéricos, se obtienen espectros de la densidad conjunta de estados y funciones respuesta que son significativamente diferentes dependiendo de la relación entre la magnitud de las contribuciones espín-órbita y la dirección de crecimiento cristalográfico. Se procede a analizar los prefactores correspondientes a cada conductividad y se encuentra que ambos factores se anulan, y por lo tanto las conductividades, al cumplirse las condiciones de simetría $SU(2)$, bajo las cuales el campo espín-órbita se vuelve colineal; sin embargo, para el caso de la conductividad de espín, hay condiciones que anulan esta cantidad sin necesidad de un campo independiente de \mathbf{k} . Por último, se realiza un cálculo de la Fase de Berry y la conductividad Hall de espín estática del GE2D con el objetivo de determinar las direcciones de crecimiento para las cuales es posible encontrar una relación entre ambas cantidades. En el estudio se observa que no existe una conexión de tipo universal, sin embargo, para las orientaciones del gas [001] y [111] específicamente, sí hay una relación.

Palabras clave: Fase de Berry, heteroestructura semiconductor, espín-órbita, espintrónica.

Abstract of the thesis presented by **Daniel Albino Muñoz Santana** as a partial requirement to obtain the Master of Science in Nanoscience.

Crystallographic orientation effect on the spin Hall conductivity and Berry phase of a spin-orbit electronic gas

Abstract approved by:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdoba
Director de Tesis

We study the dynamic response functions giving the charge and spin currents induced in a two-dimensional electronic gas (2DEG) with Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling (SOC) by an external AC electric field. We focus on the effects of crystal orientation on the optical and spin Hall conductivities. The Hamiltonian for a 2DEG grown along an arbitrary direction and general expressions for the response tensors in terms of a generic spin-orbit vector field are derived within the formalism of linear response theory. For a linear-in-momentum Rashba and Dresselhaus SOC, the obtained Kubo formulas present a prefactor which depends on the SO strength parameters and the crystallographic orientation. The analysis of these prefactors reveals the conditions for vanishing of the charge and spin responses. We found that such conditions are exactly those sufficient to produce a spin-preserving SU(2) symmetry of the Hamiltonian, where the SO vector field becomes collinear, defining a fixed axis of quantization, as was reported recently. Additionally, an alternative condition for vanishing of the spin conductivity without appealing to the SU(2) symmetry is found. The spectral features of the calculated spectra of the optical and spin Hall conductivities are explained in terms of critical frequencies of the joint density of states, and the dependence on the crystal orientation is discussed. These results suggest an additional way to manipulate the charge and spin dynamic responses via crystal orientation, besides electrical gating or frequency modulation. Knowing the Hamiltonian for an arbitrary grown direction, and motivated by some particular results in the literature, we explore the possible connection between the static spin Hall conductivity and the Berry phase. In contrast to recent reports, we included a normal-to-the-plane component of the SO vector field and analytically calculated these quantities. We found that, in general, a universal connection does not exist, except for samples oriented along the [001] and [111] directions.

Keywords: Berry phase, semiconductor structure, spin-orbit, spintronics.

Dedicatoria

A ese intrincado y singular rompecabezas,
que ha formado entrelazando sus pestañas,
una hermosa coincidencia de dos piezas.

Al recto y al verso cuya tinta se asoma
a través de esa hoja y embellece la estrofa,
que el anverso y reverso en conjunto forman.

A las tácitas de una moneda sin cuño y tan válida,
a la que con tal de regalarme dicha en la vida,
no le importa cubrir su impronta con pátina.

A quienes me han transmitido invaluable experiencia;
a ellos que me brindaron cuerpo y conciencia;
a ella, a mi más cercana directa ascendencia.

Agradecimientos

A mi director de tesis y amigo Jesús Maytorena por el invaluable conocimiento y apoyo que me ha brindado, gracias al cual este proyecto ha llegado a su realización.

A los miembros de mi comité de Tesis: Dra. Priscilla Iglesias, Dr. Ernesto Cota y Dr. Santiago Camacho; gracias por su disponibilidad y atención conmigo, así como por el esfuerzo por eliminar del trabajo cualquier déficit.

A todo el personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM y del Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada por las facilidades brindadas, así como al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por los recursos económicos otorgados.

Haciendo a un lado cualquier formalidad, quiero agradecer enormemente a mi familia por todo su amor y por ser las personas que están incondicionalmente conmigo. Quiero agradecer a mis amigos por considerarme el suyo y por ser esa familia selecta que me apoya y rompe la rutina.

Gracias por estar aquí de una u otra forma.

Tabla de Contenido

	Página
Resumen en español.	II
Resumen en inglés.	III
Dedicatoria.	IV
Agradecimientos.	V
Lista de figuras	VIII
Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Antecedentes	6
1.2 Hipótesis	9
1.3 Objetivos	9
1.3.1 Objetivo general	9
1.3.2 Objetivos específicos	9
Capítulo 2. Hamiltoniano de un sistema cuántico con interacción espín-órbita	11
2.1 Hamiltoniano general de dos niveles	11
2.2 Propiedades espectrales	12
2.3 Acoplamiento espín-órbita de Rashba	14
2.4 Acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus lineal y cúbico	16
2.5 Campo espín-órbita y orientación cristalina	17
Capítulo 3. Hamiltoniano de un GE2D con orientación cristalina arbitraria	21
3.1 Matriz de rotación	22
3.2 Transformación del Hamiltoniano	24
3.3 Hamiltoniano de Dresselhaus con términos cúbicos en \mathbf{k}	26
3.4 Simetría $SU(2)$	28
Capítulo 4. Fórmulas de Kubo para las conductividades de carga y espín	31
4.1 Fórmula general de Kubo	31
4.2 Hamiltoniano de interacción	32
4.3 Conductividad óptica	34
4.4 Conductividad de corriente de espín	38
Capítulo 5. Densidad conjunta de estados	42
5.1 Definición, contornos de Fermi y Curva de resonancia	42
5.2 Frecuencias críticas, espectros y consecuencias de una dirección de crecimiento general	44
Capítulo 6. Funciones respuesta	52
6.1 Absorción óptica	52
6.2 Conductividad de espín	56
6.3 Resumen de resultados	59
Capítulo 7. Fase de Berry y conductividad Hall de espín	60
7.1 Fase de Berry de un sistema general de dos niveles	60
7.2 Fase de Berry de un Hamiltoniano espín-órbita lineal en \mathbf{k}	62
7.3 Conductividad Hall de espín y relación con fase de Berry	65

Capítulo 8. Conclusiones	70
Literatura citada	72
A Ángulos de Euler en función de los vectores \hat{l}, \hat{m} y \hat{n}	76
B Coeficientes de Dresselhaus en la matriz de parámetros espín-órbita μ'_{ij}	79
C Campo espín-órbita en función de armónicos angulares	82
D Fase de Berry	86

Lista de figuras

Figura	Página	
1	Distribución de la orientación de espín en el estado $ \lambda(\mathbf{k})\rangle$ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba.	15
2	Distribución de la orientación de espín en el estado $ \lambda\mathbf{k}\rangle$ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus.	17
3	(a) A temperatura $T = 0$, los únicos estados permitidos que intervienen en transiciones entre las sub-bandas ε_λ , son aquellos con valores de k entre $k_F^+(\theta)$ y $k_F^-(\theta)$ para los cuales se cumple $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$. (b) Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega) = \{(k_x, k_y) \mid \varepsilon_+(k_x, k_y) - \varepsilon_-(k_x, k_y) = \hbar\omega\}$ para ω_1 y ω_2 fijas, con $\omega_1 < \omega_2$, $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ y $n = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Solamente el área sombreada contribuye a las transiciones.	43
4	Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$ (b) $\hbar\omega_<$, (c) $\hbar\omega_>$ y (d) $\hbar\omega_-$. Los parámetros utilizados son $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$, $\gamma k_n^2 = 2\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$	45
5	Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 4.	45
6	Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_>$, (c) $\hbar\omega_<$ y (d) $\hbar\omega_-$. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ mientras que α y el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4.	46
7	Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[456]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[456]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_>$, (c) $\hbar\omega_<$ y (d) $\hbar\omega_-$. Los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 4.	47
8	Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 6.	47

- 9 Densidad conjunta de estados y región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. (a) Dirección de crecimiento [123] con $\gamma k_n^2 = 2\alpha$. (b) Dirección de crecimiento [456] con $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$. El resto de los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 4. 48
- 10 Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ mientras que α y el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4. 49
- 11 Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ de la dirección cristalográfica [123]. La energía involucrada en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ es $\hbar\omega_< = \hbar\omega_>$. Los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 10. 49
- 12 Primer octante de una esfera de direcciones de crecimiento del GE2D. Se muestran las regiones que satisfacen $\omega_< < \omega_>$ (azul) y $\omega_> < \omega_<$ (naranja) para las relaciones (a) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0$, (b) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0.1$, (c) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0.5$, (d) $\alpha/\gamma k_n^2 = 1$, (e) $\alpha/\gamma k_n^2 = 3$ y (f) $\alpha/\gamma k_n^2 = 4$. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 240 \text{ meV \AA}$ mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4. 50
- 13 Frecuencias críticas ω_+ , $\omega_<$, $\omega_>$ y ω_- como función de $\alpha/\gamma k_n^2$ para la dirección de crecimiento cristalino [001]. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 240 \text{ meV \AA}$ mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4. 51
- 14 Contribución espín-órbita a la conductividad de carga $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ para la dirección de crecimiento cristalino [123]. Los parámetros utilizados son (a) $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ ($\omega_> < \omega_<$), (b) $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ ($\omega_< = \omega_>$) y (c) $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$ ($\omega_< < \omega_>$), mientras que el resto son los mismos que en la Figura 4. 53
- 15 Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{\Lambda}$. Los parámetros utilizados son (a) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 1er y 3er cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 2do y 4to cuadrante; (b) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_z^2)/2)n_y$ para el 1er y 4to cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_z^2)/2)n_y$; (c) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_y^2 + n_z^2)/2)n_x$ para el 1er y 4to cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_y^2 + n_z^2)/2)n_x$ 54
- 16 Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{\Lambda}$. Los parámetros utilizados son $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 1er y 3er cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 2do y 4to cuadrante con excepción de las direcciones específicas en que $|h| = |l|$ o $|k| = |l|$ donde se utilizan las relaciones de la Figuras 15b y 15c respectivamente. 55

- 17 Esfera de direcciones de crecimiento del GE2D y el valor, en colores, de $\sqrt{\Lambda}$ para cada una de ellas; se utiliza una relación $\alpha/\gamma k_n^2$ dependiente de la posición, de forma que, cuando al menos dos índices de Miller coincidan en módulo, esta satisfaga las condiciones que anulan el factor Λ 55
- 18 Tensor de conductividad de espín $\text{Im} \sigma_{xx}^{s,z}(\omega)$ para la dirección de crecimiento cristalino [123]. Los parámetros utilizados son (a) $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ ($\omega_> < \omega_<$), (b) $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ ($\omega_< = \omega_>$) y (c) $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$ ($\omega_< < \omega_>$), mientras que el resto son los mismos que en la Figura 4 57
- 19 Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{(\mu'_x \times \mu'_y)_z}$. Los parámetros utilizados son (a) los mismos que en la Figura 16 y (b) las relaciones (6.18) y (6.19) para anular el factor según es el caso. 59

Capítulo 1. Introducción

En las últimas décadas el avance en la tecnología del silicio y la miniaturización de los dispositivos electrónicos ha ocurrido a pasos gigantes, ocasionando que los efectos cuánticos comiencen a ser un factor relevante. Además, cada vez es más difícil obtener un mejor rendimiento o mayor capacidad en los dispositivos electrónicos. Aprovechando la relevancia de los fenómenos cuánticos y como propuesta para incrementar las capacidades de los dispositivos, ha surgido la *Espintrónica*: ciencia y tecnología basada en el uso del grado de libertad de espín de un portador de carga para almacenar, codificar, tener acceso a, procesar y/o transmitir información. Tradicionalmente, la forma en que se llevan a cabo estos procedimientos en dispositivos electrónicos es mediante el uso de la carga del electrón, mientras que el espín, al estar orientado de manera aleatoria, no tiene influencia sobre el flujo de la corriente. Sin embargo, en la Espintrónica lo que se busca es precisamente conseguir una manipulación coherente del espín y utilizarlo, por ejemplo, para controlar el flujo de corriente (Bandyopadhyay et al., 2008).

En un dispositivo espintrónico lo que se busca es producir una corriente polarizada de espines. Algunas preguntas fundamentales en esta área son (a) ¿Cuál es una vía efectiva para polarizar un sistema de espín? (b) ¿Cuánto tiempo es capaz el sistema de recordar su orientación de espín? (c) ¿Cómo puede detectarse el espín? Por todo esto, el conocimiento de cómo evoluciona el espín al atravesar un dispositivo y, principalmente, la habilidad de controlarlo coherentemente son elementos clave para el desarrollo de la Espintrónica (Žutić et al., 2004).

La interacción espín-órbita es uno de los mecanismos candidatos para la manipulación del espín, en particular la presente en sistemas semiconductores de baja dimensionalidad como lo son los gases electrónicos bidimensionales (GE2D) en los que se enfoca este proyecto. Esta posible manipulación ha provocado un creciente interés en el estudio de fenómenos espintrónicos presentes en estos sistemas.

La interacción espín-órbita describe el acoplamiento entre el movimiento orbital del electrón y su espín, y surge naturalmente de hacer una expansión no relativista de la ecuación de Dirac. De esta aproximación surgen tres correcciones relativistas: la primera correspondiente a la energía cinética, la segunda es el término de Darwin mientras que la tercera y última es el Hamiltoniano que describe al acoplamiento espín-órbita y está dado por

$$H_{SO} = \frac{1}{2m_0c^2} \mathbf{S} \cdot \left(\nabla V \times \frac{\mathbf{p}}{m_0} \right), \quad (1.1)$$

donde m_0 es la masa en reposo del electrón, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ es el momento del electrón con vector de onda

\mathbf{k} , $\hbar = h/2\pi$ donde h es la constante de Planck, c es la velocidad de la luz en el vacío, $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$ es el operador de espín donde $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli y V es un potencial en el que se mueve el electrón. En el caso del electrón libre ($V = 0$), de la ecuación de Dirac se obtienen dos ramas de dispersión o bandas de energía, una positiva y una negativa,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{m_0^2 c^4 + c^2 \hbar^2 k^2}, \quad (1.2)$$

las cuales están separadas por una brecha energética de $2m_0c^2 \approx 1$ MeV, conocida como Brecha de Dirac. Es importante mencionar que esta gran brecha de energía está presente en el denominador del lado derecho de la ecuación (1.1) y por lo tanto los efectos de la interacción espín-órbita se ven suprimidos para electrones débilmente ligados (Schliemann, 2017).

Por otra parte, en un sólido cristalino los electrones se mueven en presencia de potenciales eléctricos producidos por los átomos que forman a la red, por lo que su movimiento está caracterizado por bandas de energía y por una masa efectiva m^* , que corresponde a la masa aparente que presenta el electrón en un sólido, normalmente menor que su masa en reposo. Aquí, el acoplamiento espín-órbita tiene un muy profundo efecto en la estructura de estas bandas. Por ejemplo, en heteroestructuras semiconductoras III-V con estructura cristalina tipo zincblenda, como GaAs, la interacción espín-órbita provoca una separación de la banda de valencia más cercana a la banda de conducción. En la estructura de bandas por amarre fuerte sin espín se puede observar que los estados electrónicos en el extremo superior de la banda de valencia son tipo p (momento angular orbital $l = 1$). Si se toma en cuenta el acoplamiento espín-órbita, se obtienen estados con momento angular total $j = 3/2$ y $j = 1/2$. Estos estados están separados en energía por una brecha, la cual es referida como brecha espín-órbita (Winkler, 2003).

A pesar de las diferencias que existen entre el sistema de electrón libre de Dirac y el sistema de bandas en estos semiconductores, se han encontrado muchas similitudes entre ambos. Sin embargo, hay una diferencia significativa, la brecha de energía entre la banda de valencia y de conducción en esos semiconductores es de aproximadamente 1 eV mientras que la brecha en la ecuación de Dirac es cercana a 1 MeV. Esta diferencia refleja la importancia del acoplamiento espín-órbita y el efecto significativo que tiene en algunos semiconductores como lo son los que tienen una estructura cristalina tipo zincblenda.

Además del incremento significativo en la interacción espín-órbita, la Espintrónica en materiales semiconductores resulta naturalmente atractiva debido a la enorme experiencia en tecnología de sistemas semiconductores que se ha obtenido a lo largo de las últimas décadas. Entre los logros de esta experiencia

se encuentran las técnicas de crecimiento altamente sofisticadas como lo son la epitaxia de haces moleculares (molecular beam epitaxy, MBE) y el depósito por reacción química de vapores organometálicos (metal organic chemical vapor deposition, MOCVD). Estas permiten hacer depósitos de una monocapa de cristal con gran precisión, lo que ha permitido fabricar dispositivos de estado sólido que se comportan como si se trataran de sistemas de dos, una o cero dimensiones (Davies, 1998).

Entre los sistemas de baja dimensionalidad se encuentran los presentes en heteroestructuras semiconductoras. Estas últimas son ampliamente utilizadas para investigar los fenómenos que dependen del espín en semiconductores (Mireles y Kirczenow, 2002). En dichas heteroestructuras se forman pozos cuánticos que, cuando son lo suficientemente angostos, dan lugar a lo que se conoce como un gas electrónico bidimensional (GE2D), en donde los electrones tienen un movimiento restringido a un plano perpendicular a la dirección de crecimiento del cristal (Davies, 1998). Cuando se trabaja experimentalmente, el ancho de estos gases está, típicamente, entre 7 y 15 nm aunque también se han estudiado con grosores menores (Altmann et al., 2016; Dettwiler et al., 2014; Kohda et al., 2012; Kunihashi et al., 2016; Sasaki et al., 2014; Walser et al., 2012; Yang et al., 2012).

Las heteroestructuras semiconductoras que se utilizan principalmente son las de materiales con componentes del grupo III-V como GaAs, InGaAs y AlGaAs. Estos semiconductores tienen una estructura tipo zincblenda que, como se mencionó antes, provoca mecanismos de interacción espín-órbita significativos. A diferencia de la estructura del diamante, este tipo de estructura se caracteriza por no tener un centro de inversión espacial. Es precisamente este aspecto de falta de simetría el que provoca que en estos semiconductores y, por consecuencia, en sus gases electrónicos bidimensionales, se presenten mecanismos de interacción espín-órbita capaces de manipular el espín del electrón, incluso en ausencia de un campo magnético, y sean buenos candidatos para el desarrollo de dispositivos espintrónicos (Winkler, 2003).

En el sistema del GE2D existen dos contribuciones principales del acoplamiento espín-órbita, dos mecanismos originados por la falta de simetría espacial en las heteroestructuras semiconductoras tipo zincblenda. Uno de estos es el ocasionado por la falta de simetría de inversión en el bulto y es conocido como *acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus* (Dresselhaus, 1955). El otro mecanismo espín-órbita importante se presenta cuando el potencial de confinamiento del pozo bidimensional carece de simetría de inversión espacial en la dirección de crecimiento del semiconductor. Este fenómeno es conocido como asimetría de inversión estructural del potencial de confinamiento y da lugar al *acoplamiento espín-órbita de Rashba* (Rashba, 1960; Bychkov y Rashba, 1984). Una característica importante de la interacción de Rashba es

que, a diferencia de la de Dresselhaus que es intrínseca del material, existe la posibilidad de modular su magnitud mediante un voltaje externo, cambiando con este el perfil espacial del potencial de confinamiento (Nitta et al., 1997; Schäpers et al., 1998). Estos dos tipos de interacción espín-órbita proveen un mecanismo por medio del cual se puede acceder a la manipulación del espín de los electrones en semiconductores por medios no magnéticos, y en un futuro al desarrollo de dispositivos espintrónicos.

Siendo el espín un momento magnético intrínseco de los electrones, este se acopla naturalmente con campos magnéticos externos. No obstante, la interacción espín-órbita en un GE2D, presente en estas heteroestructuras semiconductoras, proporciona la posibilidad de inducir una polarización de espín mediante la aplicación de un campo eléctrico en lugar de uno magnético (Edelstein, 1990; Iglesias y Maytorena, 2010; Kato et al., 2004; Silov et al., 2004). Esto debido a que, como se sabe, la interacción espín-órbita en estos gases se traduce en un campo magnético efectivo que depende del momento de los electrones, el cual puede, de alguna forma, ser controlado mediante el campo eléctrico. Un obstáculo para este método de polarización son las impurezas e imperfecciones que dispersan a los electrones cambiando su momento y la dirección del campo magnético efectivo, por lo tanto, también por acoplamiento espín-órbita, el espín adquiere fácilmente una dirección aleatoria. Este proceso de decaimiento del espín se conoce como *mecanismo D'yakonov y Perel'* (D'yakonov y Perel', 1972).

Por lo general, las investigaciones que se hacen del GE2D con interacción espín-órbita se realizan para las direcciones de crecimiento cristalográfico de alta simetría o más bajos índices de Miller: [001], [110] y [111]; por ejemplo, Schliemann et al. (2003) presentan un estudio para la dirección [001] donde, cuando las contribuciones de los dos tipos de interacción espín-órbita son iguales en módulo, existe una conservación de espín en el Hamiltoniano. Sin embargo, en un trabajo reciente se estudió este sistema mediante un Hamiltoniano para una dirección de crecimiento arbitraria (Kammermeier et al., 2016). En este se observó la posibilidad de obtener esta simetría de espín, conocida como simetría SU(2), cuando la magnitud de las contribuciones espín-órbita de Rashba y Dresselhaus son tales que satisfacen una relación específica. Esta simetría se refleja en el espacio de momentos como una orientación paralela del espín en cierta dirección, independiente de \mathbf{k} , y por lo tanto el mecanismo D'yakonov y Perel' se desactiva. Como consecuencia, en el espacio de coordenadas, el espín depende únicamente de la posición espacial del electrón, y experimenta una rotación bien definida cuando este último recorre el plano del gas.

Tomando como inspiración este trabajo, en esta tesis se deriva el Hamiltoniano de un GE2D con interacción espín-órbita, tipo Rashba y tipo Dresselhaus, para una dirección de crecimiento cristalográfica

arbitraria; posteriormente, este se utiliza para estudiar, mediante el formalismo de la teoría de respuesta lineal y fórmula de Kubo, funciones respuesta como la conductividad óptica y la conductividad de espín cuando al gas se le aplica un campo eléctrico uniforme que oscila en el tiempo. De esta manera se pueden observar los efectos de la dirección cristalina sobre estas cantidades relacionadas con fenómenos como la absorción óptica y el efecto Hall de espín en el GE2D.

Otro tema a tratar en este trabajo es la *Fase Geométrica* o *Fase de Berry*, un factor de fase de origen topológico que surge de una evolución adiabática de estados cuánticos cuando parámetros externos al sistema cuántico cambian lentamente creando una trayectoria cerrada en el espacio de estos mismos parámetros.

Existen dos ideas centrales en este concepto. La primera de ellas es la *adiabaticidad*, y se refiere a los cambios lentos en un sistema. Mientras que lo estático es aquello que no cambia y lo dinámico es aquello que sí lo hace, lo adiabático es lo que está en el límite entre los dos. La segunda idea principal es el cambio global en un sistema sin que exista uno local. En geometría, un ejemplo claro de este fenómeno es el transporte paralelo de vectores a lo largo de una trayectoria cerrada sobre una esfera (Wilczek y Shapere, 1989).

Aun cuando la fase geométrica es un concepto que se pasó por alto hasta 1984, cuando el físico Michael Berry lo descubrió, hoy en día se encuentra en cualquier libro de texto de mecánica cuántica (Griffiths y Schroeter, 2018; Shankar, 1994). Es un poderoso y muy valioso concepto unificador, especialmente en esta época en que existe una especialización continua de las ciencias físicas. En su libro *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Bernevig y Hughes dicen: “La fase de Berry es el concepto más importante en teoría de bandas topológicas”.

Mientras que la fase de Berry es atrayente por si misma, en esta tesis se estudia una posible conexión entre la conductividad Hall de espín en un GE2D y la fase geométrica; algo interesante, pues relaciona una cantidad de origen topológico con una propiedad de transporte, algo que hace recordar al famoso efecto Hall cuántico. Esto motivados por un estudio donde se encuentra que existe una relación entre la fase geométrica y la conductividad Hall de espín cuando el gas es crecido en la dirección cristalográfica [001] (Shen, 2004). Mientras que ya existe una investigación de esta relación para un Hamiltoniano espín-órbita general (Chen et al., 2014), esta se limita a un campo Ω sin componente z , es decir $\Omega_z = 0$. Por lo cual, en este trabajo se buscaría hacer el cálculo para el Hamiltoniano $H = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ con $\Omega_z \neq 0$.

1.1. Antecedentes

En las heteroestructuras semiconductoras con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, específicamente en un GE2D, se da un desdoblamiento de los estados de espín incluso en ausencia de un campo magnético externo. Este comportamiento se debe a que el acoplamiento espín-órbita actúa como un campo magnético efectivo $\Omega(\mathbf{k})$ que depende del vector de onda, al que usualmente se le conoce como campo espín-órbita. Este desdoblamiento asemeja a uno de tipo Zeeman pero en el espacio de momentos.

Por otra parte, se ha encontrado, teórica y experimentalmente, que es posible inducir una polarización de espín mediante un campo eléctrico y no solo eso, sino que también puede darse el fenómeno de Efecto Hall de espín (D'yakonov y Perel', 1971; Kato et al., 2004b; Sih et al., 2005); este consiste en la acumulación de electrones en bordes opuestos de un canal conductor, en este caso el GE2D; mientras que los electrones de un lado tienen espín hacia arriba, los del lado contrario tienen espín hacia abajo. La idea es que cuando se aplica el campo eléctrico, el campo espín-órbita produce una torca sobre el espín de los electrones que puede producir una corriente de espín. Al efecto Hall de espín inducido por un campo eléctrico se le conoce como efecto Hall de espín *intrínseco* (Sinova et al., 2004) debido a que surge como resultado de la estructura cristalina del material, a diferencia del *extrínseco*, el cual ocurre debido a la presencia de impurezas (Engel et al., 2005).

Otro aspecto interesante de estos gases, como se mencionó antes, es la posibilidad de tener una simetría de espín. Al considerar la dirección de crecimiento [001], se ha observado que la simetría SU(2), y sus efectos en el sistema, pueden lograrse ajustando el parámetro espín-órbita de Rashba α para que este sea igual en magnitud al de Dresselhaus, $\beta_{[001]}$ (Kohda et al., 2012; Koralek et al., 2009; Schliemann et al., 2003). En distintos materiales se han estimado, experimentalmente, valores de α del orden de 10^{-11} y 10^{-12} eV m dependiendo de la densidad electrónica y del voltaje de compuerta utilizado para variar este parámetro (Nitta et al., 1997, 2009). Por otra parte, el parámetro de Dresselhaus es proporcional a $\gamma(\pi/L_z)^2$ (no solamente para la dirección [001]), donde γ es un parámetro efectivo de acoplamiento y L_z es el ancho del pozo. Para γ se han determinado valores de $\gamma = 24$ eV Å³ en GaAs y 130 eV Å³ en InAs (Perel' et al., 2003). Bajo esta simetría SU(2) se presentan algunos fenómenos destacables en el GE2D. Uno de estos es que el eje de precesión del espín, es decir la dirección del campo espín-órbita, deja de depender del vector de onda, lo que da lugar a la posibilidad de que el espín del electrón mantenga una dirección de polarización en el espacio de momentos que se manifiesta en el espacio de coordenadas como una *Hélice de espín* (en inglés, *Persistent Spin Helix*), fenómeno en el cual el espín de los electrones que atraviesan el sistema sufre una rotación que va como función de la posición del electrón (Bernevig

et al., 2006). Como consecuencia, se tiene que el tiempo de vida del espín se vuelve, en teoría, infinito. Incluso antes, fenómenos observados habían llevado a proponer, por ejemplo, un Transistor de Efecto de campo de Espín (del inglés Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor) resistente a procesos de dispersión independientes de espín (Schliemann et al., 2003).

Otras peculiaridades de este sistema cuando $\alpha = \beta$ son, por ejemplo, la anulación de las contribuciones de los acoplamientos espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus a la conductividad de carga y la conductividad de espín (Maytorena et al., 2006); también existe una eliminación de batimientos de espín en oscilaciones de magnetoresistividad; deja de haber *Zitterbewegung* (del alemán, Bewegung, 'movimiento' y zitter 'tremuloso, tembloroso'), movimiento de vibración muy rápido alrededor de la trayectoria clásica de una partícula como los electrones y otras partículas de espín $1/2$ (Biswas y Ghosh, 2012; Schliemann et al., 2006); desaparición de todo rastro espín-órbita sobre dinámica de plasmones (Badalyan et al., 2009).

La simetría $SU(2)$, sin embargo, no es exclusiva de la dirección de crecimiento cristalográfica $[001]$. El Hamiltoniano del GE2D crecido en otras direcciones de alta simetría, como lo son la dirección $[110]$ y $[111]$, también puede presentar este tipo de simetría. En estas direcciones el parámetro α también debe ajustarse de forma que se posibilite la simetría $SU(2)$ del sistema. En el caso de la dirección $[110]$ el requerimiento es que $\alpha = 0$ mientras que para la dirección $[111]$ es necesario que α se cancele exactamente con $\beta_{[111]}$ ($\alpha + \beta_{[111]} = 0$).

Preguntas que surgen muy naturalmente, y que se hizo un grupo de investigación, son: ¿qué direcciones de crecimiento del GE2D posibilitan el tener una simetría $SU(2)$? y ¿qué relación entre los parámetros espín-órbita debe existir para que se lleve a cabo?. Esto fue parte de una publicación reciente (Kammermeier et al., 2016), donde se encontró que para poder obtener una simetría $SU(2)$ del Hamiltoniano lineal en \mathbf{k} de un GE2D es necesario que el gas sea crecido en una dirección en que al menos dos de los índices de Miller coincidan en módulo. Además, obtuvieron una expresión para la relación necesaria entre los parámetros espín-órbita que permite el estado de la simetría $SU(2)$. También se encontró que incluso tomando en cuenta términos cúbicos de la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus, es posible obtener una simetría $SU(2)$ para las direcciones $[111]$ y $[110]$ en específico.

En otra investigación se estudió el efecto Hall de espín en el GE2D con interacción espín-órbita crecido en la dirección $[001]$ (Shen, 2004), en el cual una corriente de espín perpendicular al campo eléctrico

inductor es generada, ya sea por el acoplamiento de Rashba o de Dresselhaus. Se observó que el valor de la conductividad Hall de espín es independiente de la fuerza de los acoplamientos, sin embargo, su signo está determinado por la relación de los parámetros espín-órbita. Por lo tanto, la dirección de esta corriente puede ser controlada mediante el ajuste del parámetro de Rashba, α , mediante un voltaje de compuerta. Otro resultado, y por el cual esta investigación es mencionada en esta sección, es el de la relación entre la conductividad Hall de espín y la fase de Berry de los electrones en el gas

$$\sigma_{sH} = \frac{e}{8\pi^2} \gamma_{\pm}. \quad (1.3)$$

Esta ecuación muestra una relación entre una propiedad de transporte, como lo es la conductividad Hall de espín, y una cantidad de origen topológico como la fase geométrica. La relación entre estas dos cantidades recuerda al extraordinario caso del efecto Hall cuántico (Klitzing et al., 1980), donde existe una relación entre la conductancia Hall y el número de Chern. En algunos artículos (Jia y Berakdar, 2011; Murakawa et al., 2013) se menciona esta relación y parece sugerirse que tal conexión es natural; sin embargo, en otro estudio en el que se considera un campo Ω sin componente z se encontró que no es algo general (Chen et al., 2014), sino un caso específico. Además, esta investigación también realiza el estudio utilizando la definición de conductividad de espín que toma en cuenta la contribución de torca de espín (del inglés Spin-Torque). El hecho de que se haya considerado $\Omega_z = 0$ deja lugar a una ampliación de dicha investigación donde sí se considere la componente fuera del plano xy .

Mientras que, como se menciona en este capítulo, ya hay estudios del GE2D con dirección de crecimiento general, solamente se han estudiado algunos de los fenómenos de interés que se manifiestan en este sistema. Por lo cual, este trabajo de tesis se encarga, en primera instancia, de obtener una expresión para el Hamiltoniano del gas con dirección de crecimiento arbitraria. Esto para posteriormente estudiar algunas de las funciones respuesta que se presentan al aplicar un campo eléctrico de frecuencia finita al gas. Específicamente se calculan la conductividad de carga y la conductividad Hall de espín. Se busca observar los efectos de la orientación cristalográfica sobre estas funciones observando su espectro y, además, la posibilidad de relacionar nuestros resultados con las condiciones necesarias para obtener una simetría $SU(2)$ mencionadas previamente; esto último encontrando las direcciones de crecimiento cristalino y condiciones bajo las cuales se anulan las conductividades. Por otro lado, en este trabajo también se estudia una posible relación general, no solamente para la dirección de crecimiento $[001]$, entre la conductividad Hall de espín y la fase de Berry tomando en cuenta $\Omega_z \neq 0$.

1.2. Hipótesis

La forma del espectro de las funciones respuesta, conductividad de carga y conductividad de espín, en presencia de un campo eléctrico AC presentará un cambio significativo dependiendo de la dirección de crecimiento cristalográfico del GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Además, ambas funciones respuesta se anularán cuando se presenten las condiciones de simetría $SU(2)$ en el Hamiltoniano. Por otra parte, no existirá una relación entre la fase de Berry y la conductividad Hall de espín para cualquier dirección de crecimiento del GE2D.

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Determinar el efecto de la dirección de crecimiento cristalográfico de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus sobre los espectros de las funciones respuesta, conductividad de carga y conductividad de espín, presentes al aplicar un campo eléctrico AC. Además, determinar las condiciones para las cuales es posible anular ambas conductividades. Asimismo, concretar las direcciones que posibilitan la existencia de una relación entre la conductividad Hall de espín estática y la fase de Berry.

1.3.2. Objetivos específicos

- Calcular las propiedades del estado base de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus con términos lineales y cúbicos.
- Derivar el Hamiltoniano de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal y cúbico para una dirección de crecimiento arbitraria.
- Obtener expresiones generales de las funciones respuesta, conductividad eléctrica y conductividad de espín, para un Hamiltoniano de la forma $\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ perturbado por un campo eléctrico AC, mediante el formalismo de la teoría de respuesta lineal y fórmula de Kubo.
- Obtener expresiones de las funciones respuesta, conductividad eléctrica y conductividad de espín, del GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} para una dirección de crecimiento arbitraria en presencia de un campo eléctrico AC.

- Hacer el cálculo numérico de las funciones respuesta, conductividad eléctrica y conductividad de espín, del GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} para una dirección de crecimiento arbitraria en presencia de un campo eléctrico AC.
- Obtener expresiones de la conductividad Hall de espín estática y de la fase de Berry del GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} para una dirección de crecimiento arbitraria.

Capítulo 2. Hamiltoniano de un sistema cuántico con interacción espín-órbita

Uno de los sistemas cuánticos más simples que puede existir es el de dos niveles energéticos, y el Hamiltoniano que describe un gas electrónico bidimensional (GE2D) con interacción espín órbita puede escribirse como uno de estos. En este capítulo se dan algunos ejemplos de sistemas de dos niveles, entre los cuales se encuentra el gas estudiado en esta tesis. Posteriormente, se muestra el Hamiltoniano del sistema, sus propiedades espectrales y los correspondientes Hamiltonianos de las contribuciones espín-órbita principales, Rashba y Dresselhaus. De la contribución de Dresselhaus se muestran explícitamente los campos espín-órbita de los casos de pozos cuánticos formados en heteroestructuras crecidas en las direcciones cristalográficas [001], [110] y [111]. Esto para dar a entender cómo cambia la forma de los Hamiltonianos dependiendo de la orientación cristalina y en el capítulo siguiente tomar el problema de la dirección arbitraria.

2.1. Hamiltoniano general de dos niveles

El Hamiltoniano que describe un sistema de dos niveles puede expresarse en términos del vector de las matrices de Pauli¹ $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ como

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{k}) \quad (2.1)$$

Algunos fenómenos que describe este Hamiltoniano son, además del GE2D, el de un campo magnético externo actuando sobre una partícula con espín $\frac{1}{2}$, el modelo clásico de Rabi para la interacción de un átomo de dos niveles con un campo electromagnético, gases bidimensionales de huecos con interacción espín-órbita, sistemas de Dirac bidimensionales con $\mathbf{d}(k_x, k_y) = (vk_x, vk_y, m)$ (Shen, 2012; Tkachov, 2015), etc. Para el sistema que nos interesa en este trabajo (GE2D), $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ corresponde a un campo “magnético” efectivo generado por la interacción espín-órbita; sin embargo, se desarrollarán y se obtendrán expresiones generales en las que no se especifica la forma funcional del campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$.

¹ $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$.

2.2. Propiedades espectrales

Considerando un GE2D en $z = 0$, el Hamiltoniano (2.1) puede escribirse de la siguiente manera

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_0(\mathbf{k}) + H_{SO} = \epsilon_0(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}), \quad \epsilon_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}, \quad (2.2)$$

donde $\epsilon_0(\mathbf{k})$ es, en este caso, el término de la energía cinética de los electrones moviéndose libremente en el plano xy del gas, mientras que el segundo término del Hamiltoniano describe la interacción espín-órbita en el GE2D; a $\hbar \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})/2 = (\hbar/2)(\Omega_x \hat{\mathbf{x}} + \Omega_y \hat{\mathbf{y}} + \Omega_z \hat{\mathbf{z}})$ se le conoce usualmente como *campo espín-órbita*; $\mathbf{k} = (k_x, k_y, 0)$ es el vector de onda bidimensional del electrón. Aunque nos referimos al GE2D, está claro que el Hamiltoniano (2.2) puede referirse a muchos otros sistemas descritos por (2.1).

El campo espín-órbita puede escribirse como

$$\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\Omega}_{\parallel}(\mathbf{k}) + \Omega_z(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{z}} = \Omega(\mathbf{k}) \hat{\boldsymbol{\Omega}} \quad (2.3)$$

donde $\boldsymbol{\Omega}_{\parallel}(\mathbf{k}) = \Omega_x(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{x}} + \Omega_y(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{y}}$, $\Omega(\mathbf{k}) = |\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})|$ y

$$\hat{\boldsymbol{\Omega}} = \text{sen } \Theta \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \text{sen } \Theta \text{sen } \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos \Theta \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.4)$$

Para diagonalizar el Hamiltoniano se procede a transformarlo por medio de $U = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}}$ con el vector $\hat{\mathbf{m}}$ dado por

$$\hat{\mathbf{m}} = \text{sen}(\Theta/2) \cos \phi \hat{\mathbf{x}} + \text{sen}(\Theta/2) \text{sen } \phi \hat{\mathbf{y}} + \cos(\Theta/2) \hat{\mathbf{z}}. \quad (2.5)$$

Se puede ver de (2.3) y (2.4) que $\cos \Theta = \Omega_z/\Omega$ y $\text{sen } \Theta = \Omega_{\parallel}/\Omega$, por lo tanto

$$\cos(\Theta/2) = \sqrt{\frac{\Omega + \Omega_z}{2\Omega}} \equiv N_+ \quad (2.6)$$

$$\text{sen}(\Theta/2) = \sqrt{\frac{\Omega - \Omega_z}{2\Omega}} \equiv N_- \quad (2.7)$$

y el operador U puede escribirse como

$$U = \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}} = \begin{pmatrix} N_+ & N_- e^{-i\phi} \\ N_- e^{i\phi} & -N_- \end{pmatrix}. \quad (2.8)$$

Utilizando la identidad $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{a})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{b}) = i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) + (\mathbf{a} \cdot \mathbf{b})\mathbb{I}$ se demuestra que

$$\begin{aligned} H'(\mathbf{k}) &= UHU^\dagger = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}})[\epsilon_0(\mathbf{k})\mathbb{I} + \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k})\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\Omega}}](\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}}) \\ &= \epsilon_0(\mathbf{k})\mathbb{I} + \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\boldsymbol{\Omega}})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{m}}) \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} &= \epsilon_0(\mathbf{k})\mathbb{I} + \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k})\sigma_z \\ H'(\mathbf{k}) &= \begin{pmatrix} \epsilon_0(\mathbf{k}) + \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & \epsilon_0(\mathbf{k}) - \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

por lo tanto, los valores propios de la energía son

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) \equiv \epsilon_0(\mathbf{k}) + \lambda \frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}), \quad \lambda = \pm 1. \quad (2.11)$$

De esta manera, la ecuación de Shrödinger queda como

$$H'(\mathbf{k}) |\psi'_\lambda\rangle = \varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) |\psi'_\lambda\rangle, \quad (2.12)$$

y la obtención de los estados se reduce al problema de eigenvalores de la matriz σ_z :

$$\sigma_z |\psi'_\lambda\rangle = \pm |\psi'_\lambda\rangle \quad (2.13)$$

donde $|\psi'_\lambda\rangle = U |\psi_\lambda\rangle$. A partir de los resultados $|\psi'_+\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $|\psi'_-\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, los estados $|\psi_\lambda\rangle = U^\dagger |\psi'_\lambda\rangle$ son

$$|\psi_+\rangle = U^\dagger \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\Theta/2) \\ \text{sen}(\Theta/2) e^{i\phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_+ \\ N_- e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (2.14)$$

$$|\psi_-\rangle = U^\dagger \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{sen}(\Theta/2) e^{-i\phi} \\ -\cos(\Theta/2) \end{pmatrix} = e^{-i\phi} \begin{pmatrix} N_- \\ -N_+ e^{i\phi} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Podemos escribir entonces

$$|\lambda\mathbf{k}\rangle \equiv |\psi_\lambda\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda N_{-\lambda} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

donde

$$N_\lambda \equiv \sqrt{\frac{\Omega + \lambda\Omega_z}{2\Omega}}, \quad N_\lambda^2 + N_{-\lambda}^2 = 1, \quad \tan \phi = \frac{\Omega_y}{\Omega_x}. \quad (2.17)$$

La diferencia en el signo del segundo término de (2.11) deja ver el rompimiento de la degeneración de

los estados de espín debido al acoplamiento espín-órbita, expresado por la diferencia

$$\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\Omega(\mathbf{k}). \quad (2.18)$$

El resultado de calcular el valor esperado del operador de espín en el estado $|\lambda\rangle$ nos da la orientación del espín, la cual depende del vector de onda \mathbf{k} ; esto es

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda &\equiv \frac{\hbar}{2} \langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle \\ &= \lambda \frac{\hbar \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})}{2 \Omega(\mathbf{k})}. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Este resultado nos indica que $\langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda \parallel \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$, es decir, la orientación del espín se alinea con el *campo espín órbita* $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$, lo que nos permite visualizar $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ como un campo "magnético" efectivo actuando sobre el espín del electrón y causa un desdoblamiento tipo Zeeman sobre los estados en el espacio de momentos.

El hecho de que la magnitud y dirección de $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ varíe con \mathbf{k} significa que es posible encontrar una orientación *local* del espín en el espacio de momentos \mathbf{k} , de modo que al promediar sobre todas estas orientaciones se obtiene

$$\sum_{\mathbf{k}, \lambda} \langle \boldsymbol{\sigma}(\mathbf{k}) \rangle_\lambda = 0, \quad (2.20)$$

lo que nos dice que no existe una polarización neta de espín.

En el estado base, es decir a $T = 0$, las sub-bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ están llenas hasta la misma energía de Fermi. A las curvas de energía constante determinadas por

$$\varepsilon_\lambda(k_F^\lambda(\theta), \theta) = \varepsilon_F \quad (2.21)$$

se les conoce como *contornos de Fermi*. Cada sub-banda de energía, $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, tiene su $k_F^\lambda(\theta)$ característica, $k_F^+(\theta)$ y $k_F^-(\theta)$ respectivamente, que satisface a una de estas curvas, donde θ es el ángulo polar de \mathbf{k} en el plano xy , esto es, $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = k(\cos \theta, \sin \theta)$.

2.3. Acoplamiento espín-órbita de Rashba

A partir de esta sección, en el capítulo se mostrarán los Hamiltonianos de Rashba y Dresselhaus para las direcciones más comúnmente utilizadas, y después, en el Capítulo 3 se considerará el problema de

escribir un Hamiltoniano correspondiente a una dirección arbitraria.

El Hamiltoniano que describe un GE2D con interacción Rashba respecto a los ejes x, y , y z está dado por (Žutić et al., 2004)

$$\begin{aligned}
 H &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + H_R \\
 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) \\
 &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y)
 \end{aligned} \tag{2.22}$$

donde el campo espín-órbita es

$$\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}) = \alpha (\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}). \tag{2.23}$$

Este resultado indica que $\mathbf{k} \perp \boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k})$ y que ambos vectores se encuentran en el plano xy , lo que se puede observar en la Figura 1 donde se ilustra la orientación del espín en el estado $|\lambda \mathbf{k}\rangle$

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\lambda}^R = \lambda (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}) = -\lambda \hat{\boldsymbol{\theta}}. \tag{2.24}$$

Cabe recordar que la contribución espín-órbita tipo Rashba es generada por la asimetría de inversión estructural (SIA, del inglés Structure Inversion Asymmetry) y provee la posibilidad controlar la precesión del espín mediante voltajes externos.

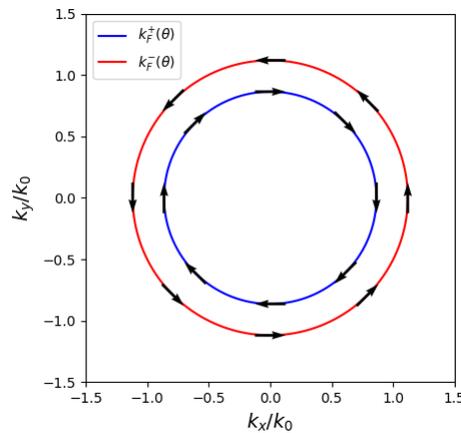


Figura 1: Distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda(\mathbf{k})\rangle$ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba.

2.4. Acoplamiento espín-órbita de Dresselhaus lineal y cúbico

La contribución al Hamiltoniano por parte de la interacción de Dresselhaus con respecto a los ejes $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$ y $z \parallel [001]$ es (Žutić et al., 2004)

$$\begin{aligned} H &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + H_D \\ &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)] \end{aligned} \quad (2.25)$$

con un campo espín-órbita

$$\frac{\hbar}{2} \Omega^D(\mathbf{k}) = \gamma [k_x (k_y^2 - k_z^2), k_y (k_z^2 - k_x^2), k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (2.26)$$

donde γ es un parámetro efectivo de acoplamiento y $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z) = (k_x, k_y, k_z)$. Para pozos cuánticos suficientemente angostos, las componentes del vector de onda normal al plano del gas se promedian. Para el caso particular de la dirección [001] 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 esta manera el Hamiltoniano (2.25) toma la forma

$$H_{[001]} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma [k_y \langle \hat{k}_z^2 \rangle \sigma_y - k_x \langle \hat{k}_z^2 \rangle \sigma_x] + \gamma [k_x k_y^2 \sigma_x - k_y k_x^2 \sigma_y], \quad (2.27)$$

la cual todavía puede reducirse más si se toma en cuenta que para \mathbf{k}_{\parallel} pequeños, el término lineal en \mathbf{k} se vuelve dominante respecto al término cúbico. De forma que la expresión lineal en \mathbf{k} del Hamiltoniano de un GE2D crecido en la dirección [001] con interacción tipo Dresselhaus es

$$H_{[001]} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x), \quad (2.28)$$

donde comúnmente el parámetro espín-órbita de Dresselhaus para esta dirección de crecimiento $\gamma \langle \hat{k}_z^2 \rangle$ se expresa como $\beta_{[001]}$. En la Figura 2 se observa la orientación del espín producida por el acoplamiento Dresselhaus para la dirección de crecimiento [001]

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\lambda}^{D[001]} = \lambda(-\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}}), \quad (2.29)$$

claramente distinta a la del acoplamiento Rashba (Figura 1). A diferencia de la contribución tipo Rashba, la contribución al acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus es intrínseca del material y es producida debido al rompimiento de la simetría de inversión espacial en el bulto (BIA, del inglés Bulk Inversion Asymmetry).

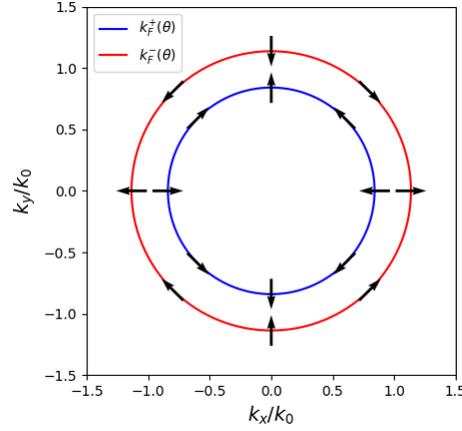


Figura 2: Distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus.

2.5. Campo espín-órbita y orientación cristalina

Cuando se considera un GE2D crecido en una dirección distinta a la $[001]$ ($x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, $z \parallel [001]$) es necesario hacer una transformación de $z \parallel [001]$ a $z' \parallel [hkl]$, donde $[hkl]$ son los índices de Miller que indican la dirección de crecimiento del gas. Ahora, aun cuando el Hamiltoniano de interacción espín-órbita tipo Rashba que se expresó en (2.22) es respecto a los ejes x, y y z , cuando se elige una orientación del gas arbitraria y se rotan los ejes de referencia, el campo espín-órbita mantiene su forma

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}^R(\mathbf{k}') = \alpha(\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{z}}'), \quad \frac{\hbar}{2}\Omega_i^R = \alpha\varepsilon_{ijz'}k'_j \quad (i, j = x, y, z), \quad (2.30)$$

donde la prima en \mathbf{k}' indica que el vector de onda se encuentra en referencia de los nuevos ejes $x'y'z'$. Aquí puede observarse que el campo espín-órbita correspondiente al acoplamiento tipo Rashba nunca sale del plano del gas.

Por otro lado, la expresión (2.25) para la interacción tipo Dresselhaus, al ser transformada mediante la rotación de los ejes de referencia sí presenta un cambio significativo, a diferencia del acoplamiento Rashba, en el campo espín-órbita; de manera que existe un campo $\boldsymbol{\Omega}^D$ distinto para cada dirección de crecimiento cristalográfico. Por ejemplo, para las direcciones más estudiadas, de alta simetría, considerando términos lineales en \mathbf{k}'_{\parallel} , las expresiones del campo son:

- Dresselhaus $[001]$

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}^D(\mathbf{k}') = \beta_{[001]}(k'_y\hat{\mathbf{y}}' - k'_x\hat{\mathbf{x}}'), \quad \beta_{[001]} = \gamma\langle\hat{k}_z^2\rangle \quad (2.31)$$

- Dresselhaus [110]

$$\frac{\hbar}{2}\Omega^D(\mathbf{k}') = \beta_{[110]}k'_x\hat{\mathbf{z}}', \quad \beta_{[110]} = \frac{1}{2}\gamma\langle\hat{k}_z^2\rangle \quad (2.32)$$

- Dresselhaus [111]

$$\frac{\hbar}{2}\Omega^D(\mathbf{k}') = \beta_{[111]}(k'_y\hat{\mathbf{x}}' - k'_x\hat{\mathbf{y}}') = \beta_{[111]}(\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{z}}'), \quad \beta_{[111]} = \frac{2}{\sqrt{3}}\gamma\langle\hat{k}_z^2\rangle. \quad (2.33)$$

Donde para una dirección de crecimiento [001], como se mencionó antes, los ejes x' , y' y z' corresponden a los ejes cristalográficos [100], [010] y [001] respectivamente; para la dirección de crecimiento [110] se tiene que $x' \parallel [\bar{1}10]$, $y' \parallel [001]$ y $z' \parallel [110]$; mientras que para la dirección [111], $x' \parallel [11\bar{2}]$, $y' \parallel [\bar{1}10]$ y $z' \parallel [111]$. En esta sección se muestran explícitamente los campos Ω^D para las direcciones de alta simetría simplemente para evidenciar el cambio que sufre el Hamiltoniano de Dresselhaus al llevar a cabo una rotación de los ejes de referencia. En el siguiente capítulo se determinará la forma que adquiere la expresión para una dirección arbitraria.

Un caso particular es el de la dirección [111], para la cual el campo de Dresselhaus toma la forma del de Rashba, lo que provoca que, cuando existen ambos tipos de interacción espín-órbita, el Hamiltoniano total es formalmente idéntico al (2.22); solamente se necesita el cambio de variable $\alpha \rightarrow \tilde{\alpha} = \alpha + \beta_{[111]}$. Si se consideran sólo términos lineales en \mathbf{k} del campo espín-órbita de Dresselhaus, el Hamiltoniano que considera ambos tipos de interacción puede escribirse como

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_i(\mathbf{k}') = \mu'_{ij}k'_j \quad (i, j = x, y, z) \quad (2.34)$$

donde, para los tres casos específicos ([001]; [110]; [111]) μ'_{ij} es

$$\mu'_{ij} = \begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & \alpha & 0 \\ -\alpha & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mu'_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mu'_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \tilde{\alpha} & 0 \\ -\tilde{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

La magnitud del campo espín-órbita está dada por

$$\frac{\hbar}{2}\Omega(\mathbf{k}') = \sqrt{\mu'_{ij}\mu'_{il}k'_jk'_l} = kg_{[hkl]}(\theta) \quad (2.36)$$

donde $g_{[hkl]}(\theta)$ se obtiene de transformar a coordenadas polares ($\mathbf{k} = (k_x, k_y) = k(\cos\theta, \sin\theta)$) de

manera que, explícitamente

$$\begin{aligned}
g_{[001]}(\theta) &= \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[001]}^2 - 2\alpha\beta_{[001]}\sin 2\theta}, \\
g_{[110]}(\theta) &= \sqrt{\alpha^2 + \beta_{[110]}^2 \cos^2 \theta}, \\
g_{[111]}(\theta) &= \tilde{\alpha}.
\end{aligned} \tag{2.37}$$

De forma general, la función $g_{[hkl]}(\theta)$ está dada por

$$\begin{aligned}
g_{[hkl]}^2(\theta) &= \mu'_{ix}\mu'_{ix} \cos^2 \theta + \mu'_{iy}\mu'_{iy} \sin^2 \theta + 2\mu'_{ix}\mu'_{iy} \sin \theta \cos \theta \\
&= \frac{1}{2}(\mu'_{ix}\mu'_{ix} + \mu'_{iy}\mu'_{iy}) + \frac{1}{2}(\mu'_{ix}\mu'_{ix} - \mu'_{iy}\mu'_{iy}) \cos 2\theta + 2\mu'_{ix}\mu'_{iy} \sin 2\theta \\
&= \frac{1}{2}(|\boldsymbol{\mu}'_x|^2 + |\boldsymbol{\mu}'_y|^2) + \frac{1}{2}(|\boldsymbol{\mu}'_x|^2 - |\boldsymbol{\mu}'_y|^2) \cos 2\theta + 2\boldsymbol{\mu}'_x \cdot \boldsymbol{\mu}'_y \sin 2\theta,
\end{aligned} \tag{2.38}$$

donde los vectores $\boldsymbol{\mu}'_i$ están definidos por la columna j de la matriz μ'_{ij} ($(\boldsymbol{\mu}'_i)_j = \mu'_{ji}$), esto es

$$\boldsymbol{\mu}'_x = \begin{pmatrix} \mu'_{xx} \\ \mu'_{yx} \\ \mu'_{zx} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}'_y = \begin{pmatrix} \mu'_{xy} \\ \mu'_{yy} \\ \mu'_{zy} \end{pmatrix}. \tag{2.39}$$

De esta manera se pueden expresar, en coordenadas polares, las relaciones de dispersión (2.11) como

$$\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \frac{\hbar^2}{2m^*} \{ [k + \lambda k_{so}(\theta)]^2 - k_{so}^2(\theta) \} \tag{2.40}$$

mientras que $k_F^\lambda(\theta)$ es

$$k_F^\lambda(\theta) = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \varepsilon_F + k_{so}^2(\theta) - \lambda k_{so}(\theta)} \tag{2.41}$$

y la energía de Fermi está dada por

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m^*} (2\pi n - 2q_{so}^2) \tag{2.42}$$

donde n es la densidad electrónica,

$$k_{so}(\theta) = \frac{m^* g_{[hkl]}(\theta)}{\hbar^2}, \tag{2.43}$$

y

$$q_{so}^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} k_{so}^2(\theta) d\theta. \tag{2.44}$$

Esto indica que la energía de Fermi ε_F depende esencialmente de la densidad electrónica n , la masa efectiva m^* y los parámetros de interacción espín órbita de Rashba y Dresselhaus. En gases electrónicos

bidimensionales, las concentraciones electrónicas varían, por lo general, de 5×10^{11} a 10^{12} cm^{-2} (Sinitsyn et al., 2004).

Capítulo 3. Hamiltoniano de un GE2D con orientación cristalina arbitraria

Como ya se mencionó, para obtener el Hamiltoniano de un gas electrónico 2D crecido en una dirección distinta a la [001], hace falta hacer una rotación del sistema de referencia. Mediante esta rotación se obtienen tres nuevos ejes cartesianos donde el eje z' es perpendicular al plano del gas y forma un sistema derecho con x' y y' . Si se considera un GE2D cuya orientación cristalina está definida por el vector $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{x}} + n_y \hat{\mathbf{y}} + n_z \hat{\mathbf{z}}$, donde $\hat{\mathbf{x}} \parallel [100]$, $\hat{\mathbf{y}} \parallel [010]$ y $\hat{\mathbf{z}} \parallel [001]$, el campo espín-órbita de Rashba está descrito por

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i^R(\mathbf{k}) = \alpha \varepsilon_{ijl} n_l k_j, \quad (3.1)$$

mientras que la expresión del campo de Dresselhaus con términos cúbicos en \mathbf{k} es (Žutić et al., 2004)

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i^D = \frac{1}{2} \gamma \varepsilon_{ijl} k_j \lambda_{lrs} k_r k_s, \quad (3.2)$$

donde ε_{ijl} es el tensor de Levi-Civita y $\lambda_{ijl} = |\varepsilon_{ijl}|$. Al considerar un pozo cuántico suficientemente angosto y valores de \mathbf{k}_{\parallel} pequeños, se obtiene la forma lineal de este campo espín-órbita²

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i^{D(1)} = \gamma k_n^2 \left(\varepsilon_{ipl} \lambda_{jq} + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} \lambda_{pql} \right) n_p n_q k_j \quad (3.3)$$

donde el factor $k_n^2 = \langle (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle$ es el valor esperado del cuadrado de la componente normal al plano del vector de onda.

Tomando en cuenta Rashba (3.1) y Dresselhaus lineal (3.3), el campo espín-órbita puede escribirse

$$\frac{\hbar}{2} \Omega_i(\mathbf{k}) = \mu_{ij} k_j \quad (3.4)$$

²El promedio cuántico puede hacerse utilizando la fórmula $\langle \hat{k}_i \hat{k}_j \hat{k}_l \rangle = k_n^2 (k_i n_j n_l + k_j n_l n_i + k_l n_i n_j) + k_i k_j k_l$ (Žutić et al., 2004)

donde

$$\begin{aligned}
\mu_{ij} &= \alpha \varepsilon_{ijl} n_l + \gamma k_n^2 \left(\varepsilon_{ipl} \lambda_{jq} + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} \lambda_{pql} \right) n_p n_q \\
&= \alpha \begin{pmatrix} 0 & n_z & -n_y \\ -n_z & 0 & n_x \\ n_y & -n_x & 0 \end{pmatrix} + \gamma k_n^2 \begin{pmatrix} n_y^2 - n_z^2 & 2n_x n_y & -2n_x n_z \\ -2n_y n_x & n_z^2 - n_x^2 & 2n_y n_z \\ 2n_z n_x & -2n_z n_y & n_x^2 - n_y^2 \end{pmatrix} \\
&= \alpha R_{ij} + \gamma k_n^2 D_{ij}
\end{aligned} \tag{3.5}$$

y R_{ij} y D_{ij} están definidos por

$$R_{ij} = \varepsilon_{ijl} n_l \tag{3.6}$$

$$D_{ij} = \left(\varepsilon_{ipl} \lambda_{jq} + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} \lambda_{pql} \right) n_p n_q. \tag{3.7}$$

3.1. Matriz de rotación

La transformación $xyz \rightarrow x'y'z'$ está determinada por la transformación $\mathbf{v}' = \mathbb{M}\mathbf{v}$ donde \mathbb{M} es una matriz ortogonal de rotación. Así pues, lo que se busca es una matriz \mathbb{M} que satisfaga

$$\mathbb{M} \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{M} \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbb{M} \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{3.8}$$

donde $\hat{\mathbf{l}} = l_x \hat{\mathbf{x}} + l_y \hat{\mathbf{y}} + l_z \hat{\mathbf{z}}$ y $\hat{\mathbf{m}} = m_x \hat{\mathbf{x}} + m_y \hat{\mathbf{y}} + m_z \hat{\mathbf{z}}$ son vectores ortonormales en el plano del gas con la dirección de los nuevos ejes de referencia x' y y' respectivamente, de manera que $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{m}}$.

Los elementos de la matriz \mathbb{M} pueden ser expresados en términos de los ángulos de Euler (θ, ϕ, ψ) , de manera que

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} \cos(\psi) \cos(\phi) - \cos(\theta) \sin(\phi) \sin(\psi) & \cos(\psi) \sin(\phi) + \cos(\theta) \cos(\phi) \sin(\psi) & \sin(\psi) \sin(\theta) \\ -\sin(\psi) \cos(\phi) - \cos(\theta) \sin(\phi) \cos(\psi) & -\sin(\psi) \sin(\phi) + \cos(\theta) \cos(\phi) \cos(\psi) & \cos(\psi) \sin(\theta) \\ \sin(\theta) \sin(\phi) & -\sin(\theta) \cos(\phi) & \cos(\theta) \end{pmatrix}. \tag{3.9}$$

Estos ángulos están definidos como tres ángulos sucesivos de rotación. Esta secuencia comienza por

rotar el sistema de ejes original un ángulo ϕ alrededor del eje z , obteniendo así un nuevo sistema de ejes $\xi\eta\zeta$; posteriormente se rota este nuevo sistema de referencia alrededor del eje ξ un ángulo θ para obtener los ejes $\xi'\eta'\zeta'$; por último los ejes $\xi'\eta'\zeta'$ se rotan un ángulo ψ alrededor del eje ζ' consiguiendo el sistema de ejes de referencia deseado $x'y'z'$. La transformación inversa del sistema, $x'y'z' \rightarrow xyz$, está determinada por $\mathbf{v} = \mathbb{M}^T \mathbf{v}'$ puesto que $\mathbb{M}^{-1} = \mathbb{M}^T$, donde T indica la operación traspuesta. Otra característica importante de la matriz es que $\det(\mathbb{M}) = 1$ (Goldstein et al., 1980).

A partir de (3.9) se obtienen expresiones de los ángulos de Euler en función de las componentes de los vectores $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$

$$\begin{aligned} \cos \theta &= n_z, & \text{sen } \theta &= n_{\parallel}, \\ \cos \phi &= -\frac{n_y}{n_{\parallel}}, & \text{sen } \phi &= \frac{n_x}{n_{\parallel}}, \\ \cos \psi &= \frac{m_z}{n_{\parallel}}, & \text{sen } \psi &= \frac{l_z}{n_{\parallel}}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

donde $n_{\parallel} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2} = \sqrt{1 - n_z^2}$. La derivación de estas expresiones puede encontrarse en el Apéndice A. Estos ángulos pueden relacionarse con aquellos del vector $\hat{\mathbf{n}}$ con respecto a los ejes xyz . De manera que si $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{x}} + n_y \hat{\mathbf{y}} + n_z \hat{\mathbf{z}} = \text{sen } \Theta \cos \varphi \hat{\mathbf{x}} + \text{sen } \Theta \text{sen } \varphi \hat{\mathbf{y}} + \cos \Theta \hat{\mathbf{z}}$, entonces $\theta = \Theta$ y $\phi = \varphi + \pi/2$. Sustituyendo en (3.9) y tomando en cuenta la ortogonalidad de la matriz y los vectores se obtiene una nueva expresión de la matriz de rotación

$$M_{ij} = \delta_{ix} l_j + \delta_{iy} m_j + \delta_{iz} n_j \quad (3.11)$$

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} l_x & l_y & l_z \\ m_x & m_y & m_z \\ n_x & n_y & n_z \end{pmatrix}. \quad (3.12)$$

Por lo general, las direcciones cristalógraficas en estado sólido son representadas por medio de índices de Miller. Por tal motivo se ha llevado a cabo la derivación de esta matriz, compuesta de tres vectores, con la cual resulta mucho más sencillo y natural llevar a cabo la rotación del sistema de coordenadas, como se verá en la siguiente sección.

3.2. Transformación del Hamiltoniano

Una vez obtenida la matriz (3.12) lo que se hace es sustituir en el Hamiltoniano espín-órbita $H_{SO} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ las transformaciones

$$\begin{pmatrix} k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix} = \mathbb{M}^T \begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \\ \sigma_z \end{pmatrix} = \mathbb{M}^T \begin{pmatrix} \sigma'_x \\ \sigma'_y \\ \sigma'_z \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

que pueden escribirse como

$$k_i = M_{ji} k'_j = l_i k'_x + m_i k'_y \quad (3.14)$$

$$\sigma_i = M_{ji} \sigma'_j = l_i \sigma'_x + m_i \sigma'_y + n_i \sigma'_z. \quad (3.15)$$

Cabe destacar que la condición $\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$ se vuelve $k_i n_i = M_{ji} k'_j n_i = (M_{ji} n_i) k'_j = \delta_{jz} k'_j = k'_z = 0$.

Para el Hamiltoniano lineal en \mathbf{k} se obtiene

$$H_{SO} = \sigma_i \mu_{ij} k_j = M_{pi} \mu_{ij} M_{qj} \sigma'_p k'_q = \sigma'_p \mu'_{pq} k'_q = \frac{\hbar}{2} \Omega'_p \sigma'_p \quad (3.16)$$

donde el campo espín-órbita es

$$\frac{\hbar}{2} \Omega'_p = \mu'_{pq} k'_q \quad (p, q = x, y, z) \quad (3.17)$$

y

$$\mu'_{pq} = M_{pi} \mu_{ij} M_{qj} = (\mathbb{M} \bar{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{M}^T)_{pq} \quad (3.18)$$

siendo $\bar{\boldsymbol{\mu}}$ la matriz con elementos μ_{ij} . De esta manera se obtiene una expresión general, para una dirección de crecimiento arbitraria, del campo espín-órbita que se reduce a aquellas de las direcciones de alta simetría. Por lo tanto, existe una función $g_{[hkl]}(\theta)$, que adopta la misma forma que la obtenida en el capítulo anterior, para toda dirección de crecimiento del gas.

Desarrollando μ'_{pq} se tiene

$$\begin{aligned}
\mu'_{pq} &= M_{pi}\mu_{ij}M_{qj} \\
&= \alpha M_{pi}R_{ij}M_{qj} + \gamma k_n^2 M_{pi}D_{ij}M_{qj} \\
&= \alpha \varepsilon_{pqz} + \gamma k_n^2 [(l_i D_{ij} l_j \delta_{qx} + l_i D_{ij} m_j \delta_{qy} + l_i D_{ij} n_j \delta_{qz}) \delta_{px} \\
&\quad + (m_i D_{ij} l_j \delta_{qx} + m_i D_{ij} m_j \delta_{qy} + m_i D_{ij} n_j \delta_{qz}) \delta_{py} \\
&\quad + (n_i D_{ij} l_j \delta_{qx} + n_i D_{ij} m_j \delta_{qy} + n_i D_{ij} n_j \delta_{qz}) \delta_{pz}] \\
&= \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_i D_{ij} l_j & \alpha + \gamma k_n^2 l_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 l_i D_{ij} n_j \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 m_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 m_i D_{ij} n_j \\ \gamma k_n^2 n_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 n_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 n_i D_{ij} n_j \end{pmatrix}, \tag{3.19}
\end{aligned}$$

de manera que el Hamiltoniano espín-órbita en el sistema de referencia rotado, donde $k'_z = 0$, queda como

$$\begin{aligned}
H_{SO} &= \alpha(k'_y \sigma'_x - k'_x \sigma'_y) + \gamma k_n^2 [(l_i D_{ij} l_j k'_x + l_i D_{ij} m_j k'_y) \sigma'_x \\
&\quad + (m_i D_{ij} l_j k'_x + m_i D_{ij} m_j k'_y) \sigma'_y \\
&\quad + (n_i D_{ij} l_j k'_x + n_i D_{ij} m_j k'_y) \sigma'_z] \\
&= \begin{pmatrix} \sigma'_x & \sigma'_y & \sigma'_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_i D_{ij} l_j & \alpha + \gamma k_n^2 l_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 l_i D_{ij} n_j \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 m_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 m_i D_{ij} n_j \\ \gamma k_n^2 n_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 n_i D_{ij} m_j & \gamma k_n^2 n_i D_{ij} n_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ 0 \end{pmatrix} \tag{3.20}
\end{aligned}$$

y la matriz μ'_{ij} puede reducirse, removiendo las componentes μ'_{iz} , a

$$\mu'_{iv} = \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_i D_{ij} l_j & \alpha + \gamma k_n^2 l_i D_{ij} m_j & 0 \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 m_i D_{ij} m_j & 0 \\ \gamma k_n^2 n_i D_{ij} l_j & \gamma k_n^2 n_i D_{ij} m_j & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.21}$$

Si se desarrollan los elementos de la matriz μ'_{iv} , esta expresión del Hamiltoniano con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, al ser válida para cualquier dirección de crecimiento, se reduce a aquellas obtenidas para las orientaciones [001], [110] y [111]. Los coeficientes de γk_n^2 se muestran explícitamente en el Apéndice B.

3.3. Hamiltoniano de Dresselhaus con términos cúbicos en \mathbf{k}

Por otro lado, si se desea trabajar con un Hamiltoniano con términos cúbicos, aplicando la transformación (3.14) a la expresión para el campo espín-órbita de Dresselhaus (3.2) se tiene

$$\frac{\hbar}{2}\Omega_i^D = \frac{1}{2}\gamma\varepsilon_{ijm}(M_{pj}k'_p)\lambda_{rsm}(M_{nr}k'_n)(M_{qs}k'_q). \quad (3.22)$$

Utilizando $M_{pj}k'_p = M_{zj}k'_z + M_{\mu j}k'_\mu$ se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2}\Omega_i^D &= \frac{1}{2}\gamma\varepsilon_{ijm}(M_{zj}k'_z + M_{\mu j}k'_\mu)\lambda_{rsm}(M_{zr}k'_z + M_{\nu r}k'_\nu)(M_{zs}k'_z + M_{\rho s}k'_\rho) \\ &= \frac{1}{2}\gamma\varepsilon_{ijm}\lambda_{rsm}\{M_{zj}M_{zr}M_{zs}k_z'^3 + [M_{zj}(M_{zr}M_{\rho s}k'_\rho + M_{zs}M_{\nu r}k'_\nu) + M_{zr}M_{zs}M_{\mu j}k'_\mu]k_z'^2 \\ &\quad + [M_{\mu j}k'_\mu(M_{zr}M_{\rho s}k'_\rho + M_{zs}M_{\nu r}k'_\nu) + M_{zj}M_{\nu r}M_{\rho s}k'_\mu k'_\nu k'_\rho]k_z' + M_{\mu j}M_{\nu r}M_{\rho s}k'_\mu k'_\nu k'_\rho\} \end{aligned} \quad (3.23)$$

donde los índices griegos toman valores de x y y , mientras que los latinos involucran x , y y z . Usando la expresión anterior y $\sigma_i = M_{li}\sigma'_l$, el Hamiltoniano con interacción espín-órbita tipo Dresselhaus para un pozo cuántico suficientemente angosto ($\langle k_z' \rangle = \langle k_z'^3 \rangle = 0$) se puede escribir en la forma

$$H_D = H_D^{(1)} + H_D^{(3)} = \boldsymbol{\sigma}' \cdot \boldsymbol{\gamma}\boldsymbol{\kappa}' \quad (3.24)$$

donde $H_D^{(1)}$ es la parte lineal

$$H_D^{(1)} = \frac{\gamma}{2}\sigma'_l \langle k_z'^2 \rangle M_{li}\varepsilon_{ijm}\lambda_{rsm} [M_{zj}(M_{zr}M_{\rho s}k'_\rho + M_{zs}M_{\nu r}k'_\nu) + M_{zr}M_{zs}M_{\mu j}k'_\mu] \quad (3.25)$$

y $H_D^{(3)}$ la parte cúbica

$$H_D^{(3)} = \frac{\gamma}{2}\sigma'_l M_{li}\varepsilon_{ijm}\lambda_{rsm}M_{\mu j}M_{\nu r}M_{\rho s}k'_\mu k'_\nu k'_\rho. \quad (3.26)$$

Dado que $M_{zi} = n_i$, $H_D^{(1)}$ puede ser escrito como

$$\begin{aligned} H_D^{(1)} &= \sigma'_l \gamma \langle k_z'^2 \rangle M_{li} \left(\frac{1}{2}\varepsilon_{ijm}\lambda_{rsm} + \varepsilon_{irm}\lambda_{jms} \right) n_r n_s M_{\mu j} k'_\mu \\ &= \sigma'_l \gamma \langle k_z'^2 \rangle M_{li} D_{ij} M_{\mu j} k'_\mu \\ &= \sigma'_l \mu_{li}^D k'_\mu \\ &\equiv \gamma \sigma'_l \kappa_l^{(1)}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde D_{ij} es el tensor definido en (3.7). Cabe mencionar que esta expresión es claramente equivalente a la parte Dresselhaus del Hamiltoniano lineal presentado anteriormente y aquella es una recuperación específica de este caso más general en donde se involucran términos cúbicos. El campo $\kappa_l^{(1)}$ está dado por

$$\begin{aligned}\kappa_l^{(1)} &= \langle k_z'^2 \rangle M_{li} D_{ij} M_{\mu j} k'_\mu \\ &= \langle k_z'^2 \rangle [(l_i D_{ij} l_j k'_x + l_i D_{ij} m_j k'_y) \delta_{lx} + (m_i D_{ij} l_j k'_x + m_i D_{ij} m_j k'_y) \delta_{ly} \\ &\quad + (n_i D_{ij} l_j k'_x + n_i D_{ij} m_j k'_y) \delta_{lz}].\end{aligned}\quad (3.28)$$

La parte del Hamiltoniano con términos cúbicos en \mathbf{k} , $H_D^{(3)}$, puede ser escrita como

$$H_D^{(3)} = \gamma \sigma_l' \kappa_l^{(3)} \quad (3.29)$$

donde

$$\begin{aligned}\kappa_l^{(3)} &= \frac{1}{2} M_{li} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} M_{\mu j} M_{\nu r} M_{\rho s} k'_\mu k'_\nu k'_\rho \\ &= \frac{1}{2} (\delta_{lx} l_i + \delta_{ly} m_i + \delta_{lz} n_i) \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} (\delta_{\mu x} l_j + \delta_{\mu y} m_j) (\delta_{\nu x} l_r + \delta_{\nu y} m_r) (\delta_{\rho x} l_s + \delta_{\rho y} m_s) k'_\mu k'_\nu k'_\rho \\ &= \frac{1}{2} (\delta_{lx} l_i + \delta_{ly} m_i + \delta_{lz} n_i) \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} (l_j k'_x + m_j k'_y) (l_r k'_x + m_r k'_y) (l_s k'_x + m_s k'_y) \\ &= \frac{1}{2} (\delta_{lx} l_i + \delta_{ly} m_i + \delta_{lz} n_i) \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} [l_j l_r l_s k_x'^3 + m_j m_r m_s k_y'^3 \\ &\quad + (l_j l_r m_s + l_r l_s m_j + l_s l_j m_r) k_x'^2 k_y' + (l_j m_r m_s + l_r m_s m_j + l_s m_j m_r) k_x' k_y'^2].\end{aligned}\quad (3.30)$$

La forma explícita de los factores en esta última expresión puede encontrarse en el Apéndice B junto con algunas relaciones entre las componentes de los vectores $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$. El vector $\kappa^{(3)}$ queda entonces, tras utilizar dichas relaciones, de la siguiente forma

$$\begin{aligned}\kappa_l^{(3)} &= (\dots) k_x'^3 + (\dots) k_y'^3 + (\dots) k_x'^2 k_y' + (\dots) k_x' k_y'^2 \\ &= [-\delta_{ly} (n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z) + \delta_{lz} (m_x l_y l_z + l_x m_y l_z + l_x l_y m_z)] k_x'^3 \\ &\quad + [\delta_{lx} (n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) - \delta_{lz} (m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z)] k_y'^3 \\ &\quad + \{\delta_{lx} (n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z) + \delta_{ly} l_i D_{ij} l_j \\ &\quad + \delta_{lz} [2(m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) - 3l_x l_y l_z]\} k_x'^2 k_y' \\ &\quad + \{\delta_{lx} (m_i D_{ij} m_j) - \delta_{ly} (n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) \\ &\quad + \delta_{lz} [-2(m_x l_y l_z + l_x m_y l_z + l_x l_y m_z) + 3m_x m_y m_z]\} k_x' k_y'^2\end{aligned}\quad (3.31)$$

o arreglado como

$$\begin{aligned}
\kappa_l'^{(3)} &= \delta_{lx}(\dots) + \delta_{ly}(\dots) + \delta_{lz}(\dots) \\
&= \delta_{lx}[(n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z)k_y'^3 + (n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z)k_x'^2 k_y' \\
&\quad + m_i D_{ij} m_j k_x' k_y'^2] \\
&\quad + \delta_{ly}[-(n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z)k_x'^3 + l_i D_{ij} l_j k_x'^2 k_y' \\
&\quad - (n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z)k_x' k_y'^2] \\
&\quad + \delta_{lz}\{(m_x l_y l_z + l_x m_y l_z + l_x l_y m_z)k_x'^3 - (m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z)k_y'^3 \\
&\quad + [2(m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) - 3l_x l_y l_z]k_x'^2 k_y' \\
&\quad + [-2(m_x l_y l_z + l_x m_y l_z + l_x l_y m_z) + 3m_x m_y m_z]k_x' k_y'^2\}.
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Aunque en este trabajo no se utiliza más este Hamiltoniano con términos cúbicos en \mathbf{k} , es un resultado que puede ser útil en futuras investigaciones.

3.4. Simetría SU(2)

En su investigación, Kammermeier et al. (2016), demostraron que es posible un eje de cuantización fijo solamente para aquellas direcciones de crecimiento cristalográfico donde dos índices de Miller coinciden en módulo; tal eje de cuantización provoca en el Hamiltoniano una simetría SU(2). Efectivamente, considerando

$$\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z) = (\eta, \eta, \sqrt{1 - 2\eta^2}), \tag{3.33}$$

de manera que si se eligen $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$ y $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_z, n_z, -2\eta)$ se obtiene

$$\mu'_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha + \gamma k_n^2 (1 + 3\eta^2) n_z & 0 \\ -\alpha + \gamma k_n^2 (1 - 9\eta^2) n_z & 0 & 0 \\ 0 & -\gamma k_n^2 \sqrt{2} \eta (1 - 3\eta^2) & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.34}$$

con lo cual el Hamiltoniano tiene la forma³

$$H_{SO} = \alpha(k'_y\sigma'_x - k'_x\sigma'_y) + \gamma k_n^2 \{n_z[(1 - 9\eta^2)k'_x\sigma'_y + (1 + 3\eta^2)k'_y\sigma'_x] + \sqrt{2}\eta(3\eta^2 - 1)k'_y\sigma'_z\} \quad (3.35)$$

y el campo espín-órbita es

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}' = [\alpha + \gamma k_n^2(1 + 3\eta^2)n_z]k'_y\hat{\mathbf{x}} + [-\alpha + \gamma k_n^2(1 - 9\eta^2)n_z]k'_x\hat{\mathbf{y}} + [-\gamma k_n^2\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2)]k'_y\hat{\mathbf{z}}. \quad (3.36)$$

En este punto cabe destacar que si la componente $\mu'_{yx} = 0$ el campo espín-órbita se vuelve colineal. La condición para que esto suceda es que

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = (1 - 9\eta^2)\sqrt{1 - 2\eta^2} = (1 - 9\eta^2)n_z, \quad (3.37)$$

con lo que el campo se reduce a

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}' = \gamma k_n^2(3\eta^2 - 1)(-2n_z, 0, \sqrt{2}\eta)k'_y, \quad (3.38)$$

donde la dirección de $\mathbf{\Omega}'$ es independiente del vector de onda \mathbf{k} . Cuando el vector $\hat{\mathbf{n}} = (-\eta, -\eta, n_z)$ la relación $\frac{\alpha}{\gamma k_n^2}$ que vuelve $\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}'$ colineal es la misma (3.37), sin embargo, cuando $\hat{\mathbf{n}} = (\pm\eta, \mp\eta, n_z)$ la relación cambia en signo, de modo que la ecuación para ambos casos es

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = \text{sgn}(n_x n_y)(1 - 9\eta^2)n_z. \quad (3.39)$$

³Si, en cambio, se hace la elección $\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp 1, \pm 1, 0)$, $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mp n_z, \mp n_z, 2\eta)$, la matriz μ'_{ij} es

$$\mu'_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha - \gamma k_n^2(1 - 9\eta^2)n_z & 0 \\ -\alpha - \gamma k_n^2(1 + 3\eta^2)n_z & 0 & 0 \\ -\gamma k_n^2\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2) & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

el Hamiltoniano queda como

$$H_{SO} = \alpha(k'_y\sigma'_x - k'_x\sigma'_y) + \gamma k_n^2 \{\sqrt{1 - 2\eta^2}[(9\eta^2 - 1)k'_y\sigma'_x - (3\eta^2 + 1)k'_x\sigma'_y] + \sqrt{2}\eta(3\eta^2 - 1)k'_x\sigma'_z\}$$

y el campo espín-órbita es

$$\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}' = [\alpha - \gamma k_n^2(1 - 9\eta^2)n_z]k'_y\hat{\mathbf{x}} + [-\alpha - \gamma k_n^2(1 + 3\eta^2)n_z]k'_x\hat{\mathbf{y}} + [-\gamma k_n^2\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2)]k'_x\hat{\mathbf{z}}.$$

Se puede observar que cuando la condición (3.37) se cumple, $\mu'_{xy} = 0$, y el campo espín-órbita mantiene una dirección fija $\hbar\mathbf{\Omega}'/2 = \gamma k_n^2(3\eta^2 - 1)(2n_z, 0, \sqrt{2}\eta)k'_x$.

De forma similar puede hacerse el desarrollo cuando las componentes que coinciden en módulo son n_x y n_z o n_y y n_z . Las relaciones que satisfacen la colinealidad del campo $\frac{\hbar}{2}\mathbf{\Omega}'$ son

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = \text{sgn}(n_x n_z)(1 - 9\eta^2)n_y, \quad \frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = \text{sgn}(n_y n_z)(1 - 9\eta^2)n_x. \quad (3.40)$$

Estas expresiones fueron reportadas por Kammermeier et al. (2016), las cuales, de satisfacerse, posibilitan la existencia de una simetría SU(2) en el Hamiltoniano y dan lugar, por ejemplo, al fenómeno de la simetría Helicoidal de espín en estos gases. Como caso particular, para la dirección de crecimiento [001] se recupera la condición $\alpha = \beta_{[001]}$ de Schliemann et al. (2003).

Capítulo 4. Fórmulas de Kubo para las conductividades de carga y espín

Cuando a un sistema inicialmente en equilibrio se le aplica una perturbación, este responderá de cierta forma dependiendo de la perturbación y del sistema mismo. La teoría de respuesta lineal es una herramienta con la cual uno puede estudiar estos casos, cuando la perturbación aplicada es pequeña, y por lo tanto la respuesta del sistema es directamente proporcional a la perturbación externa, lo que se dice *lineal*.

Entre las muchas aplicaciones de la teoría de respuesta lineal se encuentra el estudio de transporte electrónico. En este campo algunas de las funciones respuesta que son de interés, es decir funciones que determinan la relación entre la respuesta de un sistema y la perturbación externa, son la conductividad, conductancia, función dieléctrica, y susceptibilidades eléctrica y magnética de sistemas bajo la interacción de campos eléctricos o magnéticos.

4.1. Fórmula general de Kubo

La fórmula de Kubo es una ecuación que expresa la respuesta lineal de una cantidad observable debido a una perturbación dependiente del tiempo. Lo logra mediante el formalismo de la matriz densidad, utilizado para expresar un sistema, en lugar de con un solo vector de estado o función de onda, como un ensamble de vectores de estado y sus pesos probabilísticos correspondientes.

Se considera un sistema cuyo Hamiltoniano puede escribirse en la forma

$$H(t) = H_0 + H'(t), \quad (4.1)$$

es decir, en términos de un Hamiltoniano independiente del tiempo H_0 y de una perturbación dependiente del tiempo $H'(t)$. La fórmula general de Kubo (Kubo, 1957) expresa, entonces, la respuesta lineal del sistema a una perturbación $H'(t)$ y presenta propiedades del operador de una variable dinámica como una función de correlación, la cual manifiesta propiedades fuera de equilibrio en términos de los promedios, cuántico y estadístico, sobre los estados en equilibrio.

Al ser posible expresar el Hamiltoniano de la forma (4.1), puede utilizarse la representación de interacción,

en la cual los eigenestados evolucionan de acuerdo al Hamiltoniano sin perturbar H_0 como

$$|n(t)_I\rangle = e^{iH_0t/\hbar} |n(t)\rangle, \quad (4.2)$$

mientras que la evolución temporal de un operador \hat{L} se puede definir de la siguiente manera:

$$\hat{L}(t)_I = e^{iH_0t/\hbar} \hat{L}(t) e^{-iH_0t/\hbar}. \quad (4.3)$$

Este formalismo se aplicará al caso del Hamiltoniano $H = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}$ cuando es perturbado con un Hamiltoniano de interacción específico mostrado en la siguiente sección.

Se puede obtener la ecuación

$$\overline{\langle \hat{L}(t) \rangle} = \overline{\langle \hat{L}(t)_I \rangle_0} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{L}(t)_I, H'(t')_I] \rangle_0 \quad (4.4)$$

donde $t = t_0$ es el tiempo en que se aplica la perturbación y la notación $\langle \dots \rangle_0$ representa un promedio en el equilibrio con respecto al Hamiltoniano H_0 , esto es

$$\langle \dots \rangle_0 \equiv \sum_n w_n \langle n | \dots | n \rangle \quad (4.5)$$

con $|n\rangle$ siendo uno de los eigenvectores de H_0 , o sea, $H_0 |n\rangle = E_n |n\rangle$, y w_n la probabilidad del sistema de estar en el estado n , dada por la distribución de probabilidad que lo rija. La ecuación (4.4), conocida comúnmente como fórmula general de Kubo (Kubo, 1957), expresa la respuesta lineal del sistema a una perturbación $H'(t)$ y presenta propiedades del operador $\langle \hat{L}(t) \rangle$ fuera de equilibrio en términos de promedios sobre los estados en equilibrio.

4.2. Hamiltoniano de interacción

Se considera un sistema electrónico que es perturbado por un campo electromagnético, de tal forma que el Hamiltoniano para un electrón con carga $e < 0$ está dado por

$$H(t) = \frac{1}{2m^*} \left[\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \right]^2 \quad (4.6)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón, c es la velocidad de la luz, \mathbf{p} es el operador de momento y $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ el potencial vectorial tal que $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$. Desarrollando el cuadrado de (4.6) y eliminando el

término cuadrático A^2 , debido a que se considera un campo perturbativo pequeño, se obtiene

$$H(t) = \frac{p^2}{2m^*} - \frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (4.7)$$

Es posible separar este Hamiltoniano, como en (4.1), de manera que exista un término independiente del tiempo $H_0 = p^2/2m^*$ más una perturbación

$$H'(t) = -\frac{e}{m^*c} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (4.8)$$

En equilibrio, el operador de velocidad está dado por $\mathbf{v} = \partial_p H_0 = \mathbf{p}/m^*$ de manera que al sustituir en el operador de corriente de carga $\mathbf{J} = e\mathbf{v}$ se obtiene

$$\mathbf{J} = \frac{e}{m^*} \mathbf{p}, \quad (4.9)$$

y el Hamiltoniano de interacción queda como

$$H'(t) = -\frac{1}{c} \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{A}(\mathbf{r}, t). \quad (4.10)$$

Considere ahora un potencial vectorial y un campo eléctrico de la forma

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (4.11)$$

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} \quad (4.12)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda y ω es la frecuencia, mientras que \mathbf{A}_0 y \mathbf{E}_0 son las amplitudes respectivas; se puede obtener, utilizando la ecuación de Maxwell $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{B}/c$ y la definición del potencial vectorial $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$, la relación $\mathbf{E} = -\partial_t \mathbf{A}/c$. De esta forma, sustituyendo en (4.12) y derivando (4.11) se obtiene

$$\mathbf{A}_0 = \frac{-ic}{\omega} \mathbf{E}_0. \quad (4.13)$$

Si se considera la parte temporal del campo eléctrico, el Hamiltoniano de interacción se vuelve

$$H'(t) = \frac{i}{\omega} \mathbf{J}(t) \cdot \mathbf{E}(t). \quad (4.14)$$

Este Hamiltoniano de interacción contiene entonces, la parte temporal de la dinámica del sistema e indica su perturbación mediante la aplicación de un campo eléctrico.

4.3. Conductividad óptica

Si el GE2D es excitado por un campo eléctrico $E_j(\omega)$, se produce una corriente eléctrica $J_i(\omega) = \sigma_{ij}(\omega)E_j(\omega)$. La contribución del Hamiltoniano espín-órbita a la conductividad de carga es aquella debida a las transiciones entre las sub-bandas de espín ε_λ , y se puede determinar mediante la fórmula de Kubo como

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}(\omega) &= \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_i(t), \hat{J}_j(0)] \rangle_0 \\ &= \frac{e^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [v_i(t), v_j(0)] \rangle_0\end{aligned}\quad (4.15)$$

donde $\tilde{\omega} = \omega + 0^+$, $\hat{J}_i = ev_i$ es el operador de corriente de carga eléctrica y v_i es el operador velocidad. El parámetro 0^+ permite regularizar la integral, pero puede interpretarse como procesos de dispersión del momento del electrón debido a cualquier mecanismo de disipación, como impurezas, por ejemplo (Il'Inskii y Keldysh, 2013). Además, el promedio cuántico y térmico $\langle [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] \rangle_0 = \sum_{\lambda, \mathbf{k}} f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) \langle \lambda \mathbf{k} | [\hat{A}(t), \hat{B}(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle$ está en la representación de interacción, donde $f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) = (1 + e^{(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_F)/k_B T})^{-1}$ es la función de distribución de Fermi. Desglosando la ecuación (4.15) se obtiene

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \sum_\lambda \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} f(\varepsilon_\lambda) \langle \langle \lambda \mathbf{k} | [v_i(t), v_j(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle \rangle \quad (4.16)$$

donde el estado $|\lambda \mathbf{k}\rangle$ es (2.16) y, como es habitual, se hizo el cambio de la suma en \mathbf{k} por una integral de la forma, $\sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2}$. Ahora, los brackets del conmutador de los operadores quedan como

$$\begin{aligned}\langle \lambda \mathbf{k} | [v_i(t), v_j(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle &= \langle \lambda \mathbf{k} | v_i(t) v_j(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle - \langle \lambda \mathbf{k} | v_j(0) v_i(t) | \lambda \mathbf{k} \rangle \\ &= \sum_{\lambda'} [\langle \lambda \mathbf{k} | e^{iH_0 t/\hbar} v_i(0) e^{-iH_0 t/\hbar} | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle \\ &\quad - \langle \lambda \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | e^{iH_0 t/\hbar} v_i(0) e^{-iH_0 t/\hbar} | \lambda \mathbf{k} \rangle] \\ &= \sum_{\lambda'} [e^{i(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}) t/\hbar} \langle \lambda \mathbf{k} | v_i(0) | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle \\ &\quad - e^{i(\varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_\lambda) t/\hbar} \langle \lambda \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | v_i(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle]\end{aligned}\quad (4.17)$$

donde se utilizó $\sum_{\lambda'} |\lambda'\mathbf{k}\rangle \langle \lambda'\mathbf{k}| = 1$. Sustituyendo en (4.16) y haciendo la integral en el tiempo se obtiene

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= \frac{ie^2}{\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda=\pm} f(\varepsilon_\lambda) \sum_{\lambda'=\pm} \left[\frac{\langle \lambda\mathbf{k} | v_i | \lambda'\mathbf{k}\rangle \langle \lambda'\mathbf{k} | v_j | \lambda\mathbf{k}\rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} - \frac{\langle \lambda\mathbf{k} | v_j | \lambda'\mathbf{k}\rangle \langle \lambda'\mathbf{k} | v_i | \lambda\mathbf{k}\rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_{\lambda'} - \varepsilon_\lambda} \right] \\ &= \frac{ie^2}{\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda=\pm} f(\varepsilon_\lambda) \left[\frac{V_{ij}^\lambda}{\hbar\tilde{\omega} + \lambda\hbar\Omega} - \frac{V_{ji}^\lambda}{\hbar\tilde{\omega} - \lambda\hbar\Omega} \right] \end{aligned} \quad (4.18)$$

con

$$V_{ij}^\lambda \equiv \langle \lambda\mathbf{k} | v_i | -\lambda\mathbf{k}\rangle \langle -\lambda\mathbf{k} | v_j | \lambda\mathbf{k}\rangle \quad (4.19)$$

donde se ha usado $\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{-\lambda} = \lambda\hbar\Omega$. La expresión (4.18) se puede reescribir entonces como

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda} f(\varepsilon_\lambda) \frac{1}{(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} [(V_{ij}^\lambda - V_{ji}^\lambda)\tilde{\omega} - \lambda(V_{ij}^\lambda + V_{ji}^\lambda)\Omega]. \quad (4.20)$$

Para calcular V_{ij}^λ primero se calcula el operador de velocidad

$$\begin{aligned} v_i &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_i} \\ &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})}{\partial k_i}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

y sus elementos de matriz $\langle \lambda\mathbf{k} | v_i | \lambda'\mathbf{k}\rangle$,

$$\langle \lambda\mathbf{k} | v_i | \lambda'\mathbf{k}\rangle = \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \cdot \langle \lambda\mathbf{k} | \boldsymbol{\sigma} | \lambda\mathbf{k}\rangle \right) \delta_{\lambda'\lambda} + \frac{1}{2} \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \cdot \langle \lambda\mathbf{k} | \boldsymbol{\sigma} | -\lambda\mathbf{k}\rangle \delta_{\lambda',-\lambda}. \quad (4.22)$$

Utilizando el resultado de la expresión (2.19) del capítulo 2 y obteniendo

$$\langle \lambda\mathbf{k} | \boldsymbol{\sigma} | -\lambda\mathbf{k}\rangle = \frac{-i\lambda}{\Omega_{\parallel}} (\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{z}}) + \frac{1}{\Omega_{\parallel}} (\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{z}}) \times \boldsymbol{\Omega}, \quad (4.23)$$

a partir de⁴

$$\begin{aligned} \langle \lambda\mathbf{k} | \sigma_x | -\lambda\mathbf{k}\rangle &= -\frac{1}{\Omega\Omega_{\parallel}} (\Omega_x\Omega_z + i\lambda\Omega\Omega_y) \\ \langle \lambda\mathbf{k} | \sigma_y | -\lambda\mathbf{k}\rangle &= -\frac{1}{\Omega\Omega_{\parallel}} (\Omega_y\Omega_z - i\lambda\Omega\Omega_x) \\ \langle \lambda\mathbf{k} | \sigma_z | -\lambda\mathbf{k}\rangle &= \frac{\Omega_{\parallel}}{\Omega}, \end{aligned} \quad (4.24)$$

⁴ $\langle \lambda\mathbf{k} | \sigma_i | -\lambda\mathbf{k}\rangle = -\frac{i\lambda}{\Omega_{\parallel}} \varepsilon_{ijz} \Omega_j + \frac{1}{\Omega\Omega_{\parallel}} \varepsilon_{ijk} [\varepsilon_{lzk} \Omega_l] \Omega_k$

(4.22) puede expresarse como

$$\begin{aligned} \langle \lambda \mathbf{k} | v_i | \lambda' \mathbf{k} \rangle &= \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_0}{\partial k_i} + \frac{\lambda}{2\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \delta_{\lambda' \lambda} \\ &+ \left[\frac{i\lambda}{2\Omega_{\parallel}} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \frac{1}{2\Omega_{\parallel} \Omega} (\boldsymbol{\Omega} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \right] \delta_{\lambda', -\lambda}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

mientras que V_{ij}^{λ} requiere la evaluación del producto

$$M_{ij}^{\lambda} \equiv \langle \lambda \mathbf{k} | \sigma_i | -\lambda \mathbf{k} \rangle \langle -\lambda \mathbf{k} | \sigma_j | \lambda \mathbf{k} \rangle. \quad (4.26)$$

Nótese que $M_{ij}^{-\lambda} = (M_{ij}^{\lambda})^* = M_{ji}^{\lambda}$, lo que implica

$$\text{Re } M_{ij}^{-\lambda} = \text{Re } M_{ij}^{\lambda} = \text{Re } M_{ji}^{\lambda} \quad (4.27)$$

$$\text{Im } M_{ij}^{-\lambda} = -\text{Im } M_{ij}^{\lambda} = \text{Im } M_{ji}^{\lambda}. \quad (4.28)$$

Esto sugiere que (4.26) tiene la forma

$$M_{ij}^{\lambda} = m'_{ij} + i\lambda m''_{ij} \quad (4.29)$$

donde la parte real es simétrica, $m'_{ij} = m'_{ji}$, y la parte imaginaria antisimétrica, $m''_{ij} = -m''_{ji}$. Explícitamente:

$$M_{ij}^{\lambda} = \frac{1}{\Omega^2} [\Omega^2 \delta_{ij} - \Omega_i \Omega_j] + i \frac{\lambda}{\Omega} \varepsilon_{ijk} \Omega_k \quad (4.30)$$

de donde $m'_{ij} = \delta_{ij} - \frac{\Omega_i \Omega_j}{\Omega^2}$ y $m''_{ij} = \varepsilon_{ijk} \frac{\Omega_k}{\Omega}$.

Por lo tanto, V_{ij}^{λ} queda como

$$\begin{aligned} V_{ij}^{\lambda} &= \frac{1}{4} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_j} M_{ij}^{\lambda} \\ &= \frac{1}{4} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_j} m'_{pq} + i \frac{\lambda}{4} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_j} m''_{pq}, \end{aligned} \quad (4.31)$$

en donde también pueden definirse partes simétricas y antisimétricas

$$V_{ij}^{\lambda} \equiv S_{ij} + i\lambda T_{ij}, \quad (4.32)$$

$S_{ij} = \frac{1}{4} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_j} m'_{pq}$ siendo la parte simétrica ($S_{ij} = S_{ji}$) y $T_{ij} = \frac{1}{4} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_i} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_j} m''_{pq}$ la antisimétrica ($T_{ij} =$

$-T_{ji}$). De manera que, utilizando (4.30) se tiene

$$\begin{aligned} V_{ij}^\lambda &= \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) - \frac{1}{4\Omega^2} \left(\Omega \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \right) \left(\Omega \cdot \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) + i\lambda \frac{1}{4\Omega} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) \cdot \Omega \\ &= \frac{1}{4\Omega^2} \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) + i\lambda \frac{1}{4\Omega} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) \cdot \Omega. \end{aligned} \quad (4.33)$$

De (4.20) se puede observar que

$$\begin{aligned} V_{ij}^\lambda - V_{ji}^\lambda &= (S_{ij} + i\lambda T_{ij}) - (S_{ji} + i\lambda T_{ji}) \\ &= (S_{ij} - S_{ji}) + i\lambda(T_{ij} - T_{ji}) \\ &= 2i\lambda T_{ij} \\ V_{ij}^\lambda + V_{ji}^\lambda &= 2S_{ij}, \end{aligned} \quad (4.34)$$

con lo que la contribución espín-órbita a la conductividad de carga queda

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= \frac{ie^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_\lambda f(\varepsilon_\lambda) \frac{1}{(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} [(2i\lambda T_{ij})\tilde{\omega} - \lambda(2S_{ij})\Omega] \\ &= -\frac{i\sigma_0}{2\pi\tilde{\omega}} \int d^2k \sum_\lambda \lambda f(\varepsilon_\lambda) \frac{\Omega}{(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} S_{ij} + I_{ij}(\omega) \end{aligned} \quad (4.35)$$

donde $\sigma_0 = e^2/\pi\hbar$, mientras que $I_{ij}(\omega)$ es

$$\begin{aligned} I_{ij}(\omega) &= -\frac{\sigma_0}{2\pi} \int d^2k \sum_\lambda \lambda f(\varepsilon_\lambda) \frac{1}{(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} T_{ij} \\ &= -\frac{\sigma_0}{8\pi} \int d^2k \sum_\lambda \lambda f(\varepsilon_\lambda) \frac{1}{\Omega(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right) \cdot \Omega. \end{aligned} \quad (4.36)$$

El integrando es una función impar del vector de onda \mathbf{k} debido a simetría de inversión temporal ($\Omega(-\mathbf{k}) = -\Omega(\mathbf{k})$) por lo que (4.36) se anula para los campos espín-órbita.

Por lo tanto

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i\sigma_0}{8\pi\tilde{\omega}} \int d^2k [f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)] \frac{1}{\Omega(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right). \quad (4.37)$$

A temperatura 0, $T = 0$, la función de distribución de Fermi se vuelve una función escalón y el tensor se reduce a

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i\sigma_0}{8\pi\tilde{\omega}} \int' d^2k \frac{1}{\Omega(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right). \quad (4.38)$$

La prima en la integral indica que la integración está restringida a la región entre los contornos de Fermi,

$|\mathbf{k}_F^+| < |\mathbf{k}| < |\mathbf{k}_F^-|$, para la cual $\varepsilon_-(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+(\mathbf{k})$.

Separando (4.38) de la siguiente forma

$$\sigma_{ij}(\omega) = -\frac{i\sigma_0}{16\pi\tilde{\omega}} \int' d^2k \frac{1}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right) \left(\frac{1}{\Omega - \tilde{\omega}} + \frac{1}{\Omega + \tilde{\omega}} \right) \quad (4.39)$$

y utilizando la relación

$$\frac{1}{x \pm i0^+} = \mathcal{P} \left(\frac{1}{x} \right) \mp i\pi\delta(x), \quad (4.40)$$

donde \mathcal{P} denota el valor principal y $\delta(x)$ es la función delta de Dirac, se obtiene

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= -\frac{i\sigma_0}{16\pi\tilde{\omega}} \int' d^2k \frac{1}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right) \left(\frac{1}{(\Omega - \omega) - i0^+} + \frac{1}{(\Omega + \omega) + i0^+} \right) \\ &= -\frac{i\sigma_0}{16\pi\tilde{\omega}} \int' d^2k \frac{1}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right) \left(\mathcal{P} \left(\frac{1}{\Omega - \omega} \right) + i\pi\delta(\Omega - \omega) \right) \\ &\quad - \frac{i\sigma_0}{16\pi\tilde{\omega}} \int' d^2k \frac{1}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right) \left(\mathcal{P} \left(\frac{1}{\Omega + \omega} \right) - i\pi\delta(\Omega + \omega) \right). \end{aligned} \quad (4.41)$$

La primera delta de Dirac, $\delta(\Omega - \omega)$, describe los procesos de absorción, mientras que $\delta(\Omega + \omega)$ los de emisión. Como se considera que el sistema esta en el estado base, solamente se consideran efectos de los primeros; de manera que el espectro de absorción óptica está dado por

$$\text{Re } \sigma_{ij}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16\omega} \int' d^2k \frac{1}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right) \delta(\Omega - \omega). \quad (4.42)$$

Mientras que en este trabajo el campo $\boldsymbol{\Omega}$ será sustituido por un campo espín-órbita presente en un GE2D con interacción tipo Rashba y Dresselhaus, la expresión (4.42) es más general que eso; siempre y cuando el Hamiltoniano utilizado tenga la misma forma que el de un sistema de dos niveles $\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ y la integral (4.36) se anule debido a simetría de inversión temporal estas ecuaciones son válidas.

En el capítulo 6 se retomará la expresión para la absorción óptica y se aplicará al caso específico de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} .

4.4. Conductividad de corriente de espín

Una corriente con el espín polarizado en la dirección k y que fluye en la dirección i como respuesta a la componente E_j del campo externo, esta determinada por el *tensor de conductividad de espín* cuya

fórmula de Kubo es

$$\sigma_{ij}^{s,k}(\omega) = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{\mathcal{J}}_i^{s,k}(t), \hat{J}_j(0)] \rangle_0 \quad (4.43)$$

donde $\hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} = \frac{\hbar}{4}(\sigma_k v_i + v_i \sigma_k)$ es el operador de corriente de espín en la dirección i con espín orientado en dirección k , $\hat{J}_i = -ev_i$ ($e > 0$) es el operador de corriente de carga y el operador velocidad v_i está dado por (4.21). El operador de corriente de espín se reescribe por lo tanto como

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} &= \frac{\hbar}{4} \left[\sigma_k \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \sigma_l \cdot \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} \right) + \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \frac{1}{2} \sigma_l \cdot \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} \right) \sigma_k \right] \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \sigma_k + \frac{\hbar}{8} \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} [\sigma_k, \sigma_l]_+ = \frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \sigma_k + \frac{\hbar}{8} \frac{\partial \Omega_l}{\partial k_i} (2\delta_{kl}) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \sigma_k + \frac{\hbar}{4} \frac{\partial \Omega_k}{\partial k_i}. \end{aligned} \quad (4.44)$$

Desglosando los brackets y el conmutador de (4.43) se tiene que

$$\begin{aligned} \langle [\hat{\mathcal{J}}_i^{s,k}(t), \hat{J}_j(0)] \rangle &= -e \langle \lambda \mathbf{k} | [\hat{\mathcal{J}}_i^{s,k}(t), v_j(0)] | \lambda \mathbf{k} \rangle \\ &= -e \sum_{\lambda'} (\langle \lambda \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k}(t) | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda \mathbf{k} \rangle \\ &\quad - \langle \lambda \mathbf{k} | v_j(0) | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k}(t) | \lambda \mathbf{k} \rangle) \\ &= -e \sum_{\lambda'} [e^{i(\epsilon_\lambda - \epsilon_{\lambda'})t/\hbar} (\langle \lambda \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | v_j | \lambda \mathbf{k} \rangle) \\ &\quad - e^{i(\epsilon_{\lambda'} - \epsilon_\lambda)t/\hbar} (\langle \lambda \mathbf{k} | v_j | \lambda' \mathbf{k} \rangle \langle \lambda' \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} | \lambda \mathbf{k} \rangle)], \end{aligned} \quad (4.45)$$

con lo que al hacer la integral en el tiempo se obtiene

$$\sigma_{ij}^{s,k}(\omega) = \frac{-ie}{\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_\lambda f(\epsilon_\lambda) \left[\frac{\langle \lambda \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} | -\lambda \mathbf{k} \rangle \langle -\lambda \mathbf{k} | v_j | \lambda \mathbf{k} \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \epsilon_\lambda - \epsilon_{-\lambda}} - \frac{\langle \lambda \mathbf{k} | v_j | -\lambda \mathbf{k} \rangle \langle -\lambda \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} | \lambda \mathbf{k} \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \epsilon_{-\lambda} - \epsilon_\lambda} \right]. \quad (4.46)$$

Ahora se utiliza (4.22) y

$$\langle \lambda \mathbf{k} | \hat{\mathcal{J}}_i^{s,k} | \lambda' \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial \epsilon_0}{\partial k_i} \langle \lambda \mathbf{k} | \sigma_k | \lambda' \mathbf{k} \rangle \quad (4.47)$$

de manera que el tensor de conductividad de espín toma la forma

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^{s,k}(\omega) &= \frac{-ie}{4\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial \epsilon_0}{\partial k_i} \right) \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \right) \sum_{\lambda} f(\epsilon_{\lambda}) \left[\frac{\langle \lambda | \sigma_k | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_p | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \epsilon_{\lambda} - \epsilon_{-\lambda}} - \frac{\langle \lambda | \sigma_p | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_k | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \epsilon_{-\lambda} - \epsilon_{\lambda}} \right] \\
&= \frac{-ie}{4\hbar\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\hbar^2 k_i}{m} \right) \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \right) \sum_{\lambda} f(\epsilon_{\lambda}) \left[\frac{M_{kp}^{\lambda}}{\tilde{\omega} + \lambda\Omega} - \frac{M_{pk}^{\lambda}}{\tilde{\omega} - \lambda\Omega} \right] \\
&= \frac{-ie\hbar}{4m\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \right) \frac{k_i}{\tilde{\omega}^2 - \Omega^2} \sum_{\lambda} f(\epsilon_{\lambda}) \left[(M_{kp}^{\lambda} - M_{pk}^{\lambda})\tilde{\omega} - \lambda(M_{kp}^{\lambda} + M_{pk}^{\lambda})\Omega \right],
\end{aligned} \tag{4.48}$$

donde se abrevió $|\lambda\mathbf{k}\rangle$ como $|\lambda\rangle$. Usando (4.29) y

$$\begin{aligned}
M_{kp}^{\lambda} - M_{pk}^{\lambda} &= (m'_{kp} + i\lambda m''_{kp}) - (m'_{pk} + i\lambda m''_{pk}) \\
&= (m'_{kp} - m'_{pk}) + i\lambda(m''_{kp} - m''_{pk}) \\
&= 2i\lambda m''_{kp} \\
M_{kp}^{\lambda} + M_{pk}^{\lambda} &= 2m'_{kp},
\end{aligned} \tag{4.49}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^{s,k}(\omega) &= \frac{-ie\hbar}{4m\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \right) \frac{k_i}{\tilde{\omega}^2 - \Omega^2} \sum_{\lambda} f(\epsilon_{\lambda}) [(2i\lambda m''_{kp})\tilde{\omega} - \lambda(2m'_{kp})\Omega] \\
&= \frac{-ie\hbar}{2m\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \left(\frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \right) \frac{k_i}{\tilde{\omega}^2 - \Omega^2} \sum_{\lambda} \lambda f(\epsilon_{\lambda}) [(im''_{kp})\tilde{\omega} - (m'_{kp})\Omega] \\
&= \frac{e\hbar}{2m} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (f(\epsilon_{-}) - f(\epsilon_{+})) \frac{k_i}{\Omega(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} \left(\mathbf{\Omega} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial k_j} \right)_k + I_{ij}^k
\end{aligned} \tag{4.50}$$

donde la integral I_{ij}^k está dada por

$$I_{ij}^k = -i \frac{e\hbar}{2m\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (f(\epsilon_{-}) - f(\epsilon_{+})) \frac{k_i}{\Omega(\tilde{\omega}^2 - \Omega^2)} \left[\left(\mathbf{\Omega} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial k_j} \right) \times \mathbf{\Omega} \right]_k. \tag{4.51}$$

Nuevamente, esta integral se anula debido a simetría de inversión temporal del campo $\mathbf{\Omega}$. Al utilizar (4.40) y considerar solamente absorción ($\omega > 0$) se tiene que

$$\frac{1}{\tilde{\omega}^2 - \Omega^2} = \mathcal{P} \frac{1}{\omega^2 - \Omega^2} - i\pi \frac{1}{2\Omega} \delta(\omega - \Omega) \tag{4.52}$$

y el tensor queda como

$$\sigma_{ij}^{s,k}(\omega) = \text{Re} \sigma_{ij}^{s,k}(\omega) + i \text{Im} \sigma_{ij}^{s,k}(\omega) \tag{4.53}$$

donde

$$\text{Re} \sigma_{ij}^{s,k}(\omega) = \frac{e\hbar}{2m} \mathcal{P} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (f(\epsilon_{-}) - f(\epsilon_{+})) \frac{k_i}{\Omega(\omega^2 - \Omega^2)} \left(\mathbf{\Omega} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial k_j} \right)_k \tag{4.54}$$

$$\text{Im } \sigma_{ij}^{s,k}(\omega) = -\pi \frac{e\hbar}{4m} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} (f(\varepsilon_-) - f(\varepsilon_+)) \frac{k_i}{\Omega^2} \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j} \right)_k \delta(\omega - \Omega). \quad (4.55)$$

Nótese que en la derivación de las fórmulas (4.38), (4.42), (4.54) y (4.55) no se ha supuesto ninguna forma funcional explícita del campo $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$, solamente se ha considerado que el sistema posee simetría ante la operación de inversión temporal de modo que las integrales (4.36) y (4.51) se anulan.

Capítulo 5. Densidad conjunta de estados

Antes de obtener expresiones para los tensores de conductividad óptica y conductividad de espín en un GE2D con dirección de crecimiento arbitraria se considerará la densidad conjunta de estados $D_{+-}(\omega)$. Esta función permite anticipar propiedades espectrales de las funciones respuesta.

5.1. Definición, contornos de Fermi y Curva de resonancia

A temperatura $T = 0$, para las sub-bandas ε_λ , $D_{+-}(\omega)$ está definida por

$$D_{+-}(\omega) = \int' \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\omega). \quad (5.1)$$

Esta función da el número de transiciones verticales que se pueden llevar a cabo entre $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, separadas por una energía $\hbar\omega$. Como en la ecuación (4.38), la prima en la integral indica que la región de integración se restringe a aquellas zonas para las cuales $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$, lo que corresponde a valores de $|\mathbf{k}|$ tales que $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$, $\theta \in [0, 2\pi]$ (Figura 3a).

Por otra parte, la delta de Dirac implica que solo aquellos puntos \mathbf{k} que satisfacen $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ contribuyen a la integral (5.1). Cuando $\frac{\hbar}{2}\Omega'_i = \mu'_{ij}k'_j$, esta condición define una curva plana cuadrática dada por $\mu'_{ij}\mu'_{il}k'_j k'_l = (\hbar\omega/2)^2$, explícitamente

$$|\mu'_x|^2 k_x'^2 + |\mu'_y|^2 k_y'^2 + 2\mu'_x \cdot \mu'_y k'_x k'_y = \left(\frac{\hbar\omega}{2}\right)^2, \quad (5.2)$$

donde los vectores μ'_i están definidos como en (2.39). Tomando los valores de (3.21), esto es

$$\mu'_x = \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_i D_{ij} l_j \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_i D_{ij} l_j \\ \gamma k_n^2 n_i D_{ij} l_j \end{pmatrix}, \quad \mu'_y = \begin{pmatrix} \alpha + \gamma k_n^2 l_i D_{ij} m_j \\ \gamma k_n^2 m_i D_{ij} m_j \\ \gamma k_n^2 n_i D_{ij} m_j \end{pmatrix}. \quad (5.3)$$

Dado que $\mu'_x \cdot \mu'_y - |\mu'_x||\mu'_y| \leq 0$, $C_r(\omega)$ es una elipse rotada por un ángulo θ^* (Thomas y Finney, 1984). Este ángulo es

$$\tan(2\theta^*) = \frac{2\mu'_x \cdot \mu'_y}{|\mu'_x|^2 - |\mu'_y|^2}. \quad (5.4)$$

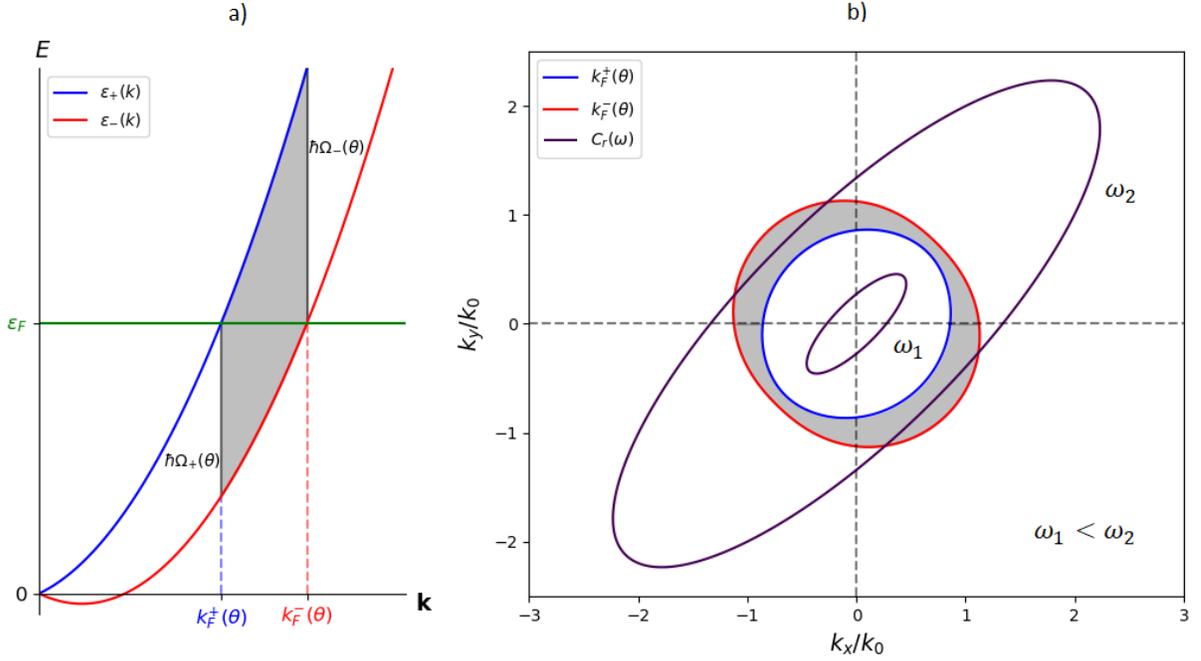


Figura 3: (a) A temperatura $T = 0$, los únicos estados permitidos que intervienen en transiciones entre las subbandas ε_λ , son aquellos con valores de k entre $k_F^+(\theta)$ y $k_F^-(\theta)$ para los cuales se cumple $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$. (b) Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega) = \{(k_x, k_y) \mid \varepsilon_+(k_x, k_y) - \varepsilon_-(k_x, k_y) = \hbar\omega\}$ para ω_1 y ω_2 fijas, con $\omega_1 < \omega_2$, $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ y $n = 5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Solamente el área sombreada contribuye a las transiciones.

Respecto al sistema de coordenadas rotado \tilde{k}_x, \tilde{k}_y , la ecuación de la elipse toma la forma

$$\frac{\tilde{k}_x^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2g_{[hkl]}(\theta_<)}\right)^2} + \frac{\tilde{k}_y^2}{\left(\frac{\hbar\omega}{2g_{[hkl]}(\theta_>)}\right)^2} = 1 \quad (5.5)$$

donde

$$\theta_< = \begin{cases} \theta^* & \text{si } g_{[hkl]}(\theta^*) < g_{[hkl]}(\theta^* + \pi/2) \\ \theta^* + \pi/2 & \text{si } g_{[hkl]}(\theta^*) > g_{[hkl]}(\theta^* + \pi/2), \end{cases} \quad (5.6)$$

$\theta_> = \theta_< + \pi/2$ y $g_{[hkl]}(\theta)$ está definida como en (2.38). Se han elegido $\theta_<$ y $\theta_>$ de manera que \tilde{k}_x y \tilde{k}_y corresponden a las direcciones en que es posible que exista una transición con un mínimo y máximo de energía, respectivamente. Estas direcciones también pueden definirse como las del semieje mayor, para $\theta_<$, y del semieje menor, para $\theta_>$.

En base a lo mencionado anteriormente, la densidad conjunta de estados puede escribirse en coordenadas polares como

$$D_{+-}(\omega) = \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(\hbar\Omega'(\mathbf{k}) - \hbar\omega), \quad (5.7)$$

donde por una parte $\hbar\Omega'(\mathbf{k}) = \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = 2kg_{[hkl]}(\theta)$ y por otra $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$; de manera que $2k_F^+g_{[hkl]}(\theta) \leq \hbar\omega \leq 2k_F^-g_{[hkl]}(\theta)$. Es decir, solamente los arcos de la elipse $\Omega(\mathbf{k}) = \omega$ que caen dentro de la región entre los contornos de Fermi contribuyen a la densidad conjunta de estados (Figura 3b). Se puede definir entonces, para una dirección θ dada en el espacio \mathbf{k} :

$$\hbar\Omega_{\pm}(\theta) \equiv [\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta)]|_{k=k_F^{\pm}(\theta)} = 2k_F^{\pm}(\theta)g_{[hkl]}(\theta). \quad (5.8)$$

Por lo tanto,

$$D_{+-}(\theta) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int d\theta \frac{1}{g_{[hkl]}^2(\theta)} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] \quad (5.9)$$

donde Θ es la función escalón unitaria.

5.2. Frecuencias críticas, espectros y consecuencias de una dirección de crecimiento general

Se puede notar en (5.5) que conforme ω crece, la elipse se hace más grande, por lo que solo en un rango de frecuencias habrá puntos de $C_r(\omega)$ que estén dentro de la región angular. A partir de esto pueden identificarse 4 energías o frecuencias críticas; la más pequeña de ellas ω_+ se da cuando la elipse toca a k_F^+ en la dirección del semieje mayor, mientras que la más grande ω_- es cuando toca a k_F^- en la dirección del semieje menor. Las otras dos frecuencias son $\omega_<$, que corresponde a cuando la elipse toca a k_F^- en la dirección del semieje mayor, y $\omega_>$, cuando la elipse toca a k_F^+ en la dirección del semieje menor. De manera que para una dirección arbitraria, las energías críticas están dadas por

$$\hbar\omega_+ = \hbar\Omega_+(\theta_<) = 2k_F^+(\theta_<)g_{[hkl]}(\theta_<) \quad (5.10)$$

$$\hbar\omega_< = \hbar\Omega_-(\theta_<) = 2k_F^-(\theta_<)g_{[hkl]}(\theta_<) \quad (5.11)$$

$$\hbar\omega_> = \hbar\Omega_+(\theta_>) = 2k_F^+(\theta_>)g_{[hkl]}(\theta_>) \quad (5.12)$$

$$\hbar\omega_- = \hbar\Omega_-(\theta_>) = 2k_F^-(\theta_>)g_{[hkl]}(\theta_>). \quad (5.13)$$

En la Figura 4 se observan los contornos de Fermi y la curva de resonancia $C_r(\omega)$ para la dirección de crecimiento con índices de Miller [123] con $\gamma k_n^2 = 2\alpha$. Estas condiciones provocan un espectro como el de la Figura 5 donde la sección entre las frecuencias $\omega_<$ y $\omega_>$ es cóncava.

Mientras que para el caso de las Figuras 4 y 5 la frecuencia $\omega_<$ es menor a la frecuencia $\omega_>$, esta no

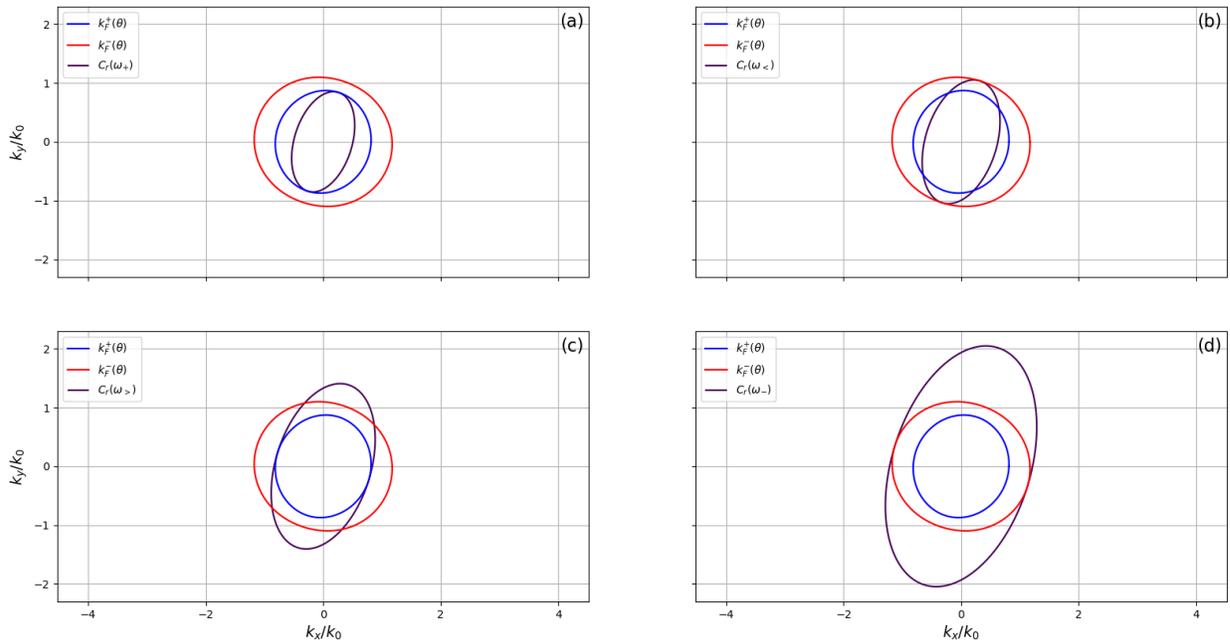


Figura 4: Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_-$, (c) $\hbar\omega_>$ y (d) $\hbar\omega_-$. Los parámetros utilizados son $\alpha = 0.16 \text{ eV\AA}$, $\gamma k_n^2 = 2\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m^* = 0.05m_0$.

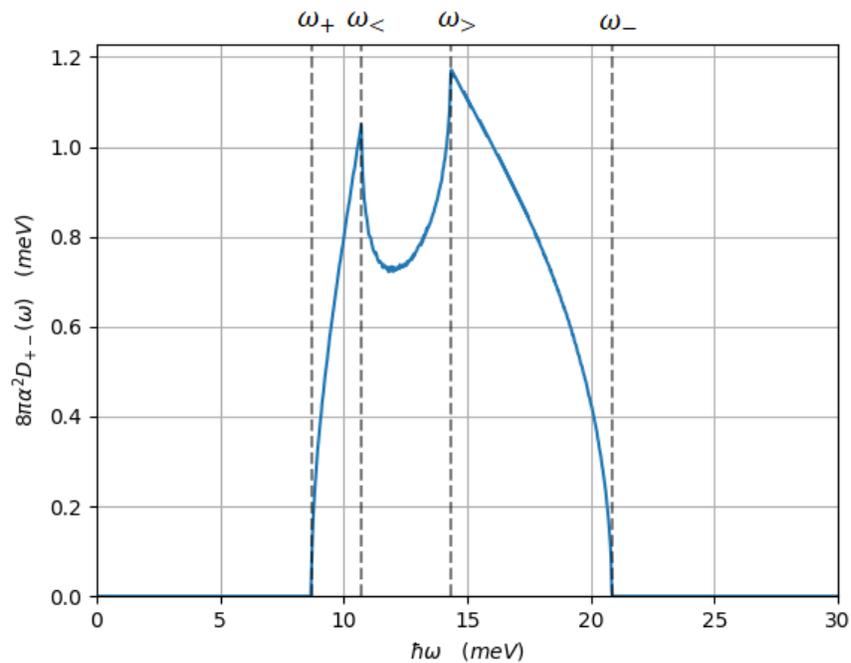


Figura 5: Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 4.

es la única posibilidad. Puede obtenerse el caso contrario, en el cual la frecuencia $\omega_>$ es menor a la frecuencia $\omega_<$; existen dos formas de lograr lo anterior: modificando la relación $\alpha/\gamma k_n^2$ como se ve en la Figura 6, donde ahora $\gamma \langle k_z^2 \rangle = 0.1\alpha$, o modificando la dirección de crecimiento cristalina, sin alterar $\alpha/\gamma k_n^2$, como en la Figura 7 donde la dirección de crecimiento es $[456]$ y los parámetros espín-órbita se mantienen como $\gamma \langle k_z^2 \rangle = 2\alpha$.

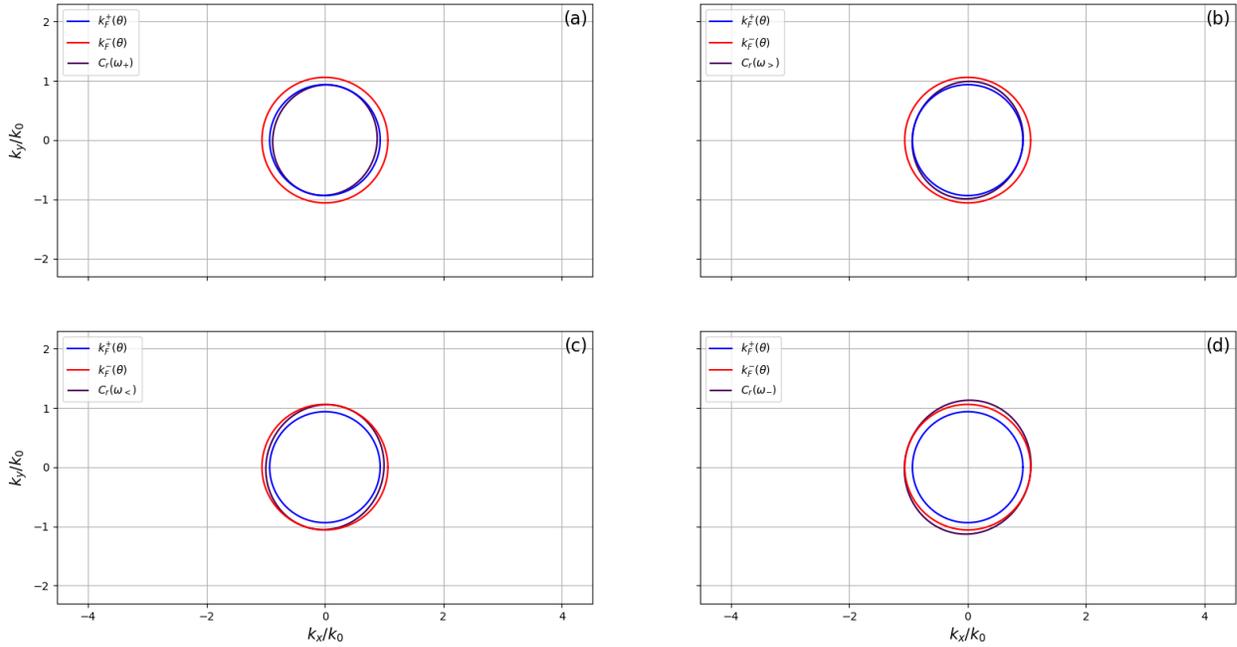


Figura 6: Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[123]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_>$, (c) $\hbar\omega_<$ y (d) $\hbar\omega_-$. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ mientras que α y el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4.

El efecto del cambio en la relación de los parámetros espín-órbita o de la orientación del plano del GE2D se ve reflejado en la forma del espectro de la densidad conjunta de estados. Ahora la sección entre las frecuencias críticas intermedias, $\omega_<$ y $\omega_>$, en lugar de ser cóncava, tiene un crecimiento lineal (Figura 8); este crecimiento constante puede identificarse observando la Figura 6, pues cuando la frecuencia está entre $\omega_<$ y $\omega_>$ la curva $C_r(\omega)$ se encuentra completamente dentro de los dos contornos de Fermi.

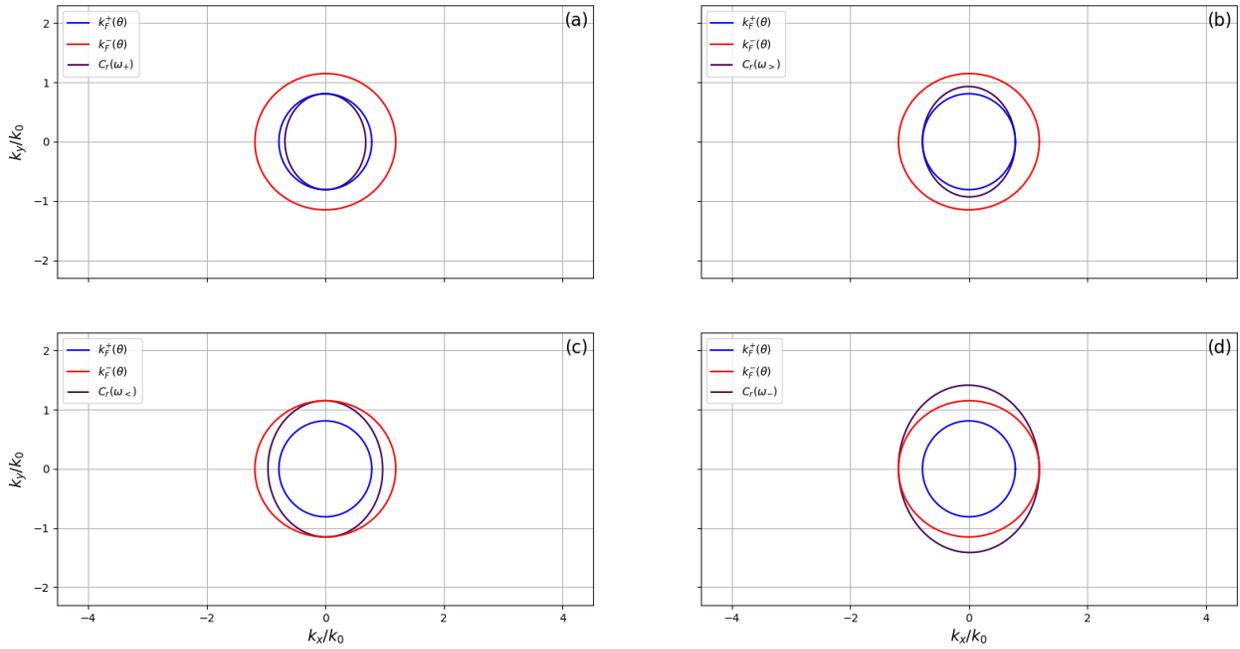


Figura 7: Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por una elipse rotada con semieje mayor $\hbar\omega/2g_{[456]}(\theta_<)$ y semieje menor $\hbar\omega/2g_{[456]}(\theta_>)$. Las energías involucradas en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ son (a) $\hbar\omega_+$, (b) $\hbar\omega_>$, (c) $\hbar\omega_<$ y (d) $\hbar\omega_-$. Los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 4.

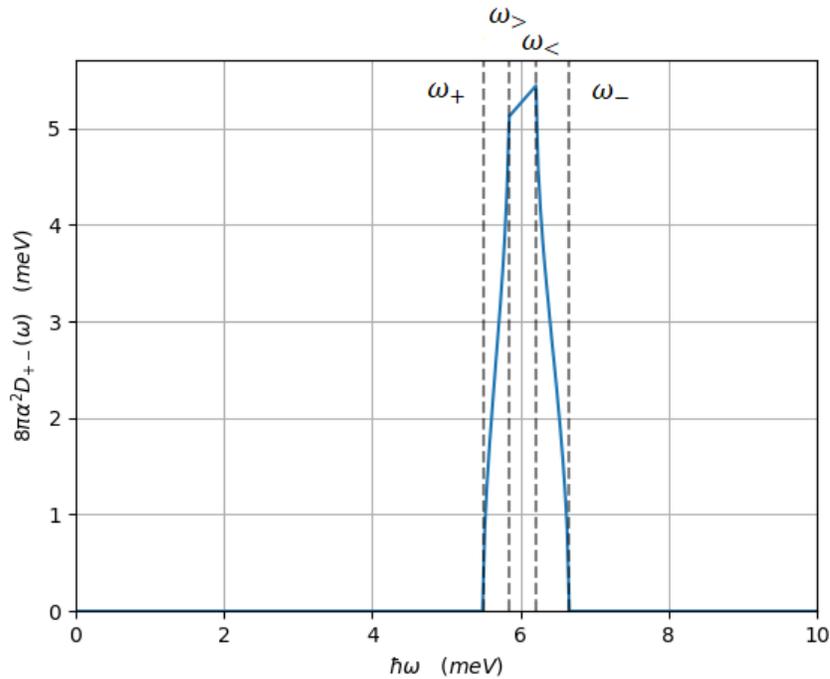


Figura 8: Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Figura 6.

Cuando el espectro tiene una forma $\omega_< < \omega_>$ ninguna frecuencia logra que la curva $C_r(\omega)$ se encuentre completamente dentro de los contornos de Fermi, por lo que no hay ninguna energía para la cual toda la región angular contribuya a la densidad conjunta de estados (Figura 9a). Por otro lado, cuando

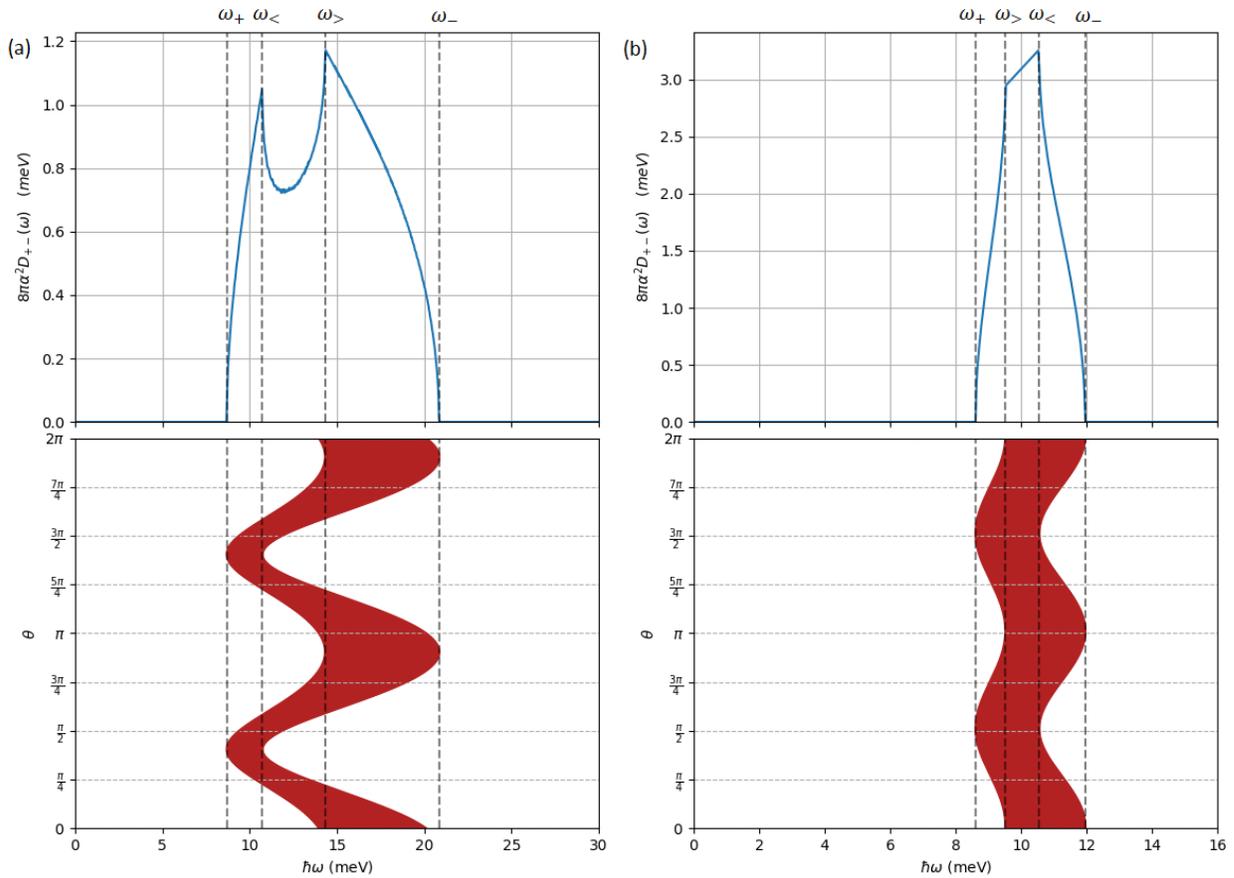


Figura 9: Densidad conjunta de estados y región angular en el espacio \mathbf{k} disponible para las transiciones de ε_- a ε_+ de un GE2D con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. (a) Dirección de crecimiento [123] con $\gamma k_n^2 = 2\alpha$. (b) Dirección de crecimiento [456] con $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$. El resto de los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 4.

$\omega_> < \omega_<$ sí existen frecuencias para las cuales todo ángulo θ contribuye (Figura 9b). Además de las formas resultantes de que $\omega_< < \omega_>$ y $\omega_> < \omega_<$, cabe la posibilidad de obtener una forma diferente del espectro (Figura 10). Esta se da cuando la frecuencia $\omega_< = \omega_>$. Bajo esta situación la elipse toca k_F^- en la dirección de su semieje mayor y a k_F^+ en la dirección de su semieje menor en una misma frecuencia (Figura 11). Existen entonces, dos formas de cambiar el tipo de espectro: cambiando la relación $\alpha/\gamma k_n^2$ o la dirección de crecimiento del GE2D. En la Figura 12 puede observarse el fenómeno donde, por ejemplo, con $\alpha = 0$ las direcciones cercanas a [100], [010] y [001] (ejes n_x , n_y y n_z) tienen frecuencias que satisfacen $\omega_> < \omega_<$ (color naranja), mientras que otras direcciones en el octante presentan $\omega_< < \omega_>$ (color azul). Sin embargo, conforme se incrementa la relación $\alpha/\gamma k_n^2$ las direcciones cercanas a los ejes pasan a satisfacer $\omega_< < \omega_>$ (color azul) hasta que el valor llega a un punto en el cual estas vuelven a la forma $\omega_> < \omega_<$ (color naranja). La interfase de colores muestra las direcciones para las cuales, bajo cierta relación $\alpha/\gamma k_n^2$ existe un espectro con $\omega_< = \omega_>$.

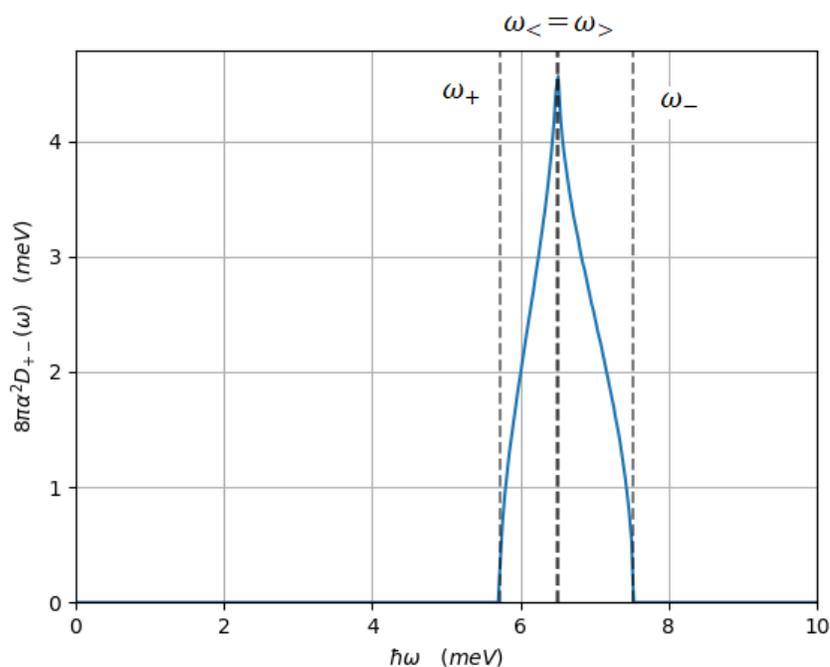


Figura 10: Densidad conjunta de estados de un GE2D, crecido en la dirección cristalina [123], con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ mientras que α y el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4.

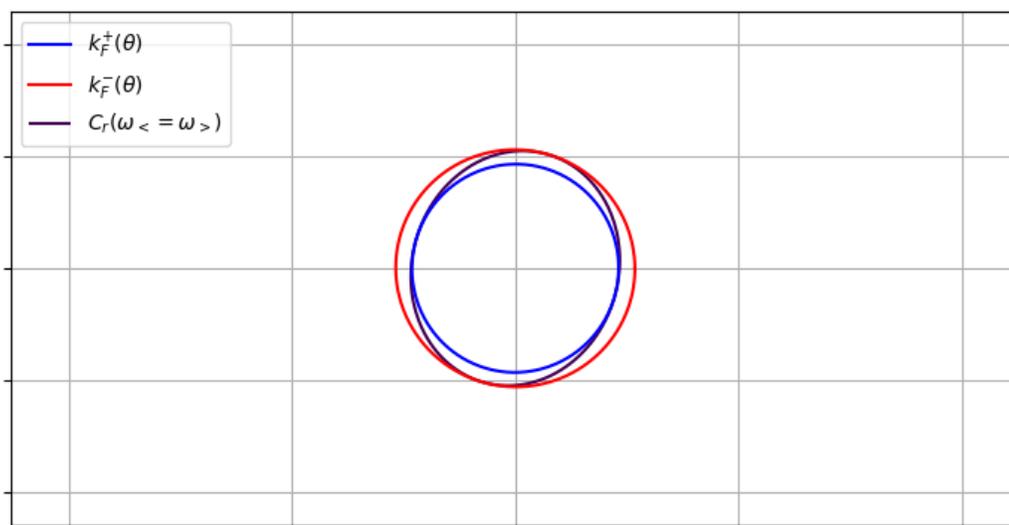


Figura 11: Contornos de Fermi y curva de resonancia $C_r(\omega)$ de la dirección cristalográfica [123]. La energía involucrada en las transiciones entre las sub-bandas ε_λ es $\hbar\omega_< = \hbar\omega_>$. Los parámetros utilizados son los mismos que para la Figura 10.

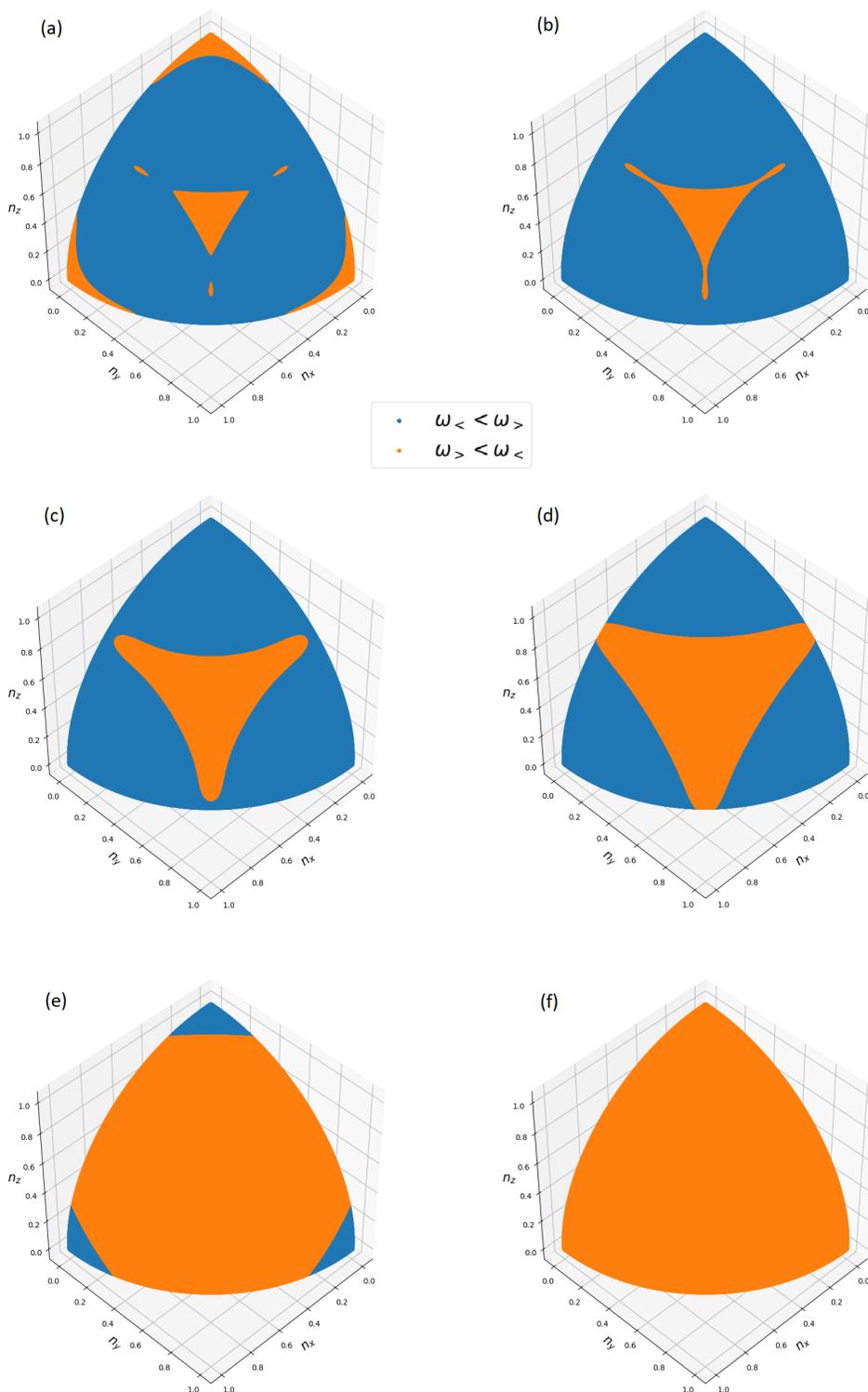


Figura 12: Primer octante de una esfera de direcciones de crecimiento del GE2D. Se muestran las regiones que satisfacen $\omega_{<} < \omega_{>}$ (azul) y $\omega_{>} < \omega_{<}$ (naranja) para las relaciones (a) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0$, (b) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0.1$, (c) $\alpha/\gamma k_n^2 = 0.5$, (d) $\alpha/\gamma k_n^2 = 1$, (e) $\alpha/\gamma k_n^2 = 3$ y (f) $\alpha/\gamma k_n^2 = 4$. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 240 \text{ meV } \text{\AA}$ mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4.

Los cambios en el tipo de espectro para cada dirección manipulando α y γk_n^2 pueden identificarse fácilmente con ayuda de gráficas como la de la Figura 13, donde la intersección entre $\omega_<$ y $\omega_>$ nos indica la igualdad de estas y el valor necesario de $\alpha/\gamma k_n^2$ para lograrlo.

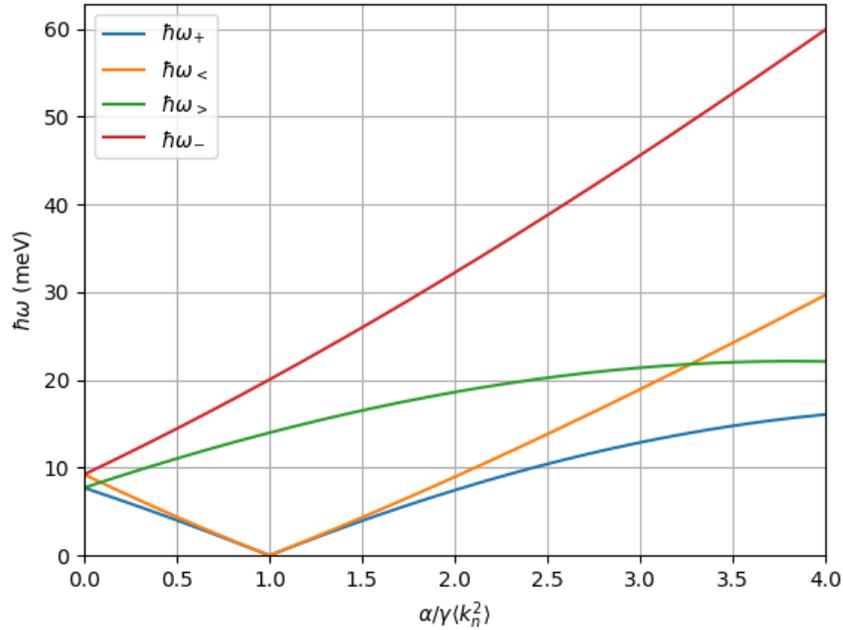


Figura 13: Frecuencias críticas ω_+ , $\omega_<$, $\omega_>$ y ω_- como función de $\alpha/\gamma k_n^2$ para la dirección de crecimiento cristalino [001]. Se utilizó $\gamma k_n^2 = 240$ meV Å mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la Figura 4.

Mientras que el análisis hecho en este capítulo fue únicamente para la densidad conjunta de estados, en el próximo se observará como fenómenos similares ocurren con los espectros de las funciones respuesta de carga y espín.

Capítulo 6. Funciones respuesta

En el presente capítulo se retoman las fórmulas generales obtenidas en las secciones 4.3 y 4.4 y se aplican utilizando un campo Ω específico. Se obtienen expresiones de la absorción óptica y de la conductividad de espín para un GE2D con orientación arbitraria e interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus con términos lineales en \mathbf{k} . Se muestran, también, los diferentes tipos de espectros para la conductividad eléctrica según los casos $\omega_< < \omega_>$, $\omega_> < \omega_<$ y $\omega_< = \omega_>$, vistos en el capítulo anterior. Además, se estudia la posible anulación de las conductividades para las diferentes direcciones de crecimiento cristalino bajo condiciones específicas de los parámetros espín-órbita.

6.1. Absorción óptica

Para el campo espín-órbita lineal en \mathbf{k} de un GE2D, orientado según la normal $\hat{\mathbf{n}}$, con $\hbar\Omega_i/2 = \mu'_{ij}k'_j$, se obtiene⁵

$$\left(\frac{\hbar}{2}\right)^4 \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_i}\right) \cdot \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j}\right) = \frac{1}{2} \Lambda k^2 \{\delta_{ij} [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] - (1 - \delta_{ij}) \sin 2\theta\}, \quad (6.1)$$

y la expresión para la absorción óptica (4.42) se vuelve

$$\text{Re } \sigma_{ij}(\omega) = \frac{\sigma_0}{32} \Lambda \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \{\delta_{ij} [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] - (1 - \delta_{ij}) \sin 2\theta\} \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega] \quad (6.2)$$

donde Θ es la función escalón unitaria y $\hbar\Omega_{\pm}(\theta) = \varepsilon_+(k_F^{\pm}(\theta), \theta) - \varepsilon_-(k_F^{\pm}(\theta), \theta) = 2k_F^{\pm}(\theta)g_{[hkl]}(\theta)$, por lo que se impone la restricción $\Omega_+(\theta) \leq \omega \leq \Omega_-(\theta)$; la función $g_{[hkl]}(\theta)$ está definida en (2.38). Además, el factor Λ está dado por

$$\begin{aligned} \Lambda &= (\mu'_{xx}\mu'_{yy} - \mu'_{xy}\mu'_{yx})^2 + (\mu'_{xx}\mu'_{zy} - \mu'_{zx}\mu'_{xy})^2 + (\mu'_{yx}\mu'_{zy} - \mu'_{yy}\mu'_{zx})^2 \\ &= |\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|^2. \end{aligned} \quad (6.3)$$

donde los vectores $\boldsymbol{\mu}'_i$ toman los valores de (5.3).

Al igual que con la densidad conjunta de estados, la forma del espectro de la conductividad de carga

⁵ $(\hbar/2)^2 \left(\boldsymbol{\Omega} \times \frac{\partial \boldsymbol{\Omega}}{\partial k_j}\right)_i = (k_x \delta_{jy} - k_y \delta_{jx})(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_i = (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_i \varepsilon_{jzlk_l}$

cambia dependiendo de las frecuencias críticas $\omega_<$ y $\omega_>$, ecuaciones (5.11) y (5.12) respectivamente. En la Figura 14 se pueden observar las tres formas del espectro para la componente σ_{xx} .

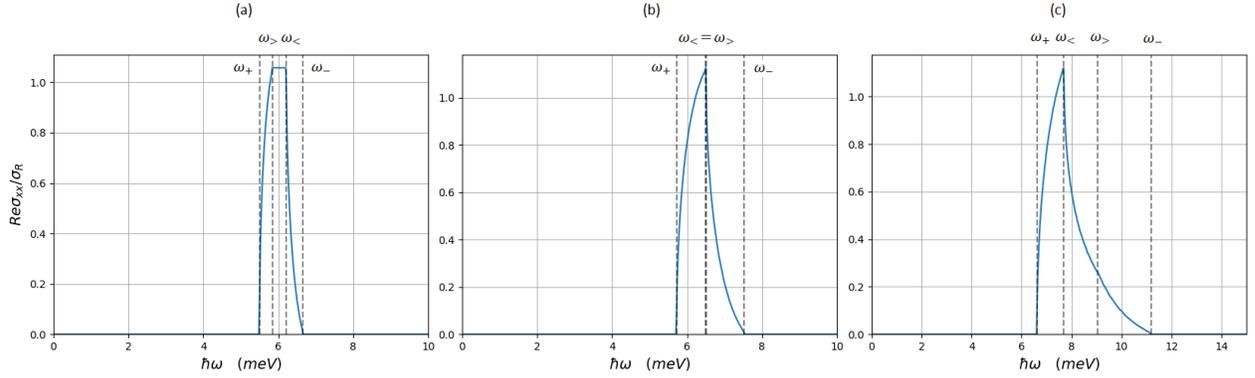


Figura 14: Contribución espín-órbita a la conductividad de carga $\text{Re} \sigma_{xx}(\omega)$ para la dirección de crecimiento cristalino [123]. Los parámetros utilizados son (a) $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ ($\omega_> < \omega_<$), (b) $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ ($\omega_< = \omega_>$) y (c) $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$ ($\omega_< < \omega_>$), mientras que el resto son los mismos que en la Figura 4

Cuando se toman en consideración las orientaciones de crecimiento del GE2D que pueden satisfacer una simetría $SU(2)$, es decir, el caso particular de $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$, con $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$ y $\hat{\mathbf{I}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_z, n_z, -2\eta)$, los vectores μ'_ν están dados, como se puede ver en (3.34), por

$$\mu'_x = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha + \gamma k_n^2(1 - 9\eta^2)n_z \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mu'_y = \begin{pmatrix} \alpha + \gamma k_n^2(1 + 3\eta^2)n_z \\ 0 \\ -\gamma k_n^2\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2) \end{pmatrix} \quad (6.4)$$

y el factor Λ es

$$\begin{aligned} \Lambda &= \mu_{yx}'^2 (\mu_{xy}'^2 + \mu_{zy}'^2) \\ &= (-\alpha + \gamma k_n^2(1 - 9\eta^2)n_z)^2 \{ [\alpha + \gamma k_n^2(1 + 3\eta^2)n_z]^2 + [-\gamma k_n^2\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2)]^2 \}. \end{aligned} \quad (6.5)$$

En (6.5) se puede ver que $\Lambda = 0$ cuando $\mu'_{yx} = 0$, lo que sucede al satisfacerse la relación (3.37); por lo tanto, bajo estas condiciones, la conductividad eléctrica se anula también. Esta anulación del factor Λ se debe a la colinealidad del campo $\mathbf{\Omega}$ y como se vio anteriormente, esta no es la única manera de obtener un campo colineal. La condición general es que la dirección de crecimiento tenga al menos dos índices de Miller que coincidan en módulo y se satisfaga la relación $\alpha/\gamma k_n^2$ correspondiente a cada caso. Las expresiones para estas relaciones están dadas por (3.39) y (3.40). Esta condición de colinealidad fue obtenida por Kammermeier et al. (2016) al buscar las condiciones necesarias para tener una simetría

SU(2) en un GE2D. Como casos particulares de Λ se tienen

$$\begin{aligned}\Lambda_{[001]} &= (\mu'_{xy}\mu'_{yx})^2 = (\alpha^2 - \beta_{[001]}^2)^2 \\ \Lambda_{[110]} &= \mu_{yx}'^2(\mu_{xy}'^2 + \mu_{zy}'^2) = \alpha^2(\alpha^2 + \beta_{[110]}^2) \\ \Lambda_{[111]} &= (\mu_{xy}'^2\mu_{yx}'^2)^2 = (\alpha + \beta_{[111]})^4.\end{aligned}\quad (6.6)$$

La Figura 15 muestra en color el valor de $\sqrt{\Lambda}$ en una cuadrícula de direcciones cristalográficas $[hkl]$ donde $l = 10$. Las relaciones entre los parámetros espín-órbita para la Figura 15a son las de (3.39); la función $\text{sgn}(n_x n_y)$ es positiva para los cuadrantes 1 y 3, mientras que es negativa para los cuadrantes 2 y 4 del diagrama. Esta elección muestra la anulación del factor Λ para las direcciones con índices de Miller $|h| = |k|$. De manera semejante las Figuras 15b y 15c utilizan las relaciones (3.40) y muestran el valor nulo de Λ para $|h| = |l|$ y $|k| = |l|$ respectivamente.

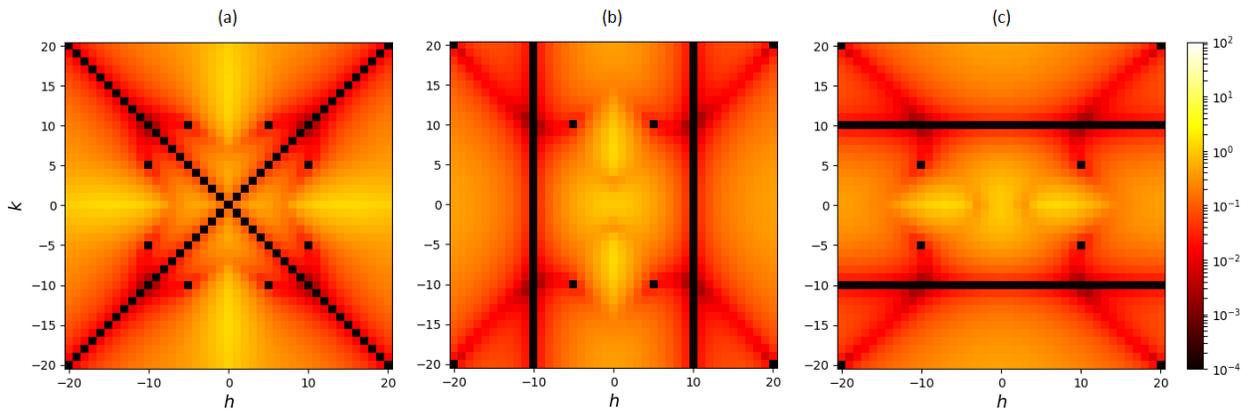


Figura 15: Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{\Lambda}$. Los parámetros utilizados son (a) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 1er y 3er cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 2do y 4to cuadrante; (b) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_z^2)/2)n_y$ para el 1er y 4to cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_z^2)/2)n_y$; (c) $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_y^2 + n_z^2)/2)n_x$ para el 1er y 4to cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_y^2 + n_z^2)/2)n_x$.

Los puntos negros de la cuadrícula, que se ven “aislados” en las tres Figuras, se deben a un valor de la relación de los parámetros espín-órbita que coincide en las expresiones (3.39) y (3.40). Este se presenta cuando el valor de la magnitud del índice de Miller desigual en módulo es la mitad del de los otros dos. En la Figura 16, utilizando la relación adecuada para cada caso, se observan todas las direcciones en que se anula Λ utilizando una sola cuadrícula.

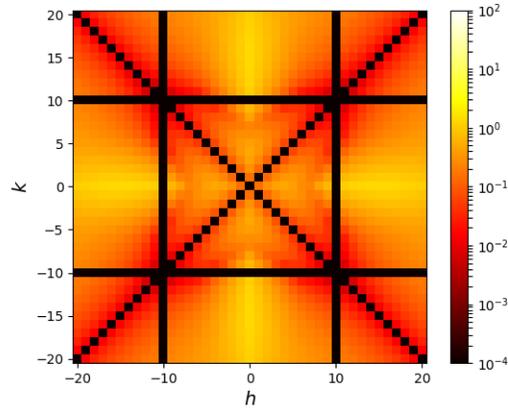


Figura 16: Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{\Lambda}$. Los parámetros utilizados son $\alpha/\gamma k_n^2 = (1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 1er y 3er cuadrante y $\alpha/\gamma k_n^2 = -(1 - 9(n_x^2 + n_y^2)/2)n_z$ para el 2do y 4to cuadrante con excepción de las direcciones específicas en que $|h| = |l|$ o $|k| = |l|$ donde se utilizan las relaciones de la Figuras 15b y 15c respectivamente.

La Figura 17 es una esfera de direcciones cristalinas donde cada punto sobre la esfera representa un vector \hat{n} diferente. Por escala de colores se muestra el valor de $\sqrt{\Lambda}$ con una relación $\alpha/\gamma k_n^2$ específica para cada dirección, de manera que, para las direcciones con al menos dos índices de Miller que coinciden en módulo esta relación coincide con aquella que anula el factor Λ .

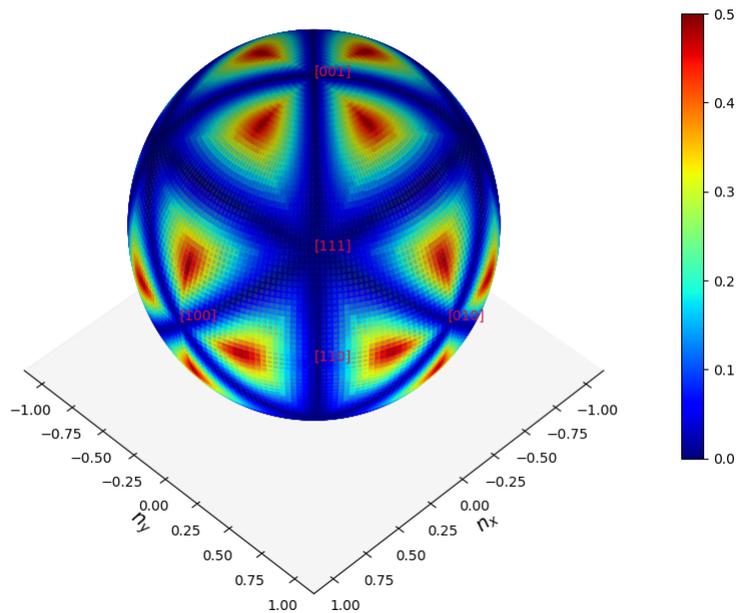


Figura 17: Esfera de direcciones de crecimiento del GE2D y el valor, en colores, de $\sqrt{\Lambda}$ para cada una de ellas; se utiliza una relación $\alpha/\gamma k_n^2$ dependiente de la posición, de forma que, cuando al menos dos índices de Miller coinciden en módulo, esta satisface las condiciones que anulan el factor Λ .

6.2. Conductividad de espín

De observar las ecuaciones del tensor de conductividad de espín (4.54) y (4.55) se puede notar que es de utilidad calcular lo siguiente: para el campo Ω lineal en \mathbf{k} de un GE2D con dirección general ($\hbar\Omega_i/2 = \mu'_{ij}k'_j$), se tiene que

$$\begin{aligned} \frac{k_i}{\Omega} \left(\Omega \times \frac{\partial \Omega}{\partial k_j} \right)_p &= \frac{2}{\hbar} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p \frac{k_i}{g_{[hkl]}(\theta)} (\delta_{jy} \cos \theta - \delta_{jx} \sin \theta) \\ &= \frac{2}{\hbar} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p \frac{k}{g_{[hkl]}(\theta)} [\varepsilon_{ijz} + \delta_{ij}(\delta_{iy} - \delta_{ix}) \sin 2\theta + (1 - \delta_{ij}) \cos 2\theta]. \end{aligned} \quad (6.7)$$

A temperatura $T = 0$ y utilizando el resultado

$$\mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{\omega^2 - \Omega^2} = -\frac{\hbar^2}{4g_{[hkl]}^3(\theta)} \left\{ \frac{2m^*g_{[hkl]}^2(\theta)}{\hbar^2} + \frac{\hbar\omega}{4} \ln \left| \frac{[\omega + \Omega_+(\theta)][\omega - \Omega_-(\theta)]}{[\omega - \Omega_+(\theta)][\omega + \Omega_-(\theta)]} \right| \right\}, \quad (6.8)$$

la parte real de la conductividad de espín (4.54) para este sistema queda como

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{s,p}(\omega) &= \sigma_{ij}^{s,p}(0) - \frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p \frac{\hbar\omega}{8m^*/\hbar^2} \\ &\quad \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{[\varepsilon_{ijz} + \delta_{ij}(\delta_{iy} - \delta_{ix}) \sin 2\theta + (1 - \delta_{ij}) \cos 2\theta]}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \ln \left| \frac{[\omega + \Omega_+(\theta)][\omega - \Omega_-(\theta)]}{[\omega - \Omega_+(\theta)][\omega + \Omega_-(\theta)]} \right| \end{aligned} \quad (6.9)$$

donde el valor estático es

$$\sigma_{ij}^{s,p}(0) = -\frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{[\varepsilon_{ijz} + \delta_{ij}(\delta_{iy} - \delta_{ix}) \sin 2\theta + (1 - \delta_{ij}) \cos 2\theta]}{g_{[hkl]}^2(\theta)}. \quad (6.10)$$

En cuanto a la parte imaginaria, esta es

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{ij}^{s,p}(\omega) &= -\frac{e}{32} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p \frac{\hbar\omega}{m^*/\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{[\varepsilon_{ijz} + \delta_{ij}(\delta_{iy} - \delta_{ix}) \sin 2\theta + (1 - \delta_{ij}) \cos 2\theta]}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \\ &\quad \Theta[\hbar\omega - \hbar\Omega_+(\theta)] \Theta[\hbar\Omega_-(\theta) - \hbar\omega]. \end{aligned} \quad (6.11)$$

A diferencia del caso de la absorción óptica, donde el factor que sale de la integral es $\Lambda = |\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|^2$, en este, el factor es $(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p$. Este factor depende entonces, de la dirección en que se orienta el espín,

denotada por el subíndice p ; de esta manera queda

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_x = \mu'_{yx}\mu'_{zy} - \mu'_{zx}\mu'_{yy} \quad (6.12)$$

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_y = \mu'_{zx}\mu'_{xy} - \mu'_{xx}\mu'_{zy} \quad (6.13)$$

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z = \mu'_{xx}\mu'_{yy} - \mu'_{xy}\mu'_{yx}. \quad (6.14)$$

Como con la densidad conjunta de estados y la conductividad de carga, la forma del espectro de la conductividad de espín cambia dependiendo de las frecuencias críticas $\omega_<$ y $\omega_>$, vistas en las ecuaciones (5.11) y (5.12) respectivamente. En la Figura 18 se pueden observar las tres formas del espectro para la parte imaginaria de la componente $\sigma_{xx}^{s,z}$.

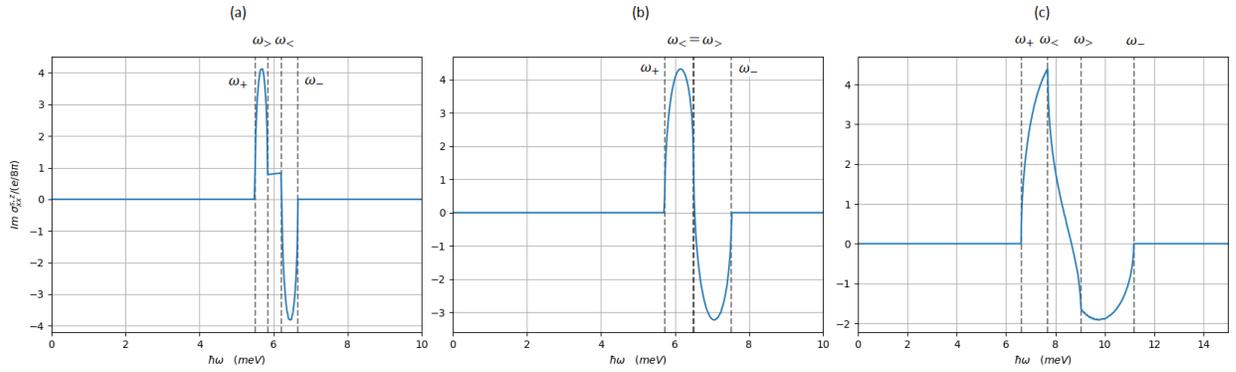


Figura 18: Tensor de conductividad de espín $\text{Im} \sigma_{xx}^{s,z}(\omega)$ para la dirección de crecimiento cristalino [123]. Los parámetros utilizados son (a) $\gamma k_n^2 = 0.1\alpha$ ($\omega_> < \omega_<$), (b) $\gamma k_n^2 = 0.23\alpha$ ($\omega_< = \omega_>$) y (c) $\gamma k_n^2 = 0.75\alpha$ ($\omega_< < \omega_>$), mientras que el resto son los mismos que en la Figura 4

Si se considera la orientación especial $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$, con $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$ y $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_z, n_z, -2\eta)$, para la cual es posible obtener una simetría $\text{SU}(2)$, los vectores $\boldsymbol{\mu}'_x$ y $\boldsymbol{\mu}'_y$ quedan como en (6.4) y los factores $(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_p$ son

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_x = \mu'_{yx}\mu'_{zy} \quad (6.15)$$

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_y = 0 \quad (6.16)$$

$$(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z = -\mu'_{xy}\mu'_{yx}. \quad (6.17)$$

De analizar estas tres ecuaciones es posible determinar las condiciones de anulación necesarias para la conductividad de espín, ya sea para un espín orientado en la dirección $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ o $\hat{\mathbf{n}}$.

Comenzando por una orientación de espín en $\hat{\mathbf{l}}$, se puede observar que $(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_x = 0$ cuando ya sea

$\mu'_{yx} = 0$ o $\mu'_{zy} = 0$. Como se mencionó en la sección anterior para el caso de la absorción óptica, μ'_{yx} es cero cuando se cumple la condición (3.37), es decir, cuando el campo Ω es colineal. Por otro lado, si observamos (6.4), μ'_{zy} es cero cuando $\gamma k_n^2 \sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2) = 0$, lo cual sucede únicamente cuando la dirección de crecimiento es [111].

La ecuación (6.16) indica que no es posible obtener una corriente eléctrica en que el espín esté orientado en la dirección $\hat{\mathbf{m}}$ cuando se trata de una orientación del conjunto $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$.

Por último, si la orientación del espín es en la dirección $\hat{\mathbf{n}}$, la conductividad de espín se anula mediante un campo Ω colineal ($\mu'_{yx} = 0$); sin embargo, de (6.4), existe la posibilidad de $\mu'_{xy} = 0$ cuando

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = -\text{sgn}(n_x n_y)(1 + 3\eta^2)n_z. \quad (6.18)$$

Esta posibilidad no implica que exista una colinealidad del campo espín-órbita⁶, pero de igual manera anula la conductividad de espín. Para los casos en que la igualdad en el módulo de los índices de Miller $[hkl]$ se de entre h y l o l y k se tienen las relaciones

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = -\text{sgn}(n_x n_z)(1 + 3\eta^2)n_y \quad \frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = -\text{sgn}(n_y n_z)(1 + 3\eta^2)n_x, \quad (6.19)$$

las cuales también satisfacen la anulación de $(\mu'_x \times \mu'_y)_z$. La Figura 19 muestra en color el valor de $\sqrt{(\mu'_x \times \mu'_y)_z}$ y permite apreciar un conjunto de direcciones para las cuales este factor se anula utilizando las relaciones $\alpha/\gamma k_n^2$ adecuadas.

⁶La dirección del campo Ω no es independiente de \mathbf{k} en este caso

$$\frac{\hbar}{2}\Omega' = \text{sgn}(n_x n_y)\gamma k_n^2(1 - 3\eta^2)(0, 2n_z k'_x, -\sqrt{2}\eta k'_y).$$

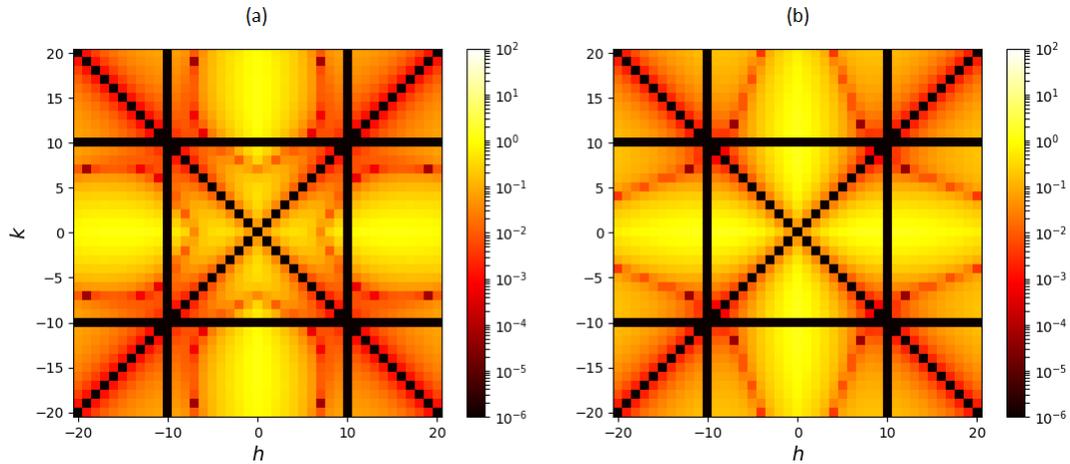


Figura 19: Cuadrícula de direcciones $[hkl]$ con $l = 10$. El color indica el valor de $\sqrt{(\mu'_x \times \mu'_y)_z}$. Los parámetros utilizados son (a) los mismos que en la Figura 16 y (b) las relaciones (6.18) y (6.19) para anular el factor según es el caso.

6.3. Resumen de resultados

En este capítulo se obtuvieron expresiones de los tensores de conductividad de carga y espín considerando el Hamiltoniano de un GE2D orientado en dirección $\hat{\mathbf{n}}$ con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en \mathbf{k} . Se observó que existen diferentes tipos de espectros para la conductividad, al igual que con la densidad conjunta de estados, los cuales toman una u otra forma dependiendo del valor de las frecuencias críticas $\omega_<$ y $\omega_>$. Además, se analizaron los factores Λ y $(\mu'_x \times \mu'_y)_z$, los cuales determinan la anulación de la absorción óptica y conductividad de espín respectivamente; se encontró que, mientras la primera se cancela únicamente bajo las condiciones de colinealidad del campo $\Omega(\mathbf{k})$ (Kammermeier et al., 2016), la segunda puede hacerlo incluso sin un campo $\Omega(\mathbf{k})$ con dirección fija.

Capítulo 7. Fase de Berry y conductividad Hall de espín

En una investigación realizada por Shen (2004) se encontró una relación entre la Fase de Berry y la conductividad Hall de espín σ_{sH} de un GE2D orientado en la dirección cristalográfica [001]. Este resultado ha sido citado en otros trabajos (Jia y Berakdar, 2011; Murakawa et al., 2013) donde parece sugerirse una conexión general entre ambas cantidades aun cuando dicha relación se calculó para un sistema y una dirección de crecimiento en específico. Por otro lado, en un estudio reciente (Chen et al., 2014) se calculan la fase geométrica y la conductividad Hall de espín para un sistema general con interacción espín-órbita lineal en \mathbf{k} , donde $\Omega_z = 0$, y se observa que no existe una proporcionalidad entre las dos. En este capítulo se busca obtener y comparar expresiones de ambas cantidades utilizando el Hamiltoniano del GE2D con dirección de crecimiento arbitraria que, a diferencia del utilizado por Chen et al. (2014), toma en cuenta un campo $\Omega_z \neq 0$. Además, una vez obtenidas dichas expresiones, se determina si la dirección de crecimiento del gas [001] es la única para la cual existe una relación o si hay otras orientaciones que satisfacen esta característica.

Mientras que en capítulos anteriores se obtuvieron expresiones para la conductividad de espín como respuesta a un campo eléctrico que oscila en el tiempo, en éste se deriva una expresión general de la conductividad Hall para el caso de un campo estático ($\omega = 0$) y una expresión de la fase de Berry de los electrones del gas. La definición y derivación de las expresiones generales para la curvatura y fase de Berry se encuentran en el Apéndice D.

7.1. Fase de Berry de un sistema general de dos niveles

A partir de su definición (ver Apéndice D, ec. (D.12)), la fase de Berry de un sistema descrito por el Hamiltoniano (2.2) está dada por

$$\gamma_\lambda = \oint \mathbf{A}_\lambda(\mathbf{k}) \cdot k d\theta \hat{\theta} \quad (7.1)$$

donde

$$\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{k}) = i\psi_\lambda^\dagger(\mathbf{k})\nabla_k\psi_\lambda(\mathbf{k}) \quad (7.2)$$

es la conexión de Berry, $\hat{\boldsymbol{\theta}} = -\sin\theta\hat{\mathbf{x}} + \cos\theta\hat{\mathbf{y}}$ es el vector tangencial unitario en el espacio \mathbf{k} y el estado $\psi_\lambda(\mathbf{k})$ es (2.16). De tal forma que podemos escribir

$$\begin{aligned}\mathbf{A}_\lambda(\mathbf{k}) &= i \begin{pmatrix} N_\lambda & \lambda N_{-\lambda} e^{-i\phi(\mathbf{k})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nabla_k N_\lambda \\ \lambda \nabla_k (N_{-\lambda} e^{i\phi(\mathbf{k})}) \end{pmatrix} \\ &= - \left(\frac{\Omega - \lambda \Omega_z}{2\Omega} \right) \nabla_k \phi(\mathbf{k})\end{aligned}\quad (7.3)$$

donde se utilizó la condición de normalización $N_\lambda^2 + N_{-\lambda}^2 = 1$. El gradiente $\nabla_k \phi$ está dado por⁷

$$\nabla_{\mathbf{k}}(\phi) = \text{Im} \left(e^{-i\phi} \nabla_{\mathbf{k}} e^{i\phi} \right) = \frac{1}{\Omega_{\parallel}^2} (\Omega_x \nabla_k \Omega_y - \Omega_y \nabla_k \Omega_x), \quad (7.4)$$

de manera que la fase de Berry puede escribirse como

$$\begin{aligned}\gamma_\lambda &= - \int_0^{2\pi} d\theta \left(\frac{\Omega - \lambda \Omega_z}{2\Omega} \right) \nabla_k \phi(\mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\theta}} \\ &= - \int_0^{2\pi} d\theta \left(\frac{\Omega - \lambda \Omega_z}{2\Omega} \right) \partial_\theta \phi(\mathbf{k}) \\ &= - \int_0^{2\pi} d\theta \left(\frac{\Omega - \lambda \Omega_z}{2\Omega} \right) \frac{1}{\Omega_{\parallel}^2} (\Omega_x \partial_\theta \Omega_y - \Omega_y \partial_\theta \Omega_x) \\ &= - \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\Omega_x \partial_\theta \Omega_y - \Omega_y \partial_\theta \Omega_x}{\Omega(\Omega + \lambda \Omega_z)}.\end{aligned}\quad (7.5)$$

Por otra parte, la curvatura de Berry es

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega}_\lambda(\mathbf{k}) &= \nabla_k \times \mathbf{A}_\lambda(\mathbf{k}) \\ &= \frac{\lambda}{2} \nabla_k \left(\frac{\Omega_z}{\Omega} \right) \times \nabla_k \phi(\mathbf{k});\end{aligned}\quad (7.6)$$

sin embargo, existe otra forma de expresarla (ver Apéndice D, ec.(D.26)), de manera que

$$\boldsymbol{\Omega}_\lambda(\mathbf{k}) = i\hbar^2 \frac{\langle \lambda | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | -\lambda \rangle \times \langle -\lambda | \mathbf{v}(\mathbf{k}) | \lambda \rangle}{(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{-\lambda})^2} \quad (7.7)$$

y recordando las definiciones (4.19) y (4.32) se tiene

$$\begin{aligned}\Omega_{\lambda,i} &= \frac{i}{\Omega^2} \varepsilon_{ijl} V_{jl}^\lambda \\ &= \frac{i}{\Omega^2} [\varepsilon_{ijl} S_{jl} + i\lambda \varepsilon_{ijl} T_{jl}].\end{aligned}\quad (7.8)$$

⁷ $e^{i\phi} = (\Omega_x + i\Omega_y)/\Omega_{\parallel}$

Dado que $\varepsilon_{ijl}S_{jl} = 0$,

$$\begin{aligned}
\Omega_{\lambda,i} &= -\frac{\lambda}{\Omega^2} \varepsilon_{ijl} T_{jl} \\
&= -\frac{\lambda}{4\Omega^2} \varepsilon_{ijl} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_l} m''_{pq} \\
&= -\frac{\lambda}{4\Omega^3} \varepsilon_{ijl} \varepsilon_{pqr} \frac{\partial \Omega_p}{\partial k_j} \frac{\partial \Omega_q}{\partial k_l} \Omega_r \\
&= -\frac{\lambda}{4\Omega^3} \varepsilon_{ijl} \mathbf{\Omega} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial k_j} \times \frac{\partial \mathbf{\Omega}}{\partial k_l} \right).
\end{aligned} \tag{7.9}$$

Cabe señalar que, hasta este punto, las ecuaciones relacionadas con la fase de Berry corresponden a un campo $\mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$ general; no se ha especificado el tipo de interacción que actúa sobre los electrones, por lo que las expresiones bien podrían utilizarse para otros sistemas físicos que sean descritos por un Hamiltoniano del tipo $\frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{\Omega}(\mathbf{k})$.

7.2. Fase de Berry de un Hamiltoniano espín-órbita lineal en \mathbf{k}

Si especificamos que el sistema descrito es un GE2D con orientación arbitraria, siendo que este presenta interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, y además, esta última toma en cuenta solamente términos lineales en \mathbf{k} , la fase de Berry toma la forma

$$\begin{aligned}
\gamma_{\lambda}^{[hkl]} &= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} d\theta k^2 \frac{1}{\frac{\hbar}{2} \Omega'_z (\frac{\hbar}{2} \Omega'_z + \lambda \frac{\hbar}{2} \Omega'_z)}, \\
&= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}(\theta) (g_{[hkl]}(\theta) + \lambda \mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu})}
\end{aligned} \tag{7.10}$$

donde se utilizó $\Omega'_i = \mu'_{i\nu} k'_{\nu}$ y el resultado $\frac{\hbar}{2} \partial_{\theta} \Omega'_i = \partial_{\theta} \mu'_{i\nu} k'_{\nu} = k(-\mu'_{ix} \sin \theta + \mu'_{iy} \cos \theta)$; $\hat{k}'_x = \cos \theta$ y $\hat{k}'_y = \sin \theta$, mientras que $g_{[hkl]}(\theta)$ está definida como (2.38) y los vectores $\boldsymbol{\mu}'_{\nu}$ son (2.39).

La expresión de $\gamma_{\lambda}^{[hkl]}$ puede reescribirse como

$$\begin{aligned}
\gamma_{\lambda}^{[hkl]} &= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} d\theta \frac{g_{[hkl]}(\theta) - \lambda \mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu}}{g_{[hkl]}(\theta) [g_{[hkl]}^2(\theta) - (\mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu})^2]} \\
&= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} d\theta \frac{g_{[hkl]}(\theta) - \lambda \mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu}}{g_{[hkl]}(\theta) g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} \\
&= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} \left(1 - \lambda \frac{\mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu}}{k g_{[hkl]}(\theta)} \right) \\
&= -\frac{1}{2} (\boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{x}} \times \boldsymbol{\mu}'_{\mathbf{y}})_z \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} \left(1 - \lambda \frac{\Omega'_z}{\Omega'} \right).
\end{aligned} \tag{7.11}$$

La segunda integral en estas expresiones se anula debido a simetría de inversión temporal, es decir, $\Omega(-\mathbf{k}) = -\Omega(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{\mu'_{z\nu} \hat{k}'_{\nu} d\theta}{g_{[hkl]}(\theta) g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} &= \int_0^{2\pi} \frac{(\mu'_{zx} \cos \theta + \mu'_{zy} \sen \theta) d\theta}{(A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta) \sqrt{A + B \cos 2\theta + C \sen 2\theta}} \\ &= \int_0^{\pi} (\dots) + \int_{\pi}^{2\pi} (\dots) \\ &= \int_0^{\pi} (\dots) - \int_0^{\pi} (\dots) = 0. \end{aligned} \quad (7.12)$$

En la integral se utilizó el cambio de variable $\theta \rightarrow \theta' = \theta - \pi$ mientras que a $g_{[hkl]}^2(\theta)$ se le dio la forma

$$g_{[hkl]}^2(\theta) = A + B \cos 2\theta + C \sen 2\theta, \quad (7.13)$$

donde

$$\begin{aligned} A &= \frac{1}{2}(\mu'^2_{xx} + \mu'^2_{yx} + \mu'^2_{zx} + \mu'^2_{xy} + \mu'^2_{yy} + \mu'^2_{zy}) = \frac{1}{2}(|\boldsymbol{\mu}'_x|^2 + |\boldsymbol{\mu}'_y|^2) \\ B &= \frac{1}{2}(\mu'^2_{xx} + \mu'^2_{yx} + \mu'^2_{zx} - (\mu'^2_{xy} + \mu'^2_{yy} + \mu'^2_{zy})) = \frac{1}{2}(|\boldsymbol{\mu}'_x|^2 - |\boldsymbol{\mu}'_y|^2) \\ C &= \mu'_{xx}\mu'_{xy} + \mu'_{yx}\mu'_{yy} + \mu'_{zx}\mu'_{zy} = \boldsymbol{\mu}'_x \cdot \boldsymbol{\mu}'_y, \end{aligned} \quad (7.14)$$

y a $g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)$

$$g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0) = A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta \quad (7.15)$$

con

$$\begin{aligned} A' &= \frac{1}{2}(\mu'^2_{xx} + \mu'^2_{yx} + \mu'^2_{xy} + \mu'^2_{yy}) \\ B' &= \frac{1}{2}(\mu'^2_{xx} + \mu'^2_{yx} - (\mu'^2_{xy} + \mu'^2_{yy})) \\ C' &= \mu'_{xx}\mu'_{xy} + \mu'_{yx}\mu'_{yy}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Regresando a $\gamma_{\lambda}^{[hkl]}$, se tiene que

$$\gamma_{\lambda}^{[hkl]} = -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} \quad (7.17)$$

se vuelve independiente de λ . (7.17) puede ser simplificada

$$\begin{aligned}
I &\equiv \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta} \\
&= \int_0^\pi \frac{d\theta}{A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta} + \int_\pi^{2\pi} \frac{d\theta}{A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta} \\
&= 2 \int_0^\pi \frac{d\theta}{A' + B' \cos 2\theta + C' \sen 2\theta} \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{A' + B' \cos \theta + C' \sen \theta},
\end{aligned} \tag{7.18}$$

donde se utilizó, nuevamente, el cambio de variable $\theta \rightarrow \theta' = \theta - \pi$ y $\theta \rightarrow \theta' = 2\theta$. Esta integral se puede calcular fácilmente mediante integración sobre el círculo unitario \mathcal{C} en el plano complejo. Si $z = e^{i\theta}$, entonces

$$I_{\mathcal{C}} = I = \frac{1}{i} \int_{\mathcal{C}} \frac{dz}{\frac{1}{2}(B' - iC')z^2 + A'z + \frac{1}{2}(B' + iC')} \tag{7.19}$$

$$= \frac{2}{i(B' - iC')} \int_{\mathcal{C}} \frac{dz}{(z - z_-)(z - z_+)} \tag{7.20}$$

donde $z_{\pm} = -w(1 \mp \sqrt{\xi})$ son los polos en el integrando de (7.19), $w = A'(B' + iC')/(B'^2 + C'^2)$, $|w| > 1$, $\xi = 1 - [(B'^2 + C'^2)/A'^2] = 1 - |w|^{-2}$ por lo que $0 < \xi < 1$. El polo z_- tiene magnitud $|z_-| = |w|(1 + \sqrt{\xi}) > |w| > 1$ y reside fuera del círculo \mathcal{C} . Además, dado que $z_+ z_-^* = 1$ y $|z_+||z_-| = 1$ entonces $|z_+| < 1$, lo que significa que está dentro del círculo \mathcal{C} . Por lo tanto, usando la fórmula de Cauchy⁸ se obtiene

$$\begin{aligned}
I_{\mathcal{C}} &= \frac{2}{i(B' - iC')} \frac{2\pi i}{(z_+ - z_-)} \\
&= \frac{2\pi}{\sqrt{A'^2 - (B'^2 + C'^2)}} \\
&= \frac{2\pi}{|\mu'_{xx}\mu'_{yy} - \mu'_{xy}\mu'_{yx}|} \\
&= \frac{2\pi}{|(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z|},
\end{aligned} \tag{7.21}$$

donde también se ha utilizado el resultado $z_+ - z_- = 2\sqrt{\xi}w = \frac{2\sqrt{A'^2 - (B'^2 + C'^2)}}{B'^2 + C'^2}(B' + iC')$. La fase de

⁸ $\oint_{\mathcal{C}} \frac{f(z)}{z - z_0} dz = 2\pi i f(z_0)$

Berry queda entonces como

$$\begin{aligned}
\gamma_\lambda^{[hkl]} &= -\frac{1}{2}(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu_{z\nu} = 0)} \\
&= -\pi \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z|} \\
&= -\pi \operatorname{sgn} \left[(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \right].
\end{aligned} \tag{7.22}$$

7.3. Conductividad Hall de espín y relación con fase de Berry

Entre las expresiones obtenidas anteriormente para la conductividad de espín, se obtuvo una en específico, la (6.10), que corresponde al caso en que al gas se le aplica un campo eléctrico estático. De ahí la conductividad Hall de espín $\sigma_{sH} \equiv \sigma_{xy}^{s,z}(0)$ está dada por

$$\sigma_{sH} = -\frac{e}{8\pi}(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{(1 + \cos 2\theta)}{g_{[hkl]}^2(\theta)}, \tag{7.23}$$

donde $g_{[hkl]}(\theta)$ es (2.38). Mediante un proceso similar al realizado con la integral (7.17) se tiene que la primera integral es

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta)} &= \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}} \\
&= \frac{2\pi}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|}
\end{aligned} \tag{7.24}$$

donde A, B y C están definidas como (7.14). Para la segunda integral se tiene

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta)} d\theta &= 2 \int_0^\pi \frac{\cos 2\theta}{A + B \cos 2\theta + C \sin 2\theta} d\theta \\
&= \int_0^{2\pi} \frac{\cos \theta}{A + B \cos \theta + C \sin \theta} d\theta \\
&= \frac{1}{i} \int_C \frac{\frac{1}{2}(z + z^{-1})dz}{[\frac{1}{2}(B - iC)z^2 + Az + \frac{1}{2}(B + iC)]} \\
&= \frac{1}{i(B - iC)} \left[\int_C \frac{z dz}{(z - z_-)(z - z_+)} + \int_C \frac{dz}{z(z - z_-)(z - z_+)} \right]
\end{aligned} \tag{7.25}$$

con el polo z_+ dado por

$$z_+ = -\frac{[A' - \sqrt{A'^2 - (B'^2 + C'^2)}]}{B'^2 + C'^2} (B' + iC') \quad (7.26)$$

y $z_- = 1/z_+^*$. En la segunda integral hay dos raíces que se encuentran dentro del círculo unitario del plano complejo, $z = 0$ y $z = z_+$, de manera que, utilizando una vez más la fórmula de Cauchy, se obtiene

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta)} d\theta &= \frac{1}{i(B - iC)} 2\pi i \left[\frac{z_+}{z_+ - z_-} + \frac{1}{z_- z_+} + \frac{1}{z_+(z_+ - z_-)} \right] \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}} \operatorname{Re}(z_+) \\ &= \frac{2\pi}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|} \operatorname{Re}(z_+). \end{aligned} \quad (7.27)$$

Sustituyendo el resultado de estas integrales, la conductividad Hall de espín queda como

$$\sigma_{sH} = -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|} [1 + \operatorname{Re}(z_+)] \quad (7.28)$$

Si se considera el tensor de conductividad de espín completo $\sigma_{ij}^{s,z}(0)$, se debe evaluar la integral

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{\sin 2\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta)} d\theta &= 2 \int_0^\pi \frac{\sin 2\theta}{A + B \cos 2\theta + C \sin 2\theta} d\theta \\ &= \int_0^{2\pi} \frac{\sin \theta}{A + B \cos \theta + C \sin \theta} d\theta \\ &= \frac{1}{i} \int_C \frac{\frac{1}{2i}(z - z^{-1})dz}{[\frac{1}{2}(B - iC)z^2 + Az + \frac{1}{2}(B + iC)]} \\ &= -\frac{1}{i(B - iC)} \left[\int_C \frac{z dz}{(z - z_-)(z - z_+)} - \int_C \frac{dz}{z(z - z_-)(z - z_+)} \right] \\ &= -\frac{1}{i(B - iC)} 2\pi i \left[\frac{z_+}{z_+ - z_-} + \frac{1}{z_- z_+} + \frac{1}{z_+(z_+ - z_-)} \right] \\ &= \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}} \operatorname{Im}(z_+) \\ &= \frac{2\pi}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|} \operatorname{Im}(z_+), \end{aligned} \quad (7.29)$$

con lo que el tensor (6.10) está dado por

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}^{s,z}(0) &= -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|} [\varepsilon_{zij} + \delta_{ij}(\delta_{iy} - \delta_{ix}) \text{Im}(z_+) + (1 - \delta_{ij}) \text{Re}(z_+)] \\ &= -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y|} \begin{pmatrix} -\text{Im}(z_+) & 1 + \text{Re}(z_+) \\ -1 + \text{Re}(z_+) & \text{Im}(z_+) \end{pmatrix}.\end{aligned}\quad (7.30)$$

Llegado este punto, observando las ecuaciones obtenidas para la fase de Berry y la conductividad Hall de espín, uno puede concluir que no existe una relación general entre ambas expresiones; sin embargo, sí dan una idea de para que direcciones podría encontrarse una.

Caso $\Omega'_z = 0$

Si se considera que $\Omega'_z = 0$, eso significa que

$$\begin{aligned}\mu'_{zx} &= \gamma k_n^2 (n_i D_{ij} l_j) = \gamma k_n^2 (n_x n_y m_z + n_x m_y n_z + m_x n_y n_z) = 0 \\ \mu'_{zy} &= \gamma k_n^2 (n_i D_{ij} m_j) = -\gamma k_n^2 (n_x n_y l_z + n_x l_y n_z + l_x n_y n_z) = 0\end{aligned}\quad (7.31)$$

y la conductividad Hall se reduce a

$$\begin{aligned}\sigma_{sH} &= -\frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} + \int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} d\theta \right] \\ &= \frac{e}{8\pi^2} \gamma_\lambda^{[hkl]} - \frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\cos 2\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta; \mu'_{z\nu} = 0)} d\theta \\ &= \frac{e}{8\pi^2} [1 + \text{Re}(z_+)|_{\mu'_{z\nu}=0}] \gamma_\lambda^{[hkl]}\end{aligned}\quad (7.32)$$

donde

$$(z_+)|_{\mu'_{z\nu}=0} = -\frac{[A' - \sqrt{A'^2 - (B'^2 + C'^2)}]}{B'^2 + C'^2} (B' + iC'),\quad (7.33)$$

mientras que A' , B' y C' están dadas por (7.16). Ahora se puede retomar la pregunta ¿Qué direcciones de crecimiento cristalográfico del GE2D satisfacen el hecho de que exista una relación entre la fase de Berry y la conductividad Hall de espín?; de las últimas dos ecuaciones se puede notar que cuando $B' = 0$ la conductividad Hall $\sigma_{sH} = (e/8\pi^2)\gamma_\lambda$, entonces las orientaciones del gas que satisfagan las condiciones $\mu'_{z\nu} = 0$ (7.31) y $|\boldsymbol{\mu}'_x|^2 = |\boldsymbol{\mu}'_y|^2$ darán lugar a una relación entre las dos cantidades. Explícitamente, las únicas direcciones de crecimiento cristalino que satisfacen las dos condiciones son la [001] y [111], de

hecho, son las únicas que satisfacen $\Omega_z = 0$.

Notando que

$$\begin{aligned}
2(B + iC) &= \mu'_{xx}{}^2 + \mu'_{yx}{}^2 - \mu'_{xy}{}^2 - \mu'_{yy}{}^2 + 2i(\mu'_{xx}\mu'_{xy} + \mu'_{yx}\mu'_{yy}) \\
&= (\mu'_{xx} + \mu'_{yy})(\mu'_{xx} - \mu'_{yy}) + (\mu'_{yx} + \mu'_{xy})(\mu'_{yx} - \mu'_{xy}) \\
&\quad + 2i[(\mu'_{xx} + \mu'_{yy})(\mu'_{yx} + \mu'_{xy}) - (\mu'_{xx} - \mu'_{yy})(\mu'_{yx} - \mu'_{xy})] \\
&= x_1x_2 + y_2y_1 + 2i(x_1y_2 - x_2y_1) \\
&= (x_1 - iy_1)(x_2 + iy_2) \\
&= z_1^*z_2,
\end{aligned} \tag{7.34}$$

donde

$$z_1 = x_1 + iy_1 = (\mu'_{xx} + \mu'_{yy}) + i(\mu'_{yx} - \mu'_{xy}) \tag{7.35}$$

$$z_2 = x_2 + iy_2 = (\mu'_{xx} - \mu'_{yy}) + i(\mu'_{yx} + \mu'_{xy}), \tag{7.36}$$

puede llevarse a cabo una simplificación de la expresión (7.32). Se tiene que $B+iC = z_1^*z_2/2$, $B^2+C^2 = |z_1|^2|z_2|^2/4$, $A = (|z_1|^2+|z_2|^2)/4$ y $A - \sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)} = (|z_1|^2+|z_2|^2 - ||z_1|^2 - |z_2|^2|)/4 = |z_{<}|^2/2$, donde $z_{<} = z_1$ si $|z_1| < |z_2|$ o $z_{<} = z_2$ si $|z_2| < |z_1|$. Por lo tanto, en términos de z_1 y z_2 , (7.33) es

$$(z_+)|_{\mu'_{z\nu}=0} = \begin{cases} -z_2/z_1 & \text{si } z_{<} = z_2 \\ -(z_1/z_2)^* & \text{si } z_{<} = z_1, \end{cases} \tag{7.37}$$

lo que implica que $\text{Re}(z_+)|_{\mu'_{z\nu}=0} = -\text{Re}(z_{<}/z_{>})$ y $\text{Im}(z_+)|_{\mu'_{z\nu}=0} = -\text{Im}(z_{<}/z_{>})$. La expresión (7.32) puede reescribirse entonces como

$$\sigma_{sH} = -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z|} \left[1 - \text{Re} \left(\frac{z_{<}}{z_{>}} \right) \right] \tag{7.38}$$

o, en términos de la fase (7.22),

$$\sigma_{sH} = \frac{e}{8\pi^2} \left[1 - \text{Re} \left(\frac{z_{<}}{z_{>}} \right) \right] \gamma_\lambda^{[hkl]}. \tag{7.39}$$

Si se toma en cuenta la parte imaginaria del tensor, puede comprobarse que cuando $\mu'_{z\nu} = 0$

$$\sigma_{ij}^{s,z}(0) = -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z}{|(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_z|} \begin{pmatrix} \operatorname{Im}\left(\frac{z_{\leq}}{z_{>}}\right) & 1 - \operatorname{Re}\left(\frac{z_{\leq}}{z_{>}}\right) \\ -\left[1 + \operatorname{Re}\left(\frac{z_{\leq}}{z_{>}}\right)\right] & -\operatorname{Im}\left(\frac{z_{\leq}}{z_{>}}\right) \end{pmatrix}, \quad (7.40)$$

resultado obtenido por Chen et al. (2014).

En este capítulo se obtuvo una expresión de la fase de Berry para un sistema general de dos niveles, la cual puede ser utilizada en un variedad de sistemas físicos. Posteriormente, se utilizó esta fórmula para obtener una expresión de la fase geométrica del GE2D con orientación arbitraria. Con el objetivo de comparar esta cantidad con la conductividad Hall de espín del gas, se procedió al cálculo de esta última. De modo que se obtuvieron las ecuaciones (7.22) y (7.28), las cuales permiten generalizar el estudio de Chen et al. (2014), mediante un campo $\boldsymbol{\Omega}$ con $\Omega_z \neq 0$, y decir que no existe una relación general entre dichas cantidades; sin embargo, para las direcciones de crecimiento [001] y [111] específicamente, $\gamma_{\lambda}^{[hkl]}$ y σ_{sH} son proporcionales entre ellas. En este estudio no se consideró la definición de conductividad Hall de espín que considera la contribución de torca, sin embargo, valdría la pena considerarla y averiguar si esta contribución sí es naturalmente proporcional a la fase de Berry como señala Chen et al. (2014) incluso con $\Omega_z \neq 0$.

Capítulo 8. Conclusiones

En este trabajo se estudiaron las conductividades de carga y espín, a frecuencia finita, de un gas electrónico bidimensional con interacción espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus tomando en cuenta una dirección cristalográfica arbitraria. A partir de las contribuciones de Rashba y Dresselhaus al acoplamiento espín-órbita, referidas a los ejes xyz , se deriva el Hamiltoniano correspondiente a un sistema de coordenadas $x'y'z'$ en que la dirección z' especifica la dirección de crecimiento cristalográfico de la heteroestructura semiconductor que define al GE2D bajo consideración. Dentro del formalismo de respuesta lineal se calculan las fórmulas de Kubo de los tensores de conductividad óptica y de conductividad de espín de un sistema con un Hamiltoniano genérico $H(\mathbf{k}) = H_0 + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ donde el campo vectorial $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ incluye las contribuciones de Rashba y Dresselhaus con términos cúbicos. Aunque se presentan expresiones explícitas del campo espín-órbita de Dresselhaus $\boldsymbol{\Omega}_D(\mathbf{k})$, tanto lineal como cúbico en \mathbf{k} , los resultados numéricos corresponden solo a un Hamiltoniano lineal con $\Omega_i = \mu_{ij}k_j$. Se obtuvieron y analizaron los espectros de la densidad conjunta de estados, absorción óptica y corriente de espín; se observó que estos podían tomar diferentes formas características dependiendo de, no solamente la relación entre los parámetros espín-órbita, sino también de la dirección de crecimiento cristalográfico. Además, se obtuvieron dos factores, Λ y $(\boldsymbol{\mu}'_x \times \boldsymbol{\mu}'_y)_i$, que quedan fuera de las integrales en los tensores de conductividad de carga y de espín respectivamente. Ambos factores se anulan (y por lo tanto las conductividades) al cumplirse las condiciones de simetría $SU(2)$, bajo las cuales el campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ se vuelve colineal (Kammermeier et al., 2016). Estas condiciones son dos, que la dirección de crecimiento contenga al menos dos índices de Miller iguales en módulo y que exista una relación específica entre los parámetros de interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus. Incluso, se encontró la posibilidad de anulación del factor del tensor de conductividad de espín sin la necesidad de que exista una colinealidad del campo. Esto sucede, de igual manera, para direcciones con al menos dos índices de Miller que coinciden en módulo, sin embargo, la relación entre los parámetros es diferente a aquella de la condición de simetría $SU(2)$. En el último capítulo se obtuvieron expresiones para la conductividad Hall de espín estática y para la fase de Berry válidas para cualquier dirección de crecimiento cristalográfico. A diferencia de un estudio previo, estos cálculos tomaron en cuenta una componente $\Omega_z \neq 0$, lo cual permitió generalizar el resultado de que no existe una conexión natural entre la fase geométrica y la conductividad Hall de espín (Chen et al., 2014). De dichas ecuaciones también se observó que para que exista una relación entre ambas cantidades es necesario que se cumplan dos condiciones, que el campo $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k})$ no tenga componente z y que $|\boldsymbol{\mu}'_x| = |\boldsymbol{\mu}'_y|$, de manera que las únicas orientaciones que las satisfacen son las direcciones de alta simetría $[001]$ y $[111]$.

Puntualizadas y muy generales, las conclusiones de este trabajo son:

- Las corrientes inducidas de carga y espín se pueden manipular, no solamente a través de la modulación electrostática de α , de la frecuencia ω o de la dirección del campo externo, sino también mediante la selección de una orientación cristalográfica definida por la dirección de crecimiento de la muestra.
- No existe una conexión del tipo universal entre la conductividad Hall de espín estática y la fase de Berry de un sistema con un Hamiltoniano de dos bandas $H = \frac{\hbar}{2}\sigma_i\Omega_i$ ($i = x, y, z$). Solamente en los casos particulares de un GE2D orientado en las direcciones [001] y [111] existe tal conexión.

Por último, insistimos que en esta tesis se han derivado fórmulas en términos solamente del campo vectorial $\Omega(\mathbf{k})$ por lo que podrían usarse para explorar otros sistemas descritos por el Hamiltoniano $H = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}$.

Literatura citada

- Altmann, P., Hernandez, F., Ferreira, G., Kohda, M., Reichl, C., Wegscheider, W., y Salis, G. (2016). Current-Controlled Spin Precession of Quasistationary Electrons in a Cubic Spin-Orbit Field. *Physical Review Letters*, **116**(19): 196802.
- Badalyan, S. M., Matos-Abiague, A., Vignale, G., y Fabian, J. (2009). Anisotropic plasmons in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction. *Physical Review B*, **79**(20): 205305.
- Bandyopadhyay, S., Cahay, M., y Cahay, M. (2008). *Introduction to Spintronics*. CRC Press.
- Bernevig, B. A. y Hughes, T. L. (2013). *Topological insulators and topological superconductors*. Princeton university press.
- Bernevig, B. A., Orenstein, J., y Zhang, S.-C. (2006). Exact SU(2) Symmetry and Persistent Spin Helix in a Spin-Orbit Coupled System. *Physical Review Letters*, **97**(23): 236601.
- Berry, M. V. (1984). Quantal Phase Factors Accompanying Adiabatic Changes. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, **392**(1802): 45–57.
- Biswas, T. y Ghosh, T. K. (2012). Zitterbewegung of electrons in quantum wells and dots in the presence of an in-plane magnetic field. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **24**(18): 185304.
- Blum, K. (2012). *Density matrix theory and applications*, Vol. 64. Springer Science & Business Media.
- Bychkov, Y. A. y Rashba, E. I. (1984). Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **17**(33): 6039–6045.
- Chen, T.-W., Li, J.-H., y Hu, C.-D. (2014). Spin-torque current induced by topological Berry phase in a two-dimensional system with generic k -linear spin-orbit interaction. *Physical Review B*, **90**(19): 195202.
- Davies, J. H. J. H. (1998). *The physics of low-dimensional semiconductors : an introduction*. Cambridge University Press. p. 438.
- Dettwiler, F., Fu, J., Mack, S., Weigele, P. J., Egues, J. C., Awschalom, D. D., y Zumbühl, D. M. (2014). Electrical spin protection and manipulation via gate-locked spin-orbit fields.
- Dettwiler, F., Fu, J., Mack, S., Weigele, P. J., Egues, J. C., Awschalom, D. D., y Zumbühl, D. M. (2017). Stretchable Persistent Spin Helices in GaAs Quantum Wells. *Physical Review X*, **7**(3): 031010.
- Dresselhaus, G. (1955). Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. *Physical Review*, **100**(2): 580–586.
- D'yakonov, M. I. y Perel, V. I. (1971). Possibility of orienting electron spins with current. *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics Letters*, **13**: 467.
- Dyakonov, M. I. y Perel, V. I. (1972). Spin relaxation of conduction electrons in noncentrosymmetric semiconductors. *Soviet Physics Solid State, Ussr*, **13**(12): 3023–3026.
- Edelstein, V. (1990). Spin polarization of conduction electrons induced by electric current in two-dimensional asymmetric electron systems. *Solid State Communications*, **73**(3): 233–235.
- Engel, H.-A., Halperin, B. I., y Rashba, E. I. (2005). Theory of Spin Hall Conductivity in n -Doped GaAs. *Physical Review Letters*, **95**(16): 166605.

- Garg, A. (2010). Berry phases near degeneracies: Beyond the simplest case. *American Journal of Physics*, **78**(7): 661–670.
- Goldstein, H., Poole, C., y Safko, J. (1980). *Classical Mechanics* Addison-Wesley. Reading, MA, p. 426.
- Griffiths, D. J. y Schroeter, D. F. (2018). *Introduction to Quantum Mechanics*. Cambridge University Press, tercera edición. Cambridge.
- Iglesias, P. E. y Maytorena, J. A. (2010). Anisotropic dynamical spin-density response in quantum wells with spin-orbit interaction. *Physical Review B*, **82**(20): 205324.
- Il'Inskii, Y. A. y Keldysh, L. V. (2013). *Electromagnetic response of material media*. Springer Science & Business Media.
- Jia, C. y Berakdar, J. (2011). Thermoelectric effect of multiferroic oxide interfaces. *Applied Physics Letters*, **98**(4): 042110.
- Kammermeier, M., Wenk, P., y Schliemann, J. (2016). Control of Spin Helix Symmetry in Semiconductor Quantum Wells by Crystal Orientation. *Physical Review Letters*, **117**(23): 236801.
- Kato, Y. K., Myers, R. C., Gossard, A. C., y Awschalom, D. D. (2004a). Current-Induced Spin Polarization in Strained Semiconductors. *Physical Review Letters*, **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 (New York, N.Y.)*, **306**(5703): 1910–3.
- Klitzing, K. v., Dorda, G., y Pepper, M. (1980). New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance. *Physical Review Letters*, **45**(6): 494–497.
- Kohda, M., Lechner, V., Kunihashi, Y., Dollinger, T., Olbrich, P., Schönhuber, C., Caspers, I., Bel'kov, V. V., Golub, L. E., Weiss, D., Richter, K., Nitta, J., y Ganichev, S. D. (2012). Gate-controlled persistent spin helix state in (In,Ga)As quantum wells. *Physical Review B*, **86**(8): 081306.
- Koralek, J. D., Weber, C. P., Orenstein, J., Bernevig, B. A., Zhang, S.-C., Mack, S., y Awschalom, D. D. (2009). Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. *Nature*, **458**(7238): 610–613.
- Kubo, R. (1957). Statistical-Mechanical Theory of Irreversible Processes. I. General Theory and Simple Applications to Magnetic and Conduction Problems. *Journal of the Physical Society of Japan*, **12**(6): 570–586.
- Kunihashi, Y., Sanada, H., Gotoh, H., Onomitsu, K., Kohda, M., Nitta, J., y Sogawa, T. (2016). Drift transport of helical spin coherence with tailored spin-orbit interactions. *Nature Communications*, **7**: 10722.
- Maytorena, J. A., López-Bastidas, C., y Mireles, F. (2006). Spin and charge optical conductivities in spin-orbit coupled systems. *Physical Review B*, **74**(23): 235313.
- Mireles, F. y Kirczenow, G. (2002). Coherent spin-valve phenomena and electrical spin injection in ferromagnetic/semiconductor/ferromagnetic junctions. *Physical Review B*, **66**(21): 214415.
- Murakawa, H., Bahramy, M. S., Tokunaga, M., Kohama, Y., Bell, C., Kaneko, Y., Nagaosa, N., Hwang, H. Y., y Tokura, Y. (2013). Detection of Berry's phase in a Bulk Rashba semiconductor. *Science (New York, N.Y.)*, **342**(6165): 1490–3.

- Nitta, J., Akazaki, T., Takayanagi, H., y Enoki, T. (1997). Gate Control of Spin-Orbit Interaction in an Inverted In 0.53 Ga 0.47 As/In 0.52 Al 0.48 As Heterostructure. *Physical Review Letters*, **78**(7): 1335–1338.
- Nitta, J., Bergsten, T., Kunihashi, Y., y Kohda, M. (2009). Electrical manipulation of spins in the Rashba two dimensional electron gas systems. *Journal of Applied Physics*, **105**(12): 122402.
- Perel', V. I., Tarasenko, S. A., Yassievich, I. N., Ganichev, S. D., Bel'kov, V. V., y Prettl, W. (2003). Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier. *Physical Review B*, **67**(20): 201304.
- Rashba, E. I. (1960). El Rashba, Sov. Phys. Solid State 2, 1109 (1960). *Sov. Phys. Solid State*, **2**: 1109.
- Sasaki, A., Nonaka, S., Kunihashi, Y., Kohda, M., Bauernfeind, T., Dollinger, T., Richter, K., y Nitta, J. (2014). Direct determination of spin-orbit interaction coefficients and realization of the persistent spin helix symmetry. *Nature Nanotechnology*, **9**(9): 703–709.
- Schäpers, T., Engels, G., Lange, J., Klocke, T., Hollfelder, M., y Lüth, H. (1998). Effect of the heterointerface on the spin splitting in modulation doped In_xGa_{1-x}As/InP quantum wells for B→0. *Journal of Applied Physics*, **83**(8): 4324.
- Schliemann, J. (2017). *Colloquium* : Persistent spin textures in semiconductor nanostructures. *Reviews of Modern Physics*, **89**(1): 011001.
- Schliemann, J., Egues, J. C., y Loss, D. (2003). Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor. *Physical Review Letters*, **90**(14): 146801.
- Schliemann, J., Loss, D., y Westervelt, R. M. (2006). *Zitterbewegung* of electrons and holes in iii-v semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, **73**(8): 085323.
- Shankar, R. (1994). *Principles of quantum mechanics*. Plenum Press. p. 676.
- Shen, S.-Q. (2004). Spin Hall effect and Berry phase in two-dimensional electron gas. *Physical Review B*, **70**(8): 081311.
- Shen, S.-Q. (2012). *Topological insulators : Dirac equation in condensed matters*. Springer.
- 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. *Nature Physics*, **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. *Applied Physics Letters*, **85**(24): 5929–5931.
- Sinitsyn, N., Hankiewicz, E., Teizer, W., y Sinova, J. (2004). Spin Hall and spin-diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. *Physical Review 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. *Physical Review Letters*, **92**(12): 126603.
- Thomas, G. B. y Finney, R. L. (1984). *Calculus and analytic geometry*. Addison Wesley Publishing Company.
- Tkachov, G. (2015). *Topological Insulators*. Pan Stanford.
- Walser, M. P., Reichl, C., Wegscheider, W., y Salis, G. (2012). Direct mapping of the formation of a persistent spin helix. *Nature Physics*, **8**(10): 757–762.

- Wilczek, F. y Shapere, A. (1989). *Geometric Phases in Physics*, Vol. 5 de *Advanced Series in Mathematical Physics*. World Scientific.
- Winkler, R. (2003). *Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems*. Springer. p. 228.
- 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 System. *Physical Review Letters*, **94**(4): 047204.
- Yang, L., Koralek, J. D., Orenstein, J., Tibbetts, D. R., Reno, J. L., y Lilly, M. P. (2012). Coherent Propagation of Spin Helices in a Quantum-Well Confined Electron Gas. *Physical Review Letters*, **109**(24): 246603.
- Žutić, I., Fabian, J., y Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, **76**(2): 323–410.

A Ángulos de Euler en función de los vectores \hat{l} , \hat{m} y \hat{n}

En este apéndice se derivan las ecuaciones (3.10), que corresponden a las expresiones que definen los ángulos de Euler en función de los vectores \hat{l} , \hat{m} y \hat{n} . A partir de la condición (3.8) y la matriz de rotación (3.9) se tienen las ecuaciones

$$\begin{aligned}(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi)l_x + (\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi)l_y + (\sin \psi \sin \theta)l_z &= 1 \\(-\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi)l_x + (-\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi)l_y + (\cos \psi \sin \theta)l_z &= 0 \\(\sin \theta \sin \phi)l_x + (-\sin \theta \cos \phi)l_y + (\cos \theta)l_z &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi)m_x + (\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi)m_y + (\sin \psi \sin \theta)m_z &= 0 \\(-\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi)m_x + (-\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi)m_y + (\cos \psi \sin \theta)m_z &= 1 \\(\sin \theta \sin \phi)m_x + (-\sin \theta \cos \phi)m_y + (\cos \theta)m_z &= 0\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi)n_x + (\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi)n_y + (\sin \psi \sin \theta)n_z &= 0 \\(-\sin \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \cos \psi)n_x + (-\sin \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \cos \psi)n_y + (\cos \psi \sin \theta)n_z &= 0 \\(\sin \theta \sin \phi)n_x + (-\sin \theta \cos \phi)n_y + (\cos \theta)n_z &= 1.\end{aligned}$$

Para obtener expresiones del ángulo ϕ , se puede despejar

$$\begin{aligned}\cos \theta l_z &= (\sin \theta \cos \phi)l_y - (\sin \theta \sin \phi)l_x \\ \cos \theta m_z &= (\sin \theta \cos \phi)m_y - (\sin \theta \sin \phi)m_x\end{aligned}$$

de manera que se tiene la igualdad

$$\begin{aligned}\frac{(\sin \theta \cos \phi)l_y - (\sin \theta \sin \phi)l_x}{l_z} &= \frac{(\sin \theta \cos \phi)m_y - (\sin \theta \sin \phi)m_x}{m_z} \\ \frac{(\cos \phi)l_y - (\sin \phi)l_x}{l_z} &= \frac{(\cos \phi)m_y - (\sin \phi)m_x}{m_z} \\ \sin \phi \left(\frac{m_x}{m_z} - \frac{l_x}{l_z} \right) &= \cos \phi \left(\frac{m_y}{m_z} - \frac{l_y}{l_z} \right) \\ \tan \phi &= \frac{l_z m_y - l_y m_z}{l_z m_x - l_x m_z}.\end{aligned}$$

Utilizando $\hat{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{I}} \times \hat{\mathbf{m}}$ la expresión queda como

$$\tan \phi = -\frac{n_x}{n_y}$$

y por lo tanto

$$\sin \phi = \frac{n_x}{n_{\parallel}}, \quad \cos \phi = -\frac{n_y}{n_{\parallel}}, \quad (\text{A.1})$$

donde $n_{\parallel} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2}$. De forma similar pueden despejarse

$$(\sin \psi \sin \theta) m_z = -(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi) m_x - (\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi) m_y$$

$$(\sin \psi \sin \theta) n_z = -(\cos \psi \cos \phi - \cos \theta \sin \phi \sin \psi) n_x - (\cos \psi \sin \phi + \cos \theta \cos \phi \sin \psi) n_y,$$

al dividir entre $\cos \psi$ y agrupar términos se obtiene

$$(\tan \psi \sin \theta) m_z = -(\cos \phi - \cos \theta \sin \phi \tan \psi) m_x - (\sin \phi + \cos \theta \cos \phi \tan \psi) m_y,$$

$$(\tan \psi \sin \theta) n_z = -(\cos \phi - \cos \theta \sin \phi \tan \psi) n_x - (\sin \phi + \cos \theta \cos \phi \tan \psi) n_y,$$

$$\begin{aligned} \tan \psi &= \frac{\cos \phi m_x + \sin \phi m_y}{\cos \theta \sin \phi m_x - \cos \theta \cos \phi m_y - \sin \theta m_z} \\ \tan \psi &= \frac{\cos \phi n_x + \sin \phi n_y}{\cos \theta \sin \phi n_x - \cos \theta \cos \phi n_y - \sin \theta n_z}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Desarrollando la igualdad se llega a

$$\begin{aligned} &\sin \theta \sin \phi (m_y n_z - m_z n_y) + \sin \theta \cos \phi (m_x n_z - m_z n_x) \\ &+ \cos \theta \sin^2 \phi (m_x n_y - m_y n_x) + \cos \theta \cos^2 \phi (m_x n_y - m_y n_x) = \\ &\sin \theta \sin \phi l_x - \sin \theta \cos \phi l_y + \cos \theta (\sin^2 \phi + \cos^2 \phi) l_z = \\ &\sin \theta (\sin \phi l_x - \cos \phi l_y) + \cos \theta l_z = 0, \end{aligned}$$

de manera que

$$\begin{aligned}
 \tan \theta &= \frac{l_z}{l_y \cos \phi - l_x \sin \phi} \\
 &= -\frac{l_z n_{\parallel}}{l_x n_x + l_y n_y} \\
 &= \frac{l_z n_{\parallel}}{l_z n_z} \\
 &= \frac{n_{\parallel}}{n_z},
 \end{aligned}$$

donde se sustituyó (A.1) y se utilizó $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$. Por lo tanto

$$\sin \theta = n_{\parallel}, \quad \cos \theta = n_z. \quad (\text{A.3})$$

Para encontrar las expresiones del ángulo ψ hace falta sustituir (A.1) y (A.3) en (A.2) con lo que se obtiene

$$\begin{aligned}
 \tan \psi &= \frac{-\left(\frac{n_y}{n_{\parallel}}\right) m_x + \left(\frac{n_x}{n_{\parallel}}\right) m_y}{n_z \left(\frac{n_x}{n_{\parallel}}\right) m_x + n_z \left(\frac{n_y}{n_{\parallel}}\right) m_y - n_{\parallel} m_z} \\
 &= \frac{m_y n_x - m_x n_y}{n_z (m_x n_x + m_y n_y) - m_z n_{\parallel}^2} \\
 &= \frac{l_z}{m_z (n_{\parallel}^2 + n_z^2)} \\
 &= \frac{l_z}{m_z},
 \end{aligned}$$

donde $\hat{\mathbf{I}} = \hat{\mathbf{m}} \times \hat{\mathbf{n}}$, $\hat{\mathbf{m}} \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$ y $|\hat{\mathbf{n}}| = 1$ fueron utilizados. De manera que

$$\sin \psi = \frac{l_z}{n_{\parallel}}, \quad \cos \psi = \frac{m_z}{n_{\parallel}},$$

donde ahora se hizo uso de $l_z^2 + m_z^2 + n_z^2 = 1$.

B Coeficientes de Dresselhaus en la matriz de parámetros espín-órbita μ'_{ij}

En este apéndice se muestran explícitamente los coeficientes de la contribución espín-órbita tipo Dresselhaus, tanto de la forma lineal (3.19) como la cúbica (3.30); además, se muestran algunas relaciones entre los vectores $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$ que resultan útiles al momento de obtener las diferentes expresiones de los coeficientes. De modo que para la forma lineal se tiene

$$\begin{aligned}
l_i D_{ij} l_j &= -m_i D_{ij} m_j \\
&= -\lambda_{ijk} l_i n_j m_k \\
&= l_x^2 (n_y^2 - n_z^2) + l_y^2 (n_z^2 - n_x^2) + l_z^2 (n_x^2 - n_y^2) \\
&= m_x^2 (l_y^2 - l_z^2) + m_y^2 (l_z^2 - l_x^2) + m_z^2 (l_x^2 - l_y^2) \\
&= n_x^2 (m_y^2 - m_z^2) + n_y^2 (m_z^2 - m_x^2) + n_z^2 (m_x^2 - m_y^2)
\end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
m_i \hat{D}_{ij} l_j &= \lambda_{ijk} l_i n_j l_k - \frac{1}{2} \lambda_{ijk} n_i n_j n_k \\
&= 2(n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z) - 3n_x n_y n_z \\
&= -2[l_x m_x (l_y^2 - l_z^2) + l_y m_y (l_z^2 - l_x^2) + l_z m_z (l_x^2 - l_y^2)] - 3n_x n_y n_z \\
&= -2(n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) - 9n_x n_y n_z
\end{aligned} \tag{B.2}$$

$$\begin{aligned}
n_i D_{ij} l_j &= \frac{1}{2} \lambda_{ijk} n_i n_j m_k \\
&= n_x n_y m_z + n_x m_y n_z + m_x n_y n_z \\
&= -[n_x l_x (n_y^2 - n_z^2) + n_y l_y (n_z^2 - n_x^2) + n_z l_z (n_x^2 - n_y^2)]
\end{aligned} \tag{B.3}$$

$$\begin{aligned}
l_i D_{ij} m_j &= -\lambda_{ijk} m_i n_j m_k + \frac{1}{2} \lambda_{ijk} n_i n_j n_k \\
&= -2(n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) + 3n_x n_y n_z \\
&= 2(n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z) + 9n_x n_y n_z \\
&= -2[l_x m_x (l_y^2 - l_z^2) + l_y m_y (l_z^2 - l_x^2) + l_z m_z (l_x^2 - l_y^2)] + 9n_x n_y n_z \\
&= m_i D_{ij} l_j + 12n_x n_y n_z
\end{aligned} \tag{B.4}$$

$$\begin{aligned}
n_i D_{ij} m_j &= -\frac{1}{2} \lambda_{ijk} n_i n_j l_k \\
&= -(n_x n_y l_z + n_x l_y n_z + l_x n_y n_z) \\
&= -[n_x m_x (n_y^2 - n_z^2) + n_y m_y (n_z^2 - n_x^2) + n_z m_z (n_x^2 - n_y^2)].
\end{aligned} \tag{B.5}$$

$$l_i D_{ij} n_j = -3n_i D_{ij} l_j \tag{B.6}$$

$$m_i D_{ij} n_j = -3n_i D_{ij} m_j \tag{B.7}$$

$$n_i D_{ij} n_j = 0 \tag{B.8}$$

Para la forma cúbica, la forma explícita de los factores presentes en la ecuación (3.30) son

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} l_j l_r l_s &= \delta_{ix} l_x (l_y^2 - l_z^2) + \delta_{iy} l_y (l_z^2 - l_x^2) + \delta_{iz} l_z (l_x^2 - l_y^2) \\
\frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} m_j m_r m_s &= \delta_{ix} m_x (m_y^2 - m_z^2) + \delta_{iy} m_y (m_z^2 - m_x^2) + \delta_{iz} m_z (m_x^2 - m_y^2) \\
\frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} (l_j l_r m_s + l_r l_s m_j + l_s l_j m_r) &= \delta_{ix} [m_x (l_y^2 - l_z^2) + 2l_x (l_y m_y - l_z m_z)] \\
&\quad + \delta_{iy} [m_y (l_z^2 - l_x^2) + 2l_y (l_z m_z - l_x m_x)] \\
&\quad + \delta_{iz} [m_z (l_x^2 - l_y^2) + 2l_z (l_x m_x - l_y m_y)] \\
\frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} (l_j m_r m_s + l_r m_s m_j + l_s m_j m_r) &= \delta_{ix} [l_x (m_y^2 - m_z^2) + 2m_x (l_y m_y - l_z m_z)] \\
&\quad + \delta_{iy} [l_y (m_z^2 - m_x^2) + 2m_y (l_z m_z - l_x m_x)] \\
&\quad + \delta_{iz} [l_z (m_x^2 - m_y^2) + 2m_z (l_x m_x - l_y m_y)]
\end{aligned}$$

Por último, algunas relaciones de utilidad entre las componentes de los vectores $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$ son

$$\begin{aligned}
l_x m_x (l_y^2 - l_z^2) + l_y m_y (l_z^2 - l_x^2) + l_z m_z (l_x^2 - l_y^2) &= -(n_x l_y l_z + l_x n_y l_z + l_x l_y n_z) \\
&= n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z + 3n_x n_y n_z \\
l_x m_x (m_y^2 - m_z^2) + l_y m_y (m_z^2 - m_x^2) + l_z m_z (m_x^2 - m_y^2) &= n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z \\
l_x m_x (n_y^2 - n_z^2) + l_y m_y (n_z^2 - n_x^2) + l_z m_z (n_x^2 - n_y^2) &= -2(n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) \\
&\quad - 3n_x n_y n_z
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
l_x n_x (l_y^2 - l_z^2) + l_y n_y (l_z^2 - l_x^2) + l_z n_z (l_x^2 - l_y^2) &= l_x l_y m_z + l_x m_y l_z + m_x l_y l_z \\
l_x n_x (m_y^2 - m_z^2) + l_y n_y (m_z^2 - m_x^2) + l_z n_z (m_x^2 - m_y^2) &= 2(n_x n_y m_z + n_x m_y n_z + m_x n_y n_z) + 3m_x m_y m_z \\
&= -2(m_x l_y l_z + l_x m_y l_z + l_x l_y m_z) - 3m_x m_y m_z \\
l_x n_x (n_y^2 - n_z^2) + l_y n_y (n_z^2 - n_x^2) + l_z n_z (n_x^2 - n_y^2) &= -(n_x n_y m_z + n_x m_y n_z + m_x n_y n_z)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_x n_x (l_y^2 - l_z^2) + m_y n_y (l_z^2 - l_x^2) + m_z n_z (l_x^2 - l_y^2) &= 2(m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) + 3l_x l_y l_z \\
&= -2(n_x n_y l_z + n_x l_y n_z + l_x n_y n_z) - 3l_x l_y l_z \\
m_x n_x (m_y^2 - m_z^2) + m_y n_y (m_z^2 - m_x^2) + m_z n_z (m_x^2 - m_y^2) &= -(m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) \\
m_x n_x (n_y^2 - n_z^2) + m_y n_y (n_z^2 - n_x^2) + m_z n_z (n_x^2 - n_y^2) &= n_x n_y l_z + n_x l_y n_z + l_x n_y n_z
\end{aligned}$$

$$l_x l_y + m_x m_y + n_x n_y = 0$$

$$l_x l_z + m_x m_z + n_x n_z = 0$$

$$l_y l_z + m_y m_z + n_y n_z = 0$$

$$\lambda_{ijk} l_i l_j n_k + \lambda_{ijk} m_i m_j n_k + \lambda_{ijk} n_i n_j n_k = 0$$

$$\lambda_{ijk} l_i l_j m_k + \lambda_{ijk} n_i n_j m_k + \lambda_{ijk} m_i m_j m_k = 0$$

$$\lambda_{ijk} m_i m_j l_k + \lambda_{ijk} n_i n_j l_k + \lambda_{ijk} l_i l_j l_k = 0$$

$$(l_x l_y n_z + l_x n_y l_z + n_x l_y l_z) + (n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) = -3n_x n_y n_z$$

$$(l_x l_y m_z + l_x m_y l_z + m_x l_y l_z) + (n_x n_y m_z + n_x m_y n_z + m_x n_y n_z) = -3m_x m_y m_z$$

$$(m_x m_y l_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) + (n_x n_y l_z + n_x l_y n_z + l_x n_y n_z) = -3l_x l_y l_z.$$

C Campo espín-órbita en función de armónicos angulares

En el presente apéndice se obtiene la expresión cúbica del campo espín-órbita en su forma de armónicos angulares para la dirección que posibilita la simetría SU(2) con el objetivo de empatar con las ecuaciones de Kammermeier et al. (2016). Para el caso especial $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$ con $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$ y $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_z, n_z, -2\eta)$,

$$\begin{aligned}
\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}' &= \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{R}} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}} \\
&= \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{R}} + \gamma\boldsymbol{\kappa}' \\
&= \left\{ \alpha k'_y + n_z k'_y \left[\gamma \langle k_z'^2 \rangle (1 + 3\eta^2) + \gamma \left(\frac{1}{2}(1 - 6\eta^2)k_x'^2 - \frac{1}{2}k_y'^2 \right) \right] \right\} \hat{\mathbf{x}}' \\
&\quad + \left\{ -\alpha k'_x + n_z k'_x \left[\gamma \langle k_z'^2 \rangle (1 - 9\eta^2) + \gamma \left(\frac{1}{2}k_y'^2 - \frac{1}{2}(1 - 6\eta^2)k_x'^2 \right) \right] \right\} \hat{\mathbf{y}}' \\
&\quad + \sqrt{2}\eta k'_y \left\{ -\gamma \langle k_z'^2 \rangle (1 - 3\eta^2) + \gamma \left[\left(1 + \frac{3}{2}n_z^2 \right) k_x'^2 - \frac{1}{2}k_y'^2 \right] \right\} \hat{\mathbf{z}}'.
\end{aligned} \tag{C.1}$$

Utilizando coordenadas polares, es decir, $k'_x = k' \cos \theta$, $k'_y = k' \sin \theta$ ($k' = k$), y⁹

$$k_x'^3 = \frac{k'^3}{4}(3 \cos \theta + \cos 3\theta) \tag{C.2}$$

$$k_y'^3 = \frac{k'^3}{4}(3 \sin \theta - \sin 3\theta) \tag{C.3}$$

$$k_x'^2 k'_y = \frac{k'^3}{4}(\sin \theta + \sin 3\theta) \tag{C.4}$$

$$k'_x k_y'^2 = \frac{k'^3}{4}(\cos \theta - \cos 3\theta) \tag{C.5}$$

se tiene que $\gamma\boldsymbol{\kappa}'^{(1)}$ es

$$\begin{aligned}
\gamma\boldsymbol{\kappa}'^{(1)} &= \gamma \langle k_z'^2 \rangle k' [\cos \theta (\delta_{lx} l_i D_{ij} l_j + \delta_{ly} m_i D_{ij} l_j + \delta_{lz} n_i D_{ij} l_j) \\
&\quad + \sin \theta (\delta_{lx} l_i D_{ij} m_j + \delta_{ly} m_i D_{ij} m_j + \delta_{lz} n_i D_{ij} m_j)] \\
&= \gamma \langle k_z'^2 \rangle k' [\delta_{lx} (l_i D_{ij} l_j \cos \theta + l_i D_{ij} m_j \sin \theta) + \delta_{ly} (m_i D_{ij} l_j \cos \theta + m_i D_{ij} m_j \sin \theta) \\
&\quad + \delta_{lz} (n_i D_{ij} l_j \cos \theta + n_i D_{ij} m_j \sin \theta)],
\end{aligned} \tag{C.6}$$

⁹ $\cos^3 \theta = \frac{3}{4} \cos \theta + \frac{1}{4} \cos 3\theta$, $\sin^3 \theta = \frac{3}{4} \sin \theta - \frac{1}{4} \sin 3\theta$.

mientras que $\gamma\kappa'^{(3)}$ se expresa como

$$\begin{aligned} \gamma\kappa_l'^{(1)} = \gamma \frac{k'^3}{4} & [\cos \theta (\delta_{lx} l_i C_i^{(1)} + \delta_{ly} m_i C_i^{(1)} + \delta_{lz} n_i C_i^{(1)}) + \sin \theta (\delta_{lx} l_i S_i^{(1)} + \delta_{ly} m_i S_i^{(1)} + \delta_{lz} n_i S_i^{(1)}) \\ & + \cos 3\theta (\delta_{lx} l_i C_i^{(3)} + \delta_{ly} m_i C_i^{(3)} + \delta_{lz} n_i C_i^{(3)}) + \sin 3\theta (\delta_{lx} l_i S_i^{(3)} + \delta_{ly} m_i S_i^{(3)} + \delta_{lz} n_i S_i^{(3)})] \end{aligned} \quad (C.7)$$

donde los vectores $C_i^{(1)}$, $S_i^{(1)}$, $C_i^{(3)}$ y $S_i^{(3)}$ están dados por

$$\begin{aligned} C_i^{(1)} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} [3l_j l_r l_s + (l_j m_r m_s + l_r m_s m_j + l_s m_j m_r)] \\ &= \delta_{ix} [3l_x (l_y^2 - l_z^2) + 2m_x (l_y m_y - l_z m_z) + l_x (m_y^2 - m_z^2)] \\ &\quad + \delta_{iy} [3l_y (l_z^2 - l_x^2) + 2m_y (l_z m_z - l_x m_x) + l_y (m_z^2 - m_x^2)] \\ &\quad + \delta_{iz} [3l_z (l_x^2 - l_y^2) + 2m_z (l_x m_x - l_y m_y) + l_z (m_x^2 - m_y^2)] \end{aligned} \quad (C.8)$$

$$\begin{aligned} S_i^{(1)} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} [3m_j m_r m_s + (l_j l_r m_s + l_r l_s m_j + l_s l_j m_r)] \\ &= \delta_{ix} [3m_x (m_y^2 - m_z^2) + 2l_x (l_y m_y - l_z m_z) + m_x (l_y^2 - l_z^2)] \\ &\quad + \delta_{iy} [3m_y (m_z^2 - m_x^2) + 2l_y (l_z m_z - l_x m_x) + m_y (l_z^2 - l_x^2)] \\ &\quad + \delta_{iz} [3m_z (m_x^2 - m_y^2) + 2l_z (l_x m_x - l_y m_y) + m_z (l_x^2 - l_y^2)] \end{aligned} \quad (C.9)$$

$$\begin{aligned} C_i^{(3)} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} [l_j l_r l_s - (l_j m_r m_s + l_r m_s m_j + l_s m_j m_r)] \\ &= \delta_{ix} [l_x (l_y^2 - l_z^2) - 2m_x (l_y m_y - l_z m_z) - l_x (m_y^2 - m_z^2)] \\ &\quad + \delta_{iy} [l_y (l_z^2 - l_x^2) - 2m_y (l_z m_z - l_x m_x) - l_y (m_z^2 - m_x^2)] \\ &\quad + \delta_{iz} [l_z (l_x^2 - l_y^2) - 2m_z (l_x m_x - l_y m_y) - l_z (m_x^2 - m_y^2)] \end{aligned} \quad (C.10)$$

$$\begin{aligned} S_i^{(3)} &= \frac{1}{2} \varepsilon_{ijm} \lambda_{rsm} [-m_j m_r m_s + (l_j l_r m_s + l_r l_s m_j + l_s l_j m_r)] \\ &= \delta_{ix} [-m_x (m_y^2 - m_z^2) + 2l_x (l_y m_y - l_z m_z) + m_x (l_y^2 - l_z^2)] \\ &\quad + \delta_{iy} [-m_y (m_z^2 - m_x^2) + 2l_y (l_z m_z - l_x m_x) + m_y (l_z^2 - l_x^2)] \\ &\quad + \delta_{iz} [-m_z (m_x^2 - m_y^2) + 2l_z (l_x m_x - l_y m_y) + m_z (l_x^2 - l_y^2)] \end{aligned} \quad (C.11)$$

Los productos escalares en (C.7) son

$$\begin{aligned} l_i C_i^{(1)} &= -l_i D_{ij} l_j \\ m_i C_i^{(1)} &= -m_i D_{ij} l_j \\ n_i C_i^{(1)} &= -n_i D_{ij} l_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} l_i S_i^{(1)} &= -l_i D_{ij} m_j \\ m_i S_i^{(1)} &= l_i D_{ij} l_j \\ n_i S_i^{(1)} &= -n_i D_{ij} m_j \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} l_i C_i^{(3)} &= l_i D_{ij} l_j \\ m_i C_i^{(3)} &= 2(n_x m_y m_z + m_x n_y m_z + m_x m_y n_z) + 3n_x n_y n_z \\ n_i C_i^{(3)} &= 3(l_x l_y m_z + l_x m_y l_z + m_x l_y l_z) - 3m_x m_y m_z \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} l_i S_i^{(3)} &= 2(l_x l_y n_z + l_x n_y l_z + n_x l_y l_z) + 3n_x n_y n_z = -m_i C_i^{(3)} \\ m_i S_i^{(3)} &= l_i D_{ij} l_j \\ n_i S_i^{(3)} &= 3(m_x m_y m_z + m_x l_y m_z + l_x m_y m_z) - 3l_x l_y l_z, \end{aligned}$$

de manera que el campo espín-órbita de Dresselhaus, en términos de armónicos angulares es

$$\begin{aligned} \gamma \kappa_l' &= \gamma \kappa_l'^{(1)} + \gamma \kappa_l'^{(3)} \\ &= \beta^{(1)} k' \cos \theta [\delta_{lx} l_i D_{ij} l_i + \delta_{ly} m_i D_{ij} l_j + \delta_{lz} n_i D_{ij} l_j] \\ &\quad + \beta^{(1)} k' \sin \theta [\delta_{lx} l_i D_{ij} m_i + \delta_{ly} m_i D_{ij} m_j + \delta_{lz} n_i D_{ij} m_j] \\ &\quad + \beta^{(3)} k' \cos 3\theta [\delta_{lx} l_i C_i^{(3)} + \delta_{ly} m_i C_i^{(3)} + \delta_{lz} n_i C_i^{(3)}] \\ &\quad + \beta^{(3)} k' \sin 3\theta [\delta_{lx} l_i S_i^{(3)} + \delta_{ly} m_i S_i^{(3)} + \delta_{lz} n_i S_i^{(3)}], \end{aligned} \tag{C.12}$$

donde $\beta^{(1)} = \gamma(\langle k_z'^2 \rangle - k'^2/4)$ y $\beta^{(3)} = \gamma k'^2/4$ como Kammermeier et al. (2016).

Para la dirección especial $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$ con $\hat{\mathbf{m}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(-1, 1, 0)$ y $\hat{\mathbf{l}} = \frac{1}{\sqrt{2}}(n_z, n_z, -2\eta)$,

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'(\mathbf{k}) = \alpha k' \begin{pmatrix} \sin \theta \\ -\cos \theta \\ 0 \end{pmatrix} + \beta^{(1)} k' \begin{pmatrix} b_x^{(1)} \sin \theta \\ b_y^{(1)} \cos \theta \\ b_z^{(1)} \sin \theta \end{pmatrix} + \beta^{(3)} k' \begin{pmatrix} b_x^{(3)} \sin 3\theta \\ b_y^{(3)} \cos 3\theta \\ b_z^{(3)} \sin 3\theta \end{pmatrix} \quad (\text{C.13})$$

donde

$$\mathbf{b}^{(1)} = \begin{pmatrix} (1 + 3\eta^2)n_z \\ (1 - 9\eta^2)n_z \\ -\sqrt{2}\eta(1 - 3\eta^2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(3)} = \begin{pmatrix} (1 - 3\eta^2)n_z \\ -(1 - 3\eta^2)n_z \\ 3\sqrt{2}\eta(1 - \eta^2) \end{pmatrix}. \quad (\text{C.14})$$

Si se consideran solo los términos lineales, se puede notar que la dirección del campo $\boldsymbol{\Omega}'$ deja de depender del vector de onda \mathbf{k} cuando $-\alpha + \beta^{(1)}b_y^{(1)} = 0$ (Kammermeier et al., 2016),

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{R}} + \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}} = \beta^{(1)} k' \sin \theta (3\eta^2 - 1) \begin{pmatrix} -2n_z \\ 0 \\ \sqrt{2}\eta \end{pmatrix}, \quad (\text{C.15})$$

lo que da lugar a una simetría SU(2) del Hamiltoniano. Expresado de otra manera, esto sucede cuando los parámetros del acoplamiento espín-órbita de Rashba y Dresselhaus satisfacen

$$\frac{\alpha}{\beta^{(1)}} = b^{(1)} = (1 - 9\eta^2)\sqrt{1 - 2\eta^2}. \quad (\text{C.16})$$

Kammermeier et al. (2016) ha mostrado que, incluso cuando $\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(3)}$ está presente, es posible obtener una simetría SU(2); esto exclusivamente para las orientaciones [111] y [110] del GE2D. Efectivamente, cuando $\eta = 1/\sqrt{3}$ o $\eta = 1/\sqrt{2}$, $b_y^{(3)} = -(1 - 3\eta^2)\sqrt{1 - 2\eta^2} = 0$, por lo tanto los campos espín-órbita $\hbar\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(3)}/2 = 3\sqrt{2}\eta(1 - \eta^2)\beta^{(3)}k' \sin 2\theta \hat{\mathbf{z}}'$ y $\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{R}} + \boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(1)}$ se vuelven colineales a lo largo de la dirección $\hat{\mathbf{z}}'$

$$\frac{\hbar}{2}[\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{R}} + \boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(1)}] = \begin{cases} 0 & \text{si } \eta = 1/\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\beta^{(1)}k' \sin \theta \hat{\mathbf{z}}' & \text{si } \eta = 1/\sqrt{2} \end{cases}, \quad (\text{C.17})$$

$$\frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(3)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{8}{3}}\beta^{(3)}k' \sin 3\theta \hat{\mathbf{z}}' & \text{si } \eta = 1/\sqrt{3} \\ \frac{3}{2}\beta^{(3)}k' \sin 3\theta \hat{\mathbf{z}}' & \text{si } \eta = 1/\sqrt{2} \end{cases}; \quad (\text{C.18})$$

de otro modo, en general, la colinealidad no es posible debido a $\boldsymbol{\Omega}'_{\mathbf{D}}^{(3)}$.

D Fase de Berry

En este apéndice se repasan los conceptos fundamentales y se obtienen expresiones generales de la fase de Berry. Algunas de estas fórmulas son utilizadas en el Capítulo 7 del texto principal.

Evolución adiabática cíclica

Se considera un sistema cuántico con Hamiltoniano $H(\mathbf{R}(t))$, el cual depende de los parámetros R_1 , R_2 y R_3 , denotados por el vector \mathbf{R} . Aun cuando pueden ser n parámetros, por sencillez se toma \mathbf{R} como un vector tridimensional, lo cual es suficiente cuando se trata un problema de física del estado sólido. El fenómeno que interesa es el de una evolución adiabática del sistema mientras $\mathbf{R}(t)$ se mueve lentamente a lo largo de una trayectoria \mathcal{C} en el espacio de parámetros. Por tal motivo, es necesaria la suposición de que la variación en el tiempo de $\mathbf{R}(t)$ es suficientemente lenta para permitir la aproximación adiabática, es decir, la escala de tiempo de la variación es mucho más grande que la escala de tiempo característica del sistema cuántico. Denotando los eigenestados instantáneos de $H(\mathbf{R})$ como $|n(\mathbf{R})\rangle$ se tiene

$$H(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle = \varepsilon_n(\mathbf{R}) |n(\mathbf{R})\rangle, \quad (\text{D.1})$$

sin embargo, esta ecuación no determina por completo la función base $|n(\mathbf{R})\rangle$; todavía permite una fase arbitraria, factor de $|n(\mathbf{R})\rangle$, que depende de \mathbf{R} . Para deshacerse de la arbitrariedad, puede hacerse una elección de fase, también conocida como *norma* (o en el idioma inglés, *gauge*), para lo cual es necesario que la fase de la función base sea suave y univaluada a lo largo de la trayectoria \mathcal{C} . Incluso si no se satisfacen estos requerimientos a lo largo de la trayectoria completa, puede dividirse en varios segmentos de manera que cada uno de esos segmentos los cumpla (Bernevig y Hughes, 2013).

Debido a la evolución adiabática, el sistema inicialmente en uno de sus eigenestados $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ se mantendrá como un eigenestado instantáneo del Hamiltoniano $H(\mathbf{R}(t))$ durante todo el proceso. Por lo tanto, el único grado de libertad que se tiene es el de la fase del estado cuántico. Al tiempo t el estado del sistema es

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (\text{D.2})$$

donde el segundo exponencial es el factor de fase dinámica, con el cual se interpreta que la energía varía con el tiempo y además da el cambio de fase acumulado. Utilizando la ecuación de Shrödinger

dependiente del tiempo para el estado $|\psi_n(t)\rangle$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = H(\mathbf{R}(t)) |\psi_n(t)\rangle \quad (\text{D.3})$$

y multiplicándola por la izquierda con $\langle n(\mathbf{R}(t))|$, se tiene

$$\begin{aligned} & i\hbar e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))} \langle n(\mathbf{R}(t))| \left\{ \left[i\dot{\gamma}_n(t) - \frac{i}{\hbar} \varepsilon_n(\mathbf{R}(t)) \right] |n(\mathbf{R}(t))\rangle + \frac{\partial}{\partial t} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \right\} \\ & = e^{i\gamma_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \varepsilon_n(\mathbf{R}(t'))} \langle n(\mathbf{R}(t))| H(\mathbf{R}(t)) |n(\mathbf{R}(t))\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

de manera que se encuentra

$$\dot{\gamma}_n(t) = i \langle n(\mathbf{R}(t))| \frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle \quad (\text{D.5})$$

y

$$\gamma_n(t) = i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t'))| \frac{d}{dt'} |n(\mathbf{R}(t'))\rangle dt' \quad (\text{D.6})$$

Además, si se usa

$$\frac{d}{dt} |n(\mathbf{R}(t))\rangle = \sum_i \frac{\partial}{\partial R_i} |n(\mathbf{R})\rangle \frac{dR_i}{dt} = \nabla_R |n(\mathbf{R})\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt} \quad (\text{D.7})$$

γ_n puede escribirse como

$$\begin{aligned} \gamma_n &= i \int_0^t \langle n(\mathbf{R}(t'))| \nabla_R |n(\mathbf{R}(t'))\rangle \cdot \frac{d\mathbf{R}}{dt'} dt' \\ &= \int_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

donde $\mathbf{A}_n(\mathbf{R})$ es

$$\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R})| \nabla_R |n(\mathbf{R})\rangle. \quad (\text{D.9})$$

Esta cantidad, parecida a un “potencial vectorial”, es llamada *potencial vectorial de Berry*, *campo gauge de Berry*, o la *conexión de Berry*.

Como se mencionaba, siempre era supuesto que $\gamma_n(t)$ podía ser eliminada mediante una nueva definición de la fase arbitraria del eigenestado $|n(\mathbf{R}(t))\rangle$. Si se elije, por ejemplo, $|n'(\mathbf{R}(t))\rangle = e^{i\chi(\mathbf{R}(t))} |n(\mathbf{R}(t))\rangle$, se tiene

$$\mathbf{A}'_n(\mathbf{R}) = \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_R \chi(\mathbf{R}) \quad (\text{D.10})$$

por lo tanto $\dot{\gamma}'_n(t) = \dot{\gamma}_n(t) - \dot{\chi}$, y

$$\gamma'_n = \gamma_n - [\chi(T) - \chi(0)] \quad (\text{D.11})$$

donde $\mathbf{R}(0)$ es el punto inicial de la trayectoria \mathcal{C} , mientras que $\mathbf{R}(T)$ es el punto final. De esta manera a la fase γ_n se le resta el término $\chi(\mathbf{R}(0)) - \chi(\mathbf{R}(T))$ después de la transformación, lo cual sugiere la posibilidad de poder elegir $\chi(\mathbf{R})$ de modo que neutralice completamente la fase γ_n . La conclusión era que siempre podía elegirse una $\chi(\mathbf{R})$ tal que esta cancelara a la γ_n acumulada a lo largo de la trayectoria \mathcal{C} , dejando al estado del sistema únicamente con la fase dinámica. Esto provocó que durante mucho tiempo se ignorara esta fase en los estudios teóricos de problemas dependientes del tiempo.

Fue hasta 1984 en que, Michael Victor Berry, se dio cuenta que dicha fase es *observable* cuando el tiempo de evolución lleva al vector de parámetros $\mathbf{R}(t)$ de vuelta al punto inicial, es decir $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$. Berry reconsideró la evolución del sistema a lo largo de una trayectoria cerrada \mathcal{C} en el espacio de parámetros, por lo que la fase

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \quad (\text{D.12})$$

es llamada *Fase de Berry*.

Si se lleva a cabo la transformación de norma

$$|n(\mathbf{R})\rangle \rightarrow |n'(\mathbf{R})\rangle = e^{i\chi(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle \quad (\text{D.13})$$

y $\chi(\mathbf{R})$ satisface las condiciones de suavidad y valor único, entonces $\chi(\mathbf{R}(0)) - \chi(\mathbf{R}(T)) = 2\pi n$, donde n es un número entero. Esto muestra que γ_n sólo puede ser modificada en múltiplos de 2π por la transformación de norma y no puede ser anulada, como se esperaba inicialmente, al menos que sea esta misma un múltiplo de 2π . En consecuencia, para una trayectoria cerrada, γ_n se vuelve una cantidad física invariante de norma potencialmente observable.

Curvatura de Berry

La invariancia de γ_n puede ser verificada mediante el teorema de Stokes

$$\begin{aligned} \gamma_{n'} &= \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}_{n'}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{R} \\ &= \iint_{\mathcal{S}} \nabla_R \times \mathbf{A}_{n'}(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \\ &= \iint_{\mathcal{S}} d\mathbf{S} \cdot \nabla_R \times [\mathbf{A}_n(\mathbf{R}) - \nabla_R \chi(\mathbf{R})] \\ &= \iint_{\mathcal{S}} \nabla_R \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \\ &= \gamma_n \end{aligned} \quad (\text{D.14})$$

donde \mathcal{S} es una superficie arbitraria encerrada por la trayectoria \mathcal{C} . Mientras que la fase de Berry en algún sistema bien podría ser igual a cero, es decir $e^{i\gamma_n} = 1$, en esta demostración se prueba que no es afectada por una redefinición de las fases de los vectores de estado. En analogía con electrodinámica, aquí es útil definir un objeto que asimila a un campo magnético,

$$\mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) = \nabla_R \times \mathbf{A}_n(\mathbf{R}), \quad (\text{D.15})$$

el cual es conocido como la *curvatura de Berry*. Esta cantidad permite escribir γ_n como

$$\gamma_n(\mathcal{C}) = \iint_{\mathcal{S}} \mathbf{\Omega}_n(\mathbf{R}) \cdot d\mathbf{S} \quad (\text{D.16})$$

donde, siguiendo la analogía, la fase de Berry es entonces el flujo del “campo magnético”.

Debido a que $|n(\mathbf{R})\rangle$ está normalizado para todo \mathbf{R} , al aplicar el gradiente a la relación $\langle n|n\rangle = 1$ se obtiene

$$\begin{aligned} 0 &= \nabla_R \langle n|n\rangle \\ &= \langle \nabla_R n|n\rangle + \langle n|\nabla_R n\rangle \\ &= (\langle n|\nabla_R n\rangle)^* + \langle n|\nabla_R n\rangle \\ &= 2 \operatorname{Re} \langle n|\nabla_R n\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

y \mathbf{A}_n puede escribirse como

$$\mathbf{A}_n = -\operatorname{Im} \langle n|\nabla_R n\rangle. \quad (\text{D.18})$$

Esto muestra que, como debe ser, $\gamma_n(\mathcal{C})$ es real

$$\begin{aligned} \gamma_n(\mathcal{C}) &= \iint_{\mathcal{S}} d\mathbf{S} \cdot \nabla_R \times \mathbf{A}_n \\ &= -\operatorname{Im} \iint_{\mathcal{S}} d\mathbf{S} \cdot \nabla_R \times \langle n|\nabla_R n\rangle \\ &= -\operatorname{Im} \iint_{\mathcal{S}} d\mathbf{S} \cdot \langle \nabla_R n| \times |\nabla_R n\rangle \end{aligned} \quad (\text{D.19})$$

puesto que $\nabla_R \times |\nabla_R n\rangle = 0$.

Aplicando el rotacional a (D.18), la curvatura de Berry es

$$\begin{aligned}\Omega_n &= -\text{Im} \langle \nabla_R n | \times | \nabla_R n \rangle \\ &= i \langle \nabla_R n | \times | \nabla_R n \rangle\end{aligned}\quad (\text{D.20})$$

donde el segundo renglón es debido a que $\langle \nabla_R n | \times | \nabla_R n \rangle$ es únicamente imaginario.

Otra forma útil de la curvatura de Berry puede obtenerse insertando un juego completo de estados intermediarios

$$\sum_m |m(\mathbf{R}(t))\rangle \langle m(\mathbf{R}(t))| = 1, \quad (\text{D.21})$$

lo que da

$$\Omega_n = -\text{Im} \sum_{m \neq n} \langle \nabla_R n | m \rangle \times \langle m | \nabla_R n \rangle. \quad (\text{D.22})$$

Se ha omitido el término $m = n$ debido a que no tiene parte imaginaria por la falta de parte real de $\langle n | \nabla_R n \rangle$. Para encontrar $\langle m | \nabla_R n \rangle$ se toma el gradiente de ambos lados de (D.1) y se proyecta sobre el estado $|m(\mathbf{R})\rangle$ de manera que se tiene

$$\langle m | \nabla_R (H | n \rangle) = \langle m | \nabla_R H | n \rangle + \langle m | H | \nabla_R n \rangle \quad (\text{D.23})$$

$$\langle m | \nabla_R (\varepsilon_n | n \rangle) = \langle m | \nabla_R \varepsilon_n | n \rangle + \langle m | \varepsilon_n | \nabla_R n \rangle. \quad (\text{D.24})$$

Como $\langle m | H = \varepsilon_m \langle m |$ esto se reduce a

$$\begin{aligned}(\varepsilon_n - \varepsilon_m) \langle m | \nabla_R n \rangle &= \langle m | \nabla_R H | n \rangle - [\nabla_R \varepsilon_n(\mathbf{R})] \langle m | n \rangle \\ &= \langle m | \nabla_R H | n \rangle\end{aligned}\quad (\text{D.25})$$

para $m \neq n$.

Sustituyendo este resultado en (D.20) se obtiene

$$\begin{aligned}\Omega_n &= -\text{Im} \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla_R H | m \rangle \times \langle m | \nabla_R H | n \rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2} \\ &= i \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \nabla_R H | m \rangle \times \langle m | \nabla_R H | n \rangle}{(\varepsilon_n - \varepsilon_m)^2};\end{aligned}\quad (\text{D.26})$$

esta expresión muestra que la curvatura de Berry Ω_n es singular en puntos de degeneración en el espacio de parámetros, donde las energías del denominador se anulan. Haciendo analogía, estos puntos son como

monopolos magnéticos, fuentes del campo \mathbf{B} , y la fase de Berry es el flujo asociado a estas fuentes; además, son muy interesantes debido a su fuerte relación con la topología del sistema (Garg, 2010). La ecuación (D.26) también tiene la ventaja de no involucrar ninguna diferenciación sobre la función de onda, por lo que puede ser evaluada incluso realizando un cambio de norma.