

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



**Maestría en Ciencias
en Nanociencias**

**Respuesta óptica de un gas electrónico magnetizado con
acoplamiento de Rashba**

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

Presenta:

Edmundo Fernández Méndez

Ensenada, Baja California, México
2021

Tesis defendida por
Edmundo Fernández Méndez

y aprobada por el siguiente comité

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova
Director de Tesis

Miembros del comité

Dr. Ernesto Cota Araiza

Dra. Karina Garay-Palmett



Dr. José Manuel Romo Herrera
Coordinador del Posgrado en Nanociencias

Dr. Pedro Negrete Regagnon
Director de Estudios del Posgrado

Edmundo Fernández Méndez © 2021

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 **Edmundo Fernández Méndez** como requisito parcial para la obtención del grado de Maestro en Ciencias en Nanociencias.

Respuesta óptica de un gas electrónico magnetizado con acoplamiento de Rashba

Resumen aprobado por:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdoba
Director de Tesis

Se estudia la respuesta óptica de un gas electrónico bidimensional (2D) magnetizado con acoplamiento espín-órbita de Rashba. El estudio se basa en el cálculo del tensor de conductividad óptica dentro del formalismo perturbativo de Kubo. La magnitud y dirección de la magnetización $\mathbf{H}$ (o equivalentemente, desde un punto de vista formal, de un campo magnético externo) permite modificar la forma de las superficies de energías así como la topología de los contornos de Fermi. Se obtienen expresiones para una dirección arbitraria y se presentan resultados numéricos para dos casos distintos y emblemáticos: (i) magnetización orientada perpendicularmente al plano del gas ($\mathbf{H} \parallel \hat{z}$), de modo que la estructura de bandas presenta una brecha energética prohibida, y (ii) una magnetización orientada en el plano del gas ($\mathbf{H} \perp \hat{z}$), que da origen a bandas desdobladas en espín pero sin brecha prohibida absoluta. Se calcula la densidad conjunta de estados en cada caso y se identifican las singularidades de van Hove. Esto permite explicar las características espectrales de la conductividad óptica en función de los estados disponibles para transiciones interbanda según la posición del nivel de Fermi. La contribución intrabanda también se calcula, de modo que se obtiene el tensor de conductividad completo. En el primer caso, la presencia de la brecha da lugar a una componente transversal no nula, lo que permite tener un espectro de dicroísmo circular, entre otras propiedades ligadas al rompimiento de la simetría de inversión temporal. En el segundo caso, el espectro de absorción depende sensiblemente de la dirección de la magnetización en el plano del gas. Además de la dependencia de la frecuencia y de los parámetros materiales del sistema, la magnitud y orientación de la magnetización representan un elemento de control de las propiedades ópticas importante. Este estudio sugiere también la posibilidad de manipular similarmente corrientes de espín, aspecto relevante en la espintrónica de semiconductores.

Palabras clave: Espín-órbita, espintrónica, conductividad óptica, dicroísmo, propiedades ópticas..

Abstract of the thesis presented by **Edmundo Fernández Méndez** as a partial requirement to obtain the Master of Science in Nanoscience.

Optical response of a magnetized electronic gas with Rashba coupling

Abstract approved by:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdoba
Thesis Director

The optical conductivity tensor of a magnetized two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction is considered within the Kubo formalism. The magnitude and direction of the magnetization H (or of an external magnetic field) allows to control the energy band surfaces and the topology of the Fermi contours. We derive expressions for an arbitrary direction and present numerical results for two contrasting cases: (i) the magnetic field oriented perpendicularly to the plane of the gas ($\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$), which breaks the time-reversal symmetry of the system, and (ii) an in-plane field ($\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$), where the band structure presents energy spin-splitting but without an absolute energy gap. The joint density of states is studied in each case to identify van Hove singularities. This allows to explain the spectral features displayed by the optical conductivity tensor in terms of the momentum space available for interband transitions according to the position of the Fermi level. The intraband contribution is also calculated. In the first case, the presence of an absolute gap leads to a non vanishing Hall component, which manifests as a spectrum of circular dichroism among other optical properties. In the second case, the absorption spectra depend strongly on the direction of H on the plane. Besides the frequency and material parameters dependence, the magnetization field vector introduces additional elements of control of optical properties through its magnitude and direction. Our results suggest the possibility of manipulation of spin currents as well, which is relevant to the field of semiconductor spintronics.

Keywords: Spin-orbit, spintronics, optical conductivity, dichroism, optical properties.

Dedicatoria

A mi familia

Agradecimientos

Ante todo, al profesor Jesús Alberto Maytorena Córdova por darme la oportunidad de trabajar con este proyecto y el compromiso mostrado con este proyecto de tesis. En este momento no me alcanzan las palabras para expresar mi eterno agradecimiento por su apoyo para sacar adelante este proyecto, por brindarme su conocimiento, su guía y estar pendiente para finalmente, materializarlo en este trabajo. Ha sido de las experiencias más gratas, interesantes e invaluable el trabajar bajo su dirección, incluso divertido. Muchísimas gracias.

Igualmente, agradezco al profesor Ernesto Cota Araiza y la profesora Karina Garay-Palmett por haber sido parte de este comité de tesis, por su apoyo en los avances de tesis y con las observaciones en la revisión de este trabajo escrito, el cual ayudaron en la mejora y refinamiento de este trabajo.

Al personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología de la UNAM, tanto docente como administrativo y en particular Laura Adriana Rosales Vásquez, coordinadora del posgrado en Nanociencias por todo su apoyo, orientación y paciencia en todas las idas y vueltas con todos los trámites realizados durante esta etapa, así como al personal del Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada por las facilidades brindadas para la realización de este trabajo y más recientemente, con el proceso de titulación para finalizar esta travesía, muchas gracias.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por brindarme el apoyo económico para realizar mis estudios de posgrado. No. de becario 899301.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español.	i
Resumen en inglés.	ii
Dedicatoria.	iii
Agradecimientos.	iv
Lista de figuras	vii
Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Antecedentes	5
1.1.1 Espintrónica en semiconductores	5
1.2 Espintrónica en semiconductores: Interacción espín-órbita de Rashba	7
1.3 Modelo de Rashba magnetizado	9
1.4 Hipótesis	12
1.5 Objetivos	13
1.5.1 Objetivo general	13
1.5.2 Objetivos específicos	13
Capítulo 2. Conductividad óptica de un sistema genérico de dos bandas	14
2.1 Hamiltoniano genérico de dos bandas	14
2.2 Propiedades espectrales	15
2.3 Fórmula de Kubo para el tensor de conductividad	16
2.4 Absorción óptica	23
Capítulo 3. Gas electrónico 2D con acoplamiento Rashba en un campo de magnetización	25
3.1 Hamiltoniano de un GE2D con acoplamiento Rashba en un campo de magnetización con dirección arbitraria	25
3.2 Propiedades del estado base	26
3.2.1 Espectro de energías, espinores, polarización de espín	26
3.2.2 Contornos de Fermi y frecuencias críticas cuando $\varepsilon_F > H$	28
3.3 Densidad conjunta de estados	31
Capítulo 4. H perpendicular al plano del GE2D	35
4.1 Propiedades del estado base	35
4.1.1 Eigenenergías, espinores y polarización de espín	35
4.1.2 Contornos de Fermi	37
4.2 Densidad conjunta de estados	40
4.3 Conductividad óptica	43
4.4 Dicroísmo circular	49
Capítulo 5. H orientado en el plano del GE2D	51
5.1 Propiedades del estado base	51
5.1.1 Eigenenergías, espinores y polarización de espín	51
5.1.2 Contornos de Fermi y frecuencias críticas	52
5.2 Densidad conjunta de estados	58

5.3	Conductividad óptica	62
5.4	Dicroísmo lineal	72
Capítulo 6. Conclusiones		75
Literatura citada		78
Anexos		82
1.1	Solución a la ecuación $x^4 + ax^2 + bx + c = 0$ para los valores $k_F^\lambda(\theta; \phi_0)$	82
1.1.1	Caso $\varepsilon_F > H$	85
1.1.2	Caso $ \varepsilon_F < H$	86
1.1.3	Caso $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < - H $	86
1.2	Frecuencias críticas para el caso $\varepsilon_F > H$	87
1.2.1	Frecuencia máxima y frecuencia mínima de transición	87
1.2.2	Frecuencias ω_1 y ω_2	89

Lista de figuras

Figura	Página
1	Dispersiones de energía para un sistema electrónico 2D a) con TR + SIS, b) sin TR con SIS, c) sin TR + SIS (figura tomada de Picozzi, 2020). 8
2	Gas electrónico 2D (en gris) sujeto a un campo externo $\mathbf{H}$, cuya dirección está especificada por los ángulos polar θ_0 y azimutal ϕ_0 . Se desea investigar la corriente eléctrica inducida en este sistema por un campo eléctrico externo $\mathbf{E}$ paralelo al plano del gas y de dirección arbitraria. 26
3	Bandas de energía para un GE2D con IEO Rashba y magnetizado descrita por el modelo (55), para un campo $\mathbf{H}$ en la dirección $\theta_0 = \pi/5$, $\phi_0 = \pi/3$. Adviértase la anisotropía en la separación así como la curva de energía constante proyectada sobre el plano $k_x - k_y$ 26
4	Bandas de energía $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k})$ en la dirección $\theta = 5\pi/6$ con el campo $H = 2.25$ meV, $\theta_0 = \pi/3$ y $\phi_0 = \pi/4$. Las figuras de la izquierda y el centro corresponden a la situación $\varepsilon_R < H$. En la derecha, la condición $\varepsilon_R > H$ permite la aparición de dos mínimos locales en la banda $\varepsilon_{-}(\mathbf{k})$. La posición del nivel de Fermi ε_F (línea horizontal) permite adivinar los diferentes contornos de Fermi en cada caso y anticipar las respectivas regiones disponibles para transiciones ópticas. 27
5	Orientación de espín en cada banda, dibujada sobre los contornos de Fermi para $H = 0$ (izquierda) y dos direcciones θ_0 distintas, con $\phi_0 = \pi/3$, $\theta_0 = \pi/3$ (centro) y $\theta_0 = \pi/6$ (derecha), donde $k_0 = \sqrt{2\pi N}$ es el vector de Fermi en ausencia de IEO y $\mathbf{H}$. Es importante aclarar que para el caso $\varepsilon_R < H$ y de ahora en adelante, en este trabajo se hará uso de valores en los parámetros para heterouniones basadas en InAs, Rashba $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm (a menos que se indique lo contrario), densidad electrónica $N = 2 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$. La masa efectiva $m = 0.38m_e$ se basa en las mediciones tomadas por Markelz (Markelz, 1996). 28
6	Contornos de Fermi y curvas de resonancia para un GE2D magnetizado con interacción Rashba con $H > \varepsilon_R$ en la dirección $\phi_0 = \pi/6$, $\theta_0 = \pi/3$. Las curvas en color azul (rojo) representa la banda $\varepsilon_{-}(\mathbf{k})$ ($\varepsilon_{+}(\mathbf{k})$) y la curva en color negro representa $C_r(\omega)$ para las frecuencias a) $\omega_{\min}$, b) ω_1 , c) ω_2 y d) $\omega_{\max}$. Los valores empleados son $H = 2.25$ meV, $\varepsilon_F = 12.5$ meV. 32
7	Densidad conjunta de estados (izquierda) para una dirección $\phi_0 = \pi/6$ y $\theta_0 = \pi/3$ donde se refleja claramente el aspecto anisotrópico de la separación entre las bandas y distribución angular de frecuencias (derecha), donde la zona sombreada en la distribución angular de frecuencias indica las regiones angulares que contribuyen a la densidad conjunta de estados para una frecuencia dada. Los parámetros son los mismos que lo empleados en la figura 6. 34
8	Proyección en el plano $k_x k_y$ de la polarización de espín cuando $H = 0$ (izquierda) y para el caso $\mathbf{H} = H_z \hat{\mathbf{z}}$ (derecha). Si $H_z \neq 0$, cada banda presenta una polarización de espín neta en la dirección $\lambda \hat{\mathbf{z}}$ 36
9	Bandas de energía para distintos valores de la energía de Fermi (línea color verde), con $\alpha = 20 \times 10^{-11}$ eVm y un campo magnético $H_z = 3$ meV, con $\varepsilon_R > H_z$. Se puede ver como cambia la región en el espacio $\mathbf{k}$ donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia el nivel de Fermi. 36

- 10 Energías y contornos de Fermi con distintos valores de energía de Fermi ε_F y magnetización H_z para el caso en el cual $\varepsilon_F > H_z$ y $\varepsilon_R < H_z$, donde $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm. Se puede ver como cambia la región donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia la magnitud de magnetización H 38
- 11 Energías y contornos de Fermi con distintos valores de energía de Fermi ε_F y magnetización H_z para el caso $\varepsilon_F > H_z$ y $\varepsilon_R < H_z$, donde $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm. Se puede ver como cambia la región donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia H 39
- 12 Contornos de Fermi para distintas posiciones del nivel de Fermi. En la figura de la izquierda, el interior del círculo corresponde al espacio disponible para transiciones interbanda, de acuerdo al principio de Pauli. En las figuras del centro y a la derecha, dicha región corresponde al espacio anular entre los contornos de Fermi. Nótese que en el caso de la derecha el nivel de Fermi corta solo y dos veces la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. Los valores de la energía de Fermi son de $\varepsilon_F = -1$ meV (izquierda), $\varepsilon_F = 8$ meV (centro) y $\varepsilon_F = -8$ meV (derecha) para un $H_z = 3$ meV y $\alpha = 20 \times 10^{-11}$ eVm. 40
- 13 Densidad conjunta de estados para tres posiciones de la energía de Fermi, donde $\varepsilon_R > H_z$. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12. 42
- 14 Mapa de intensidad de la densidad conjunta de estados para la frecuencia ω contra energía de magnetización H_z (en meV) con tres distintos valores de la energía de Fermi para los tres casos de estudio presentes cuando $\varepsilon_R > H_z$. Se puede ver la evolución del número de transiciones ópticas permitidas conforme cambia el cociente ε_F/H_z . Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12. 42
- 15 Mapa de intensidad para la densidad conjunta de estados para frecuencia ω contra energía de Fermi ε_F (en meV) para una energía de magnetización $H_z = 3$ meV para los tres casos de estudio presentes cuando $\varepsilon_R > H_z$. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12. 42
- 16 Componentes disipativas del tensor de conductividad $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ y $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$. Puede verse como a bajas frecuencias se da un máximo (mínimo) en la absorción para la componente $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ ($\text{Im } \sigma_{xx}(\omega)$) para las tres distintas posiciones de la energía de Fermi. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12. 46
- 17 Componente disipativa $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ como función de la frecuencia y energía de Fermi, en los intervalos especificados de ésta, cuando $H_z = 3$ meV y $\varepsilon_R > H_z$. Nótese una evolución similar del espectro para todas las componentes a medida que varía el cociente H_z/ε_F , alcanzando una amplitud máxima a bajas frecuencias. 47
- 18 Componente disipativa $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$ como función de la frecuencia y energía de Fermi, en los intervalos especificados de ésta, cuando $H_z = 3$ meV y $\varepsilon_R > H_z$. Véase como la evolución del espectro indica una absorción en todo el ancho de banda, con máximos en la amplitud a menores frecuencias. 47
- 19 Componente disipativa $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ como función de la frecuencia ω y energía de magnetización H_z (meV) para tres distintos valores de energía de Fermi. En los tres casos, se nota un máximo en el pico de absorción a bajas frecuencias a medida que $H_z \rightarrow |\varepsilon_F|$ 48

- 20 Componente disipativa $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$ como función de la frecuencia ω y energía de magnetización H_z (meV) para tres distintos valores de ε_F . Se puede ver el característico pico de absorción a bajas frecuencias, cuando $H_z/|\varepsilon_F| \approx 1$, mostrando un mayor cambio en la amplitud en este caso respecto a las componentes reales. 48
- 21 Parte real de la conductividad $\sigma_{\pm}(\omega)$ para polarización circular $\mathbf{E}_{\pm}(\omega)$. Los valores en los parámetros son los mismos que en la figura 16. 49
- 22 Bandas de energía y contornos de Fermi para $H = H_0 = \alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar \approx 2.25$ meV, con $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm y $\varepsilon_R < H$; $k_0 = \sqrt{2\pi N} \approx 1.12 \times 10^8$ m $^{-1}$. Se puede ver la degeneración en las bandas de energía al nivel de Fermi en la dirección $\theta = 5\pi/3$ a una energía $\bar{\varepsilon} = 12.5$ meV = ε_F 52
- 23 Orientación del espín en las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ (azul) y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (rojo) cuando no hay campo (izquierda) y cuando el campo está en el plano del gas en la dirección $\phi_0 = \pi/6$ (derecha) donde $\varepsilon_R < H$ ($\varepsilon_R = 0.2$ meV), la energía de magnetización es $H = 2.9$ meV. Habrá un punto de contacto entre las bandas en la dirección $\theta = 5\pi/3$ 53
- 24 Bandas de energía en varias direcciones θ para $\phi_0 = \pi/3$ y varios valores del nivel de Fermi ε_F , con $\alpha = 20 \times 10^{-11}$ eVm (figuras a, b) y $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm (figura c) con $H = 4.75$ meV en todos los casos. Las líneas en color verde representan la energía de Fermi, las líneas punteadas en color anaranjado (negro), indican $\bar{\varepsilon} = H^2/2\varepsilon_R$ ($H_0 = \alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar$), donde $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2$ es la energía característica del acoplamiento Rashba. Se puede ver que a medida que varía el nivel de Fermi, cambia la región en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones ópticas. En los casos a) $\varepsilon_F = -3$ meV ($H_0 = 11$ meV, $\bar{\varepsilon} = 0.56$ meV) y b) $\varepsilon_F = 10$ meV ($H_0 = 20$ meV, $\bar{\varepsilon} = 0.56$ meV) se tiene $\varepsilon_R > H$ y c) $\varepsilon_F = 3$ meV ($H_0 = 1.1$ meV, $\bar{\varepsilon} = 56$ meV). 53
- 25 Contornos de Fermi para distintas posiciones del nivel de Fermi un campo magnético en el plano. Se observa como cambia la región del espacio $\mathbf{k}$ disponible para transiciones ópticas en tanto que cambia el nivel de Fermi. Los parámetros son los mismos que en la figura 24. 55
- 26 Energías y contornos de Fermi para una dirección de magnetización fija $\phi_0 = \pi/6$ y dos valores de su magnitud, por arriba ($H = 0.5H_0$) y por debajo ($H = 1.3H_0$) de $H_0 = 1.23$ meV. Los parámetros son los mismos que la figura 22, donde se tiene $\bar{\varepsilon} = 3.125$ meV para $H = 0.5H_0$ y $\bar{\varepsilon} = 21.125$ meV para $H = 1.3H_0$ 56
- 27 Contornos de Fermi y curvas de resonancia $C_r(\omega)$ para un gas electrónico 2D con IEO Rashba magnetizado, donde las curvas en color negro corresponden a la curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por (127), correspondientes a la situación $H > \varepsilon_R$ para el caso $H < H_0$. A una frecuencia dada, solo aquellos estados cuyos vectores de onda caen sobre el arco de la curva de resonancia contenido dentro de la región encerrada por los contornos de Fermi están disponibles para transiciones verticales y contribuirán a la respuesta óptica. Tal restricción es consecuencia de los principios de exclusión y conservación de energía. Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 6, tomando el ángulo de magnetización $\theta_0 = \pi/2$ 57

- 28 Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para transiciones verticales en función de la frecuencia para una energía de magnetización $H = 0.3H_0 \approx 0.675$ meV, una $\varepsilon_F = 12.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} \approx 2.8$ meV y $\hbar\omega_{\max} \approx 6.3$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 3.5$ meV, donde $\varepsilon_R < H$ 59
- 29 Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para $H = 0.5H_0 \approx 1.125$ meV una $\varepsilon_F = 12.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} = 2$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 7.3$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 5.3$ meV y $\varepsilon_R < H$ 59
- 30 Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para $H = 0.3H_0 \approx 1.125$ meV una $\varepsilon_F = 7.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} = 2.1$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 5$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV y $\varepsilon_R < H$ 60
- 31 Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para la dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/8$. Los parámetros son los mismos que en la figura 28. 60
- 32 Densidad conjunta de estados como función de la frecuencia y la energía de Fermi ε_F para $H = 0.3H_0 = 0.675$ meV (izquierda), y como función de la energía de magnetización H para $\varepsilon_F = 12.5$ meV (derecha) con una dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$. En la figura izquierda se puede ver la presencia de máximos en todo el ancho de banda de absorción, los cuales se encuentran dados a las frecuencias ω_1 y ω_2 , mientras que en la figura derecha, las líneas indican las frecuencias $\omega_{\min}$ (línea roja), $\omega_{\max}$ (línea verde), así como las singularidades de van Hove ω_1 (línea blanca), ω_2 (línea amarilla). 61
- 33 Parte real de la conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$, con (izquierda) y sin (derecha) la contribución intrabanda. La energía de Fermi es $\varepsilon_F = 7.5$ meV, el campo $H = 0.5H_0$ y el ángulo $\phi_0 = \pi/3$. Se puede notar que la contribución intrabanda resulta domina respecto a la contribución Drude. 66
- 34 Parte real de la conductividad interbanda para para distintas direcciones de magnetización ϕ_0 con $H = 0.5H_0 = 1.1$ meV ($H_0 \approx 2.25$ meV), $\varepsilon_F = 12.5$ meV y $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eV m. Nótese como la dirección de $\mathbf{H}$ modifica el espectro de manera notable a medida que incide paralela y perpendicularmente a la dirección de $\mathbf{E}$. Las frecuencias son $\hbar\omega_{\min} = 2$ meV, $\hbar\omega_1 = 3.4$ meV, $\hbar\omega_2 = 5.2$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 7.4$ meV y un ancho de banda de absorción de $\Delta\varepsilon \approx 5.4$ meV. 66
- 35 Parte real de la conductividad interbanda para una dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$, con $\varepsilon_F = 12.5$ meV y $H_0 = 2.2$ meV. Véase como cambia la forma del espectro a razón que cambia H/H_0 , lo cual conduce a una menor amplitud en la conductividad a medida que incrementa el ancho de banda de absorción, los cuales en este caso son de $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV para $H = 0.3H_0$ (izq.) a $\Delta\varepsilon \approx 5.2$ meV para $H = 0.9H_0$ (der.) 67
- 36 Parte real de la conductividad interbanda para la dirección $\phi_0 = \pi/3$ para distintos valores de ε_F con una energía $H = 0.3H_0$. Advértase como cambia el ancho de banda absorción con valores mayores de ε_F , el cual pasa de $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV, donde $H_0 = 1.73$ meV (izq.) a $\Delta\varepsilon \approx 3.6$ meV, siendo en este caso $H_0 = 2.2$ meV (der.). 67

- 37 Componentes reales de la conductividad (154) como función de ω y H (b), c) y d)) y frecuencias críticas $\omega_{\min}$, $\omega_{\max}$ y singularidades de van Hove ω_1 y ω_2 como función del campo magnético $H(H_0)$ a) para una energía de Fermi de 12.5 meV. El valor de H esta dado en unidades de $H_0 = \alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar \approx 2.2\text{meV}$. Se puede ver como las componentes diagonales de $\text{Re}\sigma_{ij}(\omega)$ alcanzan el valor máximo dentro del régimen $H < \varepsilon_R$, mientras que las componentes Hall prácticamente se anulan dentro de este régimen. 68
- 38 Componentes reales de la conductividad (154) en la dirección $\phi_0 = \pi/3$ para distintos valores de ω y ε_F , con $H = 2 \text{ meV}$ con $H > \varepsilon_R$. El cociente H/ε_F es el factor que determina el valor de la amplitud en $\text{Re}\sigma_{ij}(\omega)$, donde tal valor será mayor a razón que $H/\varepsilon_F \approx 1$. Se aprecia una mayor amplitud en la componente $\text{Re}\sigma_{yy}(\omega)$ respecto a las componentes $\text{Re}\sigma_{xx}(\omega)$, $\text{Re}\sigma_{xy}(\omega)$, por la dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$ 69
- 39 Componentes reales de la conductividad (154) en la dirección $\phi_0 = \pi/6$ con un valor $H = 4 \text{ meV}$ para distintos valores de ω y ε_F , con $H > \varepsilon_R$. Se observa una mayor amplitud en la componente $\sigma_{xx}(\omega)$ respecto a las componentes $\sigma_{yy}(\omega)$, $\sigma_{xy}(\omega)$, debido a la dirección de H . A razón que aumenta la energía de Fermi, incrementará el espacio $\mathbf{k}$ para las transiciones entre las bandas de energía $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, aunque la amplitud disminuye. 69
- 40 Componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y el ángulo de magnetización ϕ_0 para $H = 0.3H_0$. Adviértase un aspecto distintivo para cada uno de los espectros en los tres casos presentes, la cual permite la posibilidad de modular la conductividad como función de ϕ_0 cada múltiplo de π . Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 34. 70
- 41 Mapa de intensidad de las componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y el ángulo de magnetización ϕ_0 . La energía de magnetización $H = 0.9H_0$ permite la existencia de un pico en la absorción para valores de energía cercanos al valor mínimo. Los parámetros empleados son los mismos de la figura 34. 70
- 42 Mapa de intensidad de las componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y ϕ_0 para un valor $H = 1.5H_0$. Adviértase como a medida que aumenta la magnitud de H , el desplazamiento en las frecuencias provoca que la región cóncava aumente y en consecuencia, el espectro solo presentará un pico en la absorción, es decir, valores máximos a frecuencias mayores. De esta forma, se puede advertir que el espectro de conductividad solo tomará una forma distinta a la mostrada en la figura 40 a medida que H/H_0 tome valores mayores a la unidad. Los parámetros empleados son los mismos de la figura 34. 71
- 43 Parte real de la conductividad óptica para luz linealmente polarizada para distintos valores de magnetización, véase como cambia el espectro de absorción a medida que cambian los valores relativos de energía de magnetización H y energía de Fermi ε_F . Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 35. 73
- 44 Parte real de la conductividad óptica para luz linealmente polarizada para distintas direcciones de magnetización ϕ_0 y polarización ζ . Nótese como existe una modulación en la absorción para distintas direcciones del campo $\mathbf{E}$, lo cual brinda la posibilidad de manipular la absorción en función de las direcciones relativas de ϕ_0 y ζ . Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 34. 74

Lista de acrónimos

- | | | |
|-----|------|--------------------------------|
| 1. | 0D | Cero-dimensional |
| 2. | 1D | Unidimensional |
| 3. | 2D | Bidimensional |
| 4. | 3D | Tridimensional |
| 5. | GE2D | Gas electrónico bidimensional |
| 6. | IEO | Interacción espín-órbita |
| 7. | SIS | Simetría de inversión espacial |
| 8. | TRS | Simetría de inversión temporal |
| 9. | RCP | Luz circular derecha |
| 10. | LCP | Luz circular izquierda |

Capítulo 1. Introducción

Comprender los mecanismos que gobiernan o rigen la actividad térmica, mecánica, eléctrica, magnética y óptica de los materiales es crucial para el diseño y elaboración de nuevos dispositivos a nanoescala. Debido a esto, el estudio y comprensión de propiedades como la carga eléctrica, el espín y su influencia conjunta juega un papel relevante para desarrollar los mecanismos que podrían conducir al desarrollo de potenciales aplicaciones tecnológicas. Con esta idea en mente, desde la mitad del siglo XX se están realizando investigaciones en la ciencia e ingeniería de materiales con la finalidad de lograr una óptima manipulación de estas características, hecho que ha conducido al desarrollo de dispositivos que aprovechan algún tipo de propiedad cuántica de la materia, entre los cuales se pueden destacar los semiconductores que aprovechan la carga electrónica para controlar la conductividad, los dispositivos de memoria que utilizan electrones para almacenar información ya sea en forma de números de electrones almacenados en condensadores o mediante corrientes de electrones (esto es, el número de electrones que fluyen en un cable por unidad de tiempo).

Aunque esto ya representa un gran logro de la física de materiales, no se puede dejar de lado el uso de algunas propiedades para potenciar capacidades existentes, como lo es el empleo de propiedades magnéticas para aumentar la capacidad de almacenamiento de información (Castelvecci, 2017) al manipular la orientación del espín para controlar la densidad de flujo magnético, que a su vez conlleva al aumento de la densidad de información almacenada en discos duros, esto gracias al fenómeno conocido como Magnetoresistencia Gigante, propiedad que se observó por primera vez en la válvula de espín (Binasch, 1989; Baibich *et al.*, 1988) por la cual se entregó el premio Nobel de Física en el año 2007 a Albert Fert y Peter Grünberg.

Debido a la imperiosa necesidad de lograr un aumento en la capacidad para transferir y procesar mayores cantidades de información, la ciencia de materiales se ha enfocado en desarrollar nuevas técnicas y dispositivos que aprovechen y potencien más de una propiedad física simultáneamente, las cuales a la vez también presenten una larga vida útil. Para este fin, se han estudiado diversos fenómenos en medios con diversos grados de confinamiento espacial, entre los cuales se pueden mencionar los materiales 0D (como lo son átomos aislados, moléculas o los llamados átomos artificiales o puntos cuánticos como el C_{60} colocado en el gap entre dos electrodos), 1D (nanotubos de carbono), 2D (como lo son capas en los MOSFETs de silicio, hasta las mas recientes heteroestructuras de arseniuro de galio/arseniuro de galio con aluminio ($GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$)) y 3D (metales y semiconductores en bulto), lo cual ha permitido

explotar propiedades eléctricas, magnéticas ú ópticas de esta clase de materiales.

Desde un punto de vista formal, al estudiar propiedades físicas de materiales se pueden definir elementos que permiten describir y cuantificar características de un sistema al ser sometido a algún tipo de estímulo o perturbación externa (por ejemplo, una corriente eléctrica) que lo lleve a un estado fuera del equilibrio, vistas como un tipo de susceptibilidad. En caso de que la perturbación sea lo suficientemente pequeña, se puede hacer una buena aproximación tomando únicamente en consideración el término lineal o a primer orden en la perturbación externa para describir con suficiente fidelidad la respuesta que tendrá el sistema al sufrir una interacción con un agente externo. Entre los tipos de susceptibilidades más conocidas, se puede mencionar la susceptibilidad eléctrica χ_{ij} (relacionada con el *tensor dieléctrico* ϵ_{ij}), la susceptibilidad magnética χ_{ij}^M (relacionada con el tensor de *permeabilidad magnética* μ_{ij}), el tensor de conductividad térmica κ_{ij} (relacionado con un gradiente de temperatura ∇T) o la conductividad óptica σ_{ij} (relacionada con el inverso de la resistividad ρ) (Yehuda, 2013), por mencionar algunas.

Existen distintas maneras para encontrar estos coeficientes, siendo el formalismo de respuesta lineal de Kubo uno de los más conocidos. Con orígenes en el contexto de la mecánica estadística, entre las más célebres aplicaciones se tiene el haber sido empleado por Streda (Streda, 1982) para vincular la conductividad transversal en un gas de electrones 2D al número de niveles de Landau por debajo de la energía de Fermi, y hoy en día se usa para poder describir fenómenos en materiales 2D con algún tipo de conductividad Hall (Shi *et al.*, 2006), entre otras aplicaciones. El formalismo de esta teoría de respuesta lineal se puede encontrar en el artículo de Ryogo Kubo (Kubo, 1957).

Un caso relevante es el de sistemas de baja dimensionalidad que permiten ser descritos por modelos relativamente sencillos, que capturan los elementos mínimos necesarios para una descripción aproximada y aceptable dentro de cierto rango de parámetros materiales. En particular, el modelo genérico de dos bandas permite una descripción adecuada de las excitaciones de baja energía de una amplia variedad de sistemas de mucho interés actual, tales como gases de electrones o huecos (Winkler, 2003), grafeno (Castro, 2009), materiales de Dirac (Vafeek, 2014), semimetales de Weyl (Armitage, 2018), aislantes topológicos (Shen, 2011), entre otros. Por ejemplo, si se toma en consideración la unión de los grados de libertad del espín y momento orbital electrónicos en un *gas electrónico bidimensional* (GE2D) con un sistema genérico de dos bandas es posible describir fenómenos de transporte electrónico, lo cual deriva de forma práctica en aplicaciones dentro del campo de la *espintrónica*.

El ejemplo de un trabajo muy famoso referente al estudio de propiedades de transporte como lo es la conductividad de carga se encuentra el realizado por Karplus y Luttinger (Karplus y Luttinger, 1954) para el Efecto Hall, en el cual se revela que en un sistema con *Interacción espín-órbita* (IEO) la separación de bandas de espín puede generar lo que se conoce como *Conductividad Hall Anómala*, lo cual se origina como consecuencia del acoplamiento espín-órbita en sólidos en fase ferromagnética con una simetría de inversión temporal rota, y su importancia radica en que representa una valiosa herramienta para caracterizar películas delgadas y objetos mesoscópicos (Bercioux y Lucignano, 2015; Žutić *et al.*, 2004).

Como consecuencia directa del descubrimiento de fenómenos de transporte electrónico con potencial aplicación tecnológica en materiales 2D como el grafeno y la familia de dicalcogenuros de metales de transición, en los últimos años han sido desarrollados vertiginosamente nuevos materiales 2D, debido a que exhiben propiedades electrónicas (Podzorov, 2004) espintrónicas (Novoselov, *et.al.*, 2005) y fotónicas (Wang, Qing, 2012) superiores a sus contrapartes en bulto. Lo anterior ha acrecentado el interés en el estudio de los mecanismos presentes en sistemas electrónicos de baja dimensionalidad para comprender la relación entre la interacción espín-órbita con los fenómenos de transporte y las propiedades ópticas producto de esta interacción con resultados interesantes, los cuales incluyen la relación de conceptos novedosos como lo es la fase geométrica o *Fase de Berry* (Berry, 1984) en el espacio de momentos con la topología de las bandas.

Hoy en día, la idea de introducir estas cantidades en el estudio de materiales 2D ha tomado impulso en gran medida gracias a la noción de fase topológica, la cual es una fase adquirida en el transcurso de un proceso adiabático cíclico como resultado de las propiedades geométricas del espacio de parámetros del Hamiltoniano, y que puede discutirse directamente con fenómenos tales como el efecto Hall cuántico (Galitski y Spielman, 2013) o el efecto Arahonov-Bohm (Yau *et al.*, 2013), entre algunos otros. En base a estos resultados, hoy en día se sabe que las transiciones electrónicas se deben a cambios en la topología de la superficie de Fermi debido a la continua variación de parámetros como el potencial químico, presión, etc., dando como resultado nuevas fases electrónicas en la materia (Kane y Mele, 2005) , algunas de las cuales ya han sido observadas en medios reales como aislantes topológicos, grafeno, superconductores, semi-metales de Dirac, semi-metales de Weyl, entre otros (Bernevig *et al.*, 2006; Fu, 2007; Koenig *et al.*, 2007; Hsieh *et al.*, 2008; Xia *et al.*, 2009) o diferentes propiedades ópticas para el desarrollo de dispositivos semiconductores (Bernardi, 2017), donde el tensor de conductividad juega un papel crucial en el estudio de estos fenómenos.

Por otra parte, ya que los fenómenos ópticos presentan propiedades físicas muy estudiadas en sistemas 2D, en estos materiales se presentan condiciones para absorber o modificar la polarización de la radiación incidente en ellos. Esto debido a la naturaleza vectorial de la luz, la cual ofrece la posibilidad de dotar sensibilidad a la helicidad de un medio a través de su polarización circular derecha (RCP, del inglés *right-handed circularly polarized*) o izquierda (LCP, del inglés *left-handed circularly polarized*).

Mencionando ejemplos de fenómenos ópticos se tiene el dicroísmo circular, atribuido a la absorción preferencial de LCP o RCP (Sengupta, 2016) por un medio (y representa una notable manifestación de la quiralidad óptica), lo cual ha encontrado aplicación en describir propiedades de aislantes topológicos (Kargarian, 2015) o fermiones de Dirac (Suarez, 2017), entre otros, o el dicroísmo lineal, donde la absorción de luz polarizada en una dirección es distinta a la absorbida en la dirección perpendicular el cual en conjunto a los efectos de rotación de la polarización tales como el efecto Kerr (conversión de luz linealmente polarizada en luz elípticamente polarizada, ya sea por transmisión o reflexión) y efecto Faraday (rotación en la polarización de luz proporcional a la proyección del campo magnético a lo largo de la dirección de propagación), se han convertido en herramientas útiles para revelar propiedades características distintivas de sistemas 2D tipo Dirac, entre otros (Bellotti, 2016).

Investigaciones recientes muestran que algunas nanoestructuras semiconductoras como compuestos 2D del grupo IV-V arseniuro de germanio (GeAs) con estructura monoclinica anisotrópica pueden exhibir características tales como la capacidad de detectar luz linealmente polarizada, base para el exitoso desarrollo de aplicaciones en campos ópticos y optoelectrónicos polarizados en materiales 2D anisotrópicos en el plano (Zhou, *et.al.*, 2018; Li, 2019), motivando el estudio de nuevas nanoestructuras con diversas propiedades físicas para el desarrollo de nuevas aplicaciones prácticas de materiales con presencia de dicroísmo lineal. Por ejemplo, a partir de experimentos de espectroscopía es posible caracterizar propiedades magnéticas de materiales tales como tierras raras (Dai Zhao *et al.*, 1998), lo cual ha generado un impulso en la investigación de este tipo de fenómenos debido a sus posibles aplicaciones en almacenamiento de datos, desarrollo de imanes y más recientemente, en el emergente campo de la *espintrónica* (Dwivedi y Zilio, 2014).

1.1. Antecedentes

1.1.1. Espintrónica en semiconductores

Entre las áreas con mayor investigación en la física de materiales para el desarrollo de dispositivos tecnológicos robustos ante fluctuaciones, pequeños y versátiles, podemos mencionar fenómenos de transporte electrónico como la caloritrónica de espín (Bauer *et.al.*, 2012) o la espintrónica (Žutic *et.al.*, 2004). Tomando como referencia el objetivo principal en la espintrónica es manipular en un medio corrientes de portadores de carga espín-polarizados en una dirección particular, tales como semiconductores o heteroestructuras semiconductoras, ya que de esta forma es posible controlar algunas propiedades físicas y la dinámica dentro y fuera de equilibrio, como lo son la generación y manipulación de corrientes de espines electrónicos (o huecos) ya sea de forma eléctrica (campos eléctricos), magnética (campos magnéticos) o térmica (mediante gradientes de temperatura).

Entre los argumentos que justifican en gran medida el optimismo actual para el desarrollo de estos nuevos dispositivos en los campos de investigación anteriormente mencionados, se debe razones tales como el que la información pueda ser almacenada en los espines, transportada por electrones y leída en el terminal (Chappert, *et.al.*, 2007), o que la orientación de espín de electrones de conducción sobrevive por un largo tiempo (ns), a diferencia de los estados de momentum, los cuales presentan decoherencia después de algunas decenas de femtosegundos (Liu, R-B., *et.al.*, 2010). Es debido a estas razones, entre algunas otras, que se ha generado un renovado interés en el estudio de sistemas electrónicos de baja dimensionalidad, siendo los GE2D con Interacción Espín-Órbita uno de los más prometedores.

Este fenómeno, el cual aparece en la ecuación de Dirac (la cual concilia la mecánica cuántica con los principios de la relatividad especial) es producto de la interacción del momento magnético del electrón con el campo magnético efectivo del núcleo atómico en el sistema de referencia del electrón. Se manifiesta en átomos como un desdoblamiento de las líneas espectrales atómicas, y en algunos tipos de semiconductores promoviendo una degeneración o pérdida de coherencia en el espín. En átomos, la IEO se representa por la ecuación

$$H_{EO} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E}(\mathbf{r})), \quad (1)$$

la cual contiene espín $\boldsymbol{\sigma}$, momento angular orbital $\mathbf{p}$, así como un campo eléctrico $\mathbf{E}(\mathbf{r})$, donde se deja entrever la naturaleza relativista de esta interacción al involucrar la velocidad de la luz en el vacío c .

Una característica que hace especial e interesante este fenómeno de forma conceptual es el hecho de

que aún en ausencia de un campo magnético externo incidente, los electrones experimentan un campo magnético efectivo (no real, sino visto desde el sistema de referencia del electrón) $\mathbf{B} \sim \mathbf{p} \times \mathbf{E}(\mathbf{r})/(mc^2)$ en su sistema de referencia, e induce una energía de tipo Zeeman dependiente del momento. Debido a la IEO, estos sistemas presentan una corrección a la velocidad del electrón dependiente del espín y la dirección del momento angular, conocida como *velocidad anómala*. Esta velocidad se puede formular elegantemente a partir de una fuerza de Lorentz efectiva actuando en el paquete de onda semi-clásico, donde el campo que produce la fuerza que genera esta distorsión en la trayectoria electrónica es la curvatura de Berry,

$$\Omega^\lambda(\mathbf{p}) \propto \alpha_R \nabla \times (\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{p}), \quad (2)$$

donde el término α_R representa el parámetro de acoplamiento espín-órbita de Rashba. Algo interesante depende únicamente de la geometría de la banda de energía e induce una conductividad Hall en caso de que se rompa la simetría de inversión temporal.

Entre los sistemas bidimensionales que presentan IEO, podemos mencionar el GE2D, el cual es un sistema físico que surge a raíz del confinamiento de electrones en la interfaz de dos materiales de distinta naturaleza electrónica, donde las heteroestructuras semiconductoras del grupo III-V como el GaAs y AlGaAs, entre algunas otras, representan algunos de los casos de estudio más conocidos. En estos materiales, la GE2D representa la capa conductora que se limitará para crear sistemas 1D. Aquí la dimensión del confinamiento por lo general es del orden de la longitud de onda de Fermi, la densidad de estados es discreta y la función de onda presenta una forma estacionaria. Este es el motivo por el que el movimiento de los electrones (huecos) se restringe a dos dimensiones.

Entrando en contexto con el estudio de la IEO en distintos tipos de materiales, dependiendo de su naturaleza magnética, se tienen los materiales magnéticos y no magnéticos. En materiales no magnéticos, la IEO se manifiesta con efectos tales como la aparición de fases topológicas, el acoplamiento espín-valle o el efecto tipo Rashba y tipo Dresselhaus, mientras que en materiales magnéticos, dicha interacción se presenta ya sea como una anisotropía magnética, la interacción Dzyaloshinskii-Moriya, intercambio anisotrópico, entre otros.

Dependiendo el tipo de material en cuestión, la IEO rompe las propiedades de simetría de la estructura de bandas, lo cual se observa en la simetría de inversión temporal $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \varepsilon_\downarrow(-\mathbf{k})$, que indica que si el espín del electrón apunta en una dirección, entonces por invertir la dirección del momento, deberá apuntar en otra dirección, y la simetría de inversión espacial $\varepsilon_\uparrow(\mathbf{k}) = \varepsilon_\uparrow(-\mathbf{k})$, la cual indica que si un

electrón tiene un espín apuntando en una dirección, entonces por revertir el momento, deberá seguir apuntando en la misma dirección. Por ejemplo, en una banda con espín degenerado los eigenvalores de energía serán los mismos,

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\uparrow}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}), \quad (3)$$

pero al romper la simetría de inversión temporal (usualmente por un campo magnético), bandas con un espín apuntando arriba tendrán menor energía que las bandas con un espín apuntando abajo,

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\uparrow}(-\mathbf{k}) \neq \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}). \quad (4)$$

Ahora, si el sistema no presenta simetría de inversión temporal e inversión espacial, se tiene

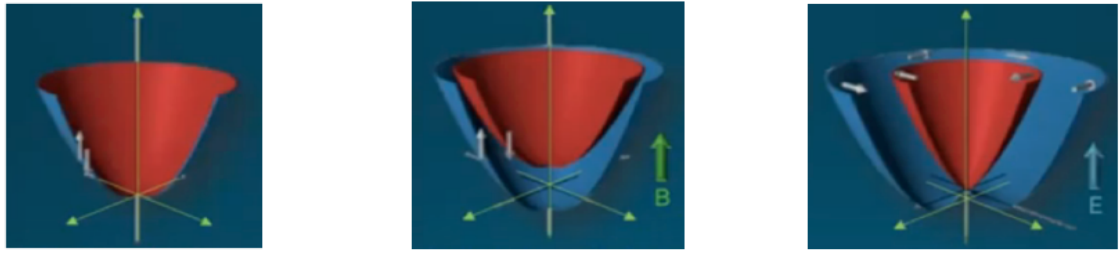
$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \neq \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k}), \quad (5)$$

en cuyo caso se tienen diferentes energías para electrones con el mismo vector de onda $\mathbf{k}$ pero con espines apuntando en direcciones opuestas.

Describiendo algunos de los mecanismos que causan la aparición de la IEO en heterouniones 2D tales como semiconductores, se presenta el acoplamiento espín-órbita de Rashba, generado debido a la ruptura en la simetría de inversión estructural o *Structural inversion-symmetry* (SIS) por sus siglas en inglés, así como el acoplamiento tipo Dresselhaus, debido a una asimetría de inversión en bulto. En particular, este tipo de interacciones genera un desdoblamiento de las sub-bandas de espín, el cual se ha estudiado en una gran variedad de materiales de bulto con simetría de inversión como lo son superficies metálicas (Hoesch *et al.*, 2004), aleaciones metálicas superficiales (Ast *et al.*, 2007) y heteroestructuras semiconductoras (Eremeev *et al.*, 2012), en donde el desdoblamiento es fuertemente dependiente de la energía de acoplamiento e impar en el momento $\mathbf{k}$ para pozos cuánticos con ruptura en la simetría de inversión estructural.

1.2. Espintrónica en semiconductores: Interacción espín-órbita de Rashba

En la actualidad, el futuro de las aplicaciones tecnológicas en el campo de la espintrónica de semiconductores requiere encontrar formas para manipular algunas propiedades electrónicas como la corriente o propiedades magnéticas por medio de corrientes o voltajes de compuerta (Fabian, 2007). Usualmente esto requiere tres procesos, los cuales son una eficiente inyección o generación de espines, una difusión de al



a) Sin desdoblamiento de espín. b) Desdoblamiento Zeeman. c) Desdoblamiento Rashba.

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\uparrow}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k})$$

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\uparrow}(-\mathbf{k}) \neq \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k})$$

$$\varepsilon_{\uparrow}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{\downarrow}(-\mathbf{k}) \neq \varepsilon_{\downarrow}(\mathbf{k})$$

Figura 1: Dispersiones de energía para un sistema electrónico 2D a) con TR + SIS, b) sin TR con SIS, c) sin TR + SIS (figura tomada de Picozzi, 2020).

menos unas decenas de nanómetros (cuando son inyectados desde un ferromagnético a un conductor no magnético) para facilitar una eficiente manipulación de espín y por último, una buena detección del espín.

Debido a que la existencia de la IEO en sistemas bidimensionales como lo son las heteroestructuras semiconductoras surge debido a una asimetría del potencial de confinamiento de los electrones, es conveniente usar una expresión adecuada para describir la interacción espín-órbita en superficies, ya que la expresión (1) es válida sólo para sistemas idealizados (ondas planas bidimensionales). De esta manera, el Hamiltoniano de interacción del GE2D se puede expresar como

$$H_R = \frac{1}{2}g\mu_B[\mathbf{B}(\mathbf{k}) \times \boldsymbol{\sigma}], \quad (6)$$

donde $\mathbf{B}(\mathbf{k}) = 2\alpha/(g\mu_B)\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}$ representa el campo magnético efectivo, siendo α el parámetro de acoplamiento espín-órbita, g es el factor de Landé y μ_B el magnetón de Bohr. De esta forma se puede ver que H_R describe una precesión de espín en ese campo. En la expresión (6) se puede observar que el campo vectorial asociado al acoplamiento espín-órbita, el cual definiremos de forma genérica $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = g\mu_B\mathbf{B}(\mathbf{k})/2$ es equivalente a un campo magnético local relacionado a la estructura de bandas, el cual depende en magnitud de las dimensiones de pozo, la velocidad de los electrones, la masa efectiva y la magnitud del parámetro de acoplamiento tipo Rashba.

Se han estimado valores para el acoplamiento espín-órbita de Rashba que van desde $\alpha \approx 0.05 \text{ eV\AA}$ para heterointerfaces de $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ (Bihlmayer *et al.*, 2006) hasta $\alpha \approx 0.4 \text{ eV\AA}$ para aislantes topológicos de Bi_2Se_3 (Nakamura *et al.*, 2021). La aproximación adiabática para GE2D está justificada, ya que el campo efectivo $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ evoluciona lentamente de acuerdo a $\dot{\mathbf{d}}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}}\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot e\mathbf{E}/\hbar$, de modo que el electrón tiene suficiente tiempo para alinear su espín al campo $\mathbf{d}(\mathbf{k})$, permitiendo la precesión de espín.

La expresión anterior además es invariante ante transformaciones de inversión temporal ¹ y valida el teorema de Kramers para electrones (huecos), el cual establece que para un número par de electrones (huecos), cada nivel energético posee al menos una doble degeneración. Sin embargo, se debe señalar que el campo espín-órbita desaparece en cristales que presentan simetría de inversión espacial $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}(-\mathbf{k})$ en el potencial de confinamiento, lo cual es importante, ya que usualmente para derivar un Hamiltoniano efectivo con IEO para sistemas con una doble degeneración de Kramers en el fondo de la banda de conducción (por ejemplo, para semiconductores n-dopados de los grupos II-V y III-V), se hace uso de la presencia de esta simetría de inversión para simplificar los cálculos.

Ya que en sistemas cristalinos bidimensionales, el campo eléctrico se genera debido al movimiento electrónico a través de un campo eléctrico $\mathbf{E} = -\nabla V$, el campo espín-órbita se acopla al momento con el momento magnético del electrón, y en el caso del GE2D con acoplamiento espín órbita de Rashba, la ecuación (1) para el electrón libre se reduce al caso en el cual presenta dependencia lineal en $\mathbf{k}$,

$$H_R = \alpha_R(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (7)$$

donde α_R se denomina *parámetro de acoplamiento Rashba*, el cual genera un desdoblamiento tipo Zeeman para las sub-bandas de espín $|\varepsilon_\lambda\rangle$. Experimentalmente, este tipo de desdoblamiento fue observado por primera vez en un material 2D usando espectroscopía de fotoemisión por resolución angular en una superficie de Au (111) por La Shell y colaboradores en 1996 (La Shell *et al.*, 1996) y en un material en bulto (BiTel) en 2011 por Tokura (Tokura, 2011). Se debe resaltar que mientras más elevado sea el número atómico de los elementos que componen un material, los efectos del desdoblamiento de las subbandas de espín debido al acoplamiento espín-órbita tipo Rashba son más perceptibles.

1.3. Modelo de Rashba magnetizado

En años recientes se ha estudiado la influencia de un campo magnético en la estructura de bandas en metales y semiconductores, y en consecuencia, en las propiedades espectrales y de transporte, como lo son la conductividad de carga y de espín (Fabian, 2007). Se sabe que la influencia de un campo magnético externo en alambres cuánticos genera el rompimiento de una simetría combinada de paridad y orbital de espín (Debald y Kramer, 2005), o que un campo magnético en el plano de un GE2D genera

¹La operación de inversión temporal o *time reversal* TR por sus siglas en inglés, establece $\boldsymbol{\sigma} = -\boldsymbol{\sigma}$ y $\mathbf{k} = -\mathbf{k}$, la cual implica $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = -\mathbf{d}(-\mathbf{k})$ y de esta manera, el Hamiltoniano de interacción es TR.

un espectro óptico diferente al de un gas electrónico sin la presencia del campo magnético (Wang, 2009). Fenómenos como estos, entre muchos otros pueden ser descritos convenientemente por medio del tensor de conductividad óptica.

Debido a esto, es importante conocer dicho tensor, ya que al estudiarlo es posible encontrar fenómenos ópticos de interés como la absorción, dicroísmo lineal, dicroísmo circular, rotación de la polarización (efectos Kerr y Faraday), etcétera, los cuales derivan de la respuesta magneto-óptica del sistema (Crassee, 2011), y además proveen información valiosa acerca de las propiedades del medio, como lo puede ser la anisotropía debido a la IEO o los momentos magnéticos en un material ferromagnético (Baker *et al.*, 2002). Ya que las operaciones de simetría traslacional o rotacional de un cristal pueden ser usadas para relacionar el tensor de conductividad con diferentes direcciones de magnetización, de manera similar, argumentos de simetría pueden emplearse para describir el tensor de conductividad como función del campo magnético para diferentes simetrías cristalinas.

La variación de las bandas de energía y la topología de las superficies de Fermi debido al efecto conjunto de la IEO y un campo magnético se ve reflejada en la conductancia de un sistema electrónico, ya que al modificar la estructura de bandas (Yuriv *et al.*, 2004) se producen brechas energéticas y extremos locales que dependerán de la dirección y magnitud relativa del campo externo con el acoplamiento espín-órbita. Se sabe que la presencia de un campo magnético con dirección arbitraria en el plano dentro de un gas electrónico 2D con IEO genera una energía de tipo Zeeman que rompe la degeneración de bandas, reflejado en una ruptura en la simetría de los contornos de Fermi que afecta el espectro de la conductividad de carga (Chang, 2005).

Este resultado es interesante ya que emplear un campo magnético (que actúa por medio del efecto Zeeman) en lugar de un campo eléctrico también presenta algunas ventajas, como brindar la posibilidad de realizar un control del espín electrónico de forma magnética en estructuras semiconductoras con una masa efectiva m_{eff} pequeña y energía Zeeman grande.

Por ejemplo, se sabe a diferencia de un sistema con IEO en presencia de un campo eléctrico perpendicular al plano de electrones 2D, el nivel de Fermi no se desplaza y tampoco cambia la magnitud del acoplamiento espín-órbita de Rashba debido a la acción del campo magnético con el GE2D (Cheng *et al.*, 2016). Se pueden encontrar estudios que han reportado cambios en α_R en un intervalo de 53 a 75 meVÅ al variar la magnitud del campo eléctrico, lo cual puede representar un problema al momento

de interpretar resultados obtenidos experimentalmente, mientras que un campo magnético paralelo al plano del GE2D es un parámetro independiente, el cual puede sintonizar los puntos críticos del espectro de energía con la energía de Fermi (Sablikov, 2019).

Estos resultados sirven como punto de partida para nuevos desarrollos no solo en la espintrónica, sino también en la caloritrónica de espín (Xiao y Dingping ,2016), donde estudios teóricos llevados a cabo en materiales ferromagnéticos como el desarrollado por Haverkort han mostrado que el tensor de conductividad puede ser expresado como la suma de funciones espectrales lineales independientes multiplicados por funciones que dependen de la dirección de magnetización local (Haverkort *et.al.*, 2010). Si a estos resultados se suma la observación de un fuerte acoplamiento espín-órbita de Rashba en bulto y superficie (Xiao *et al.*, 2016) en semiconductores polares no centrosimétricos tales como BiTeX ($X = \text{Cl, Br, I}$) se puede entender una motivación más en la de por si ya diversa investigación para encontrar propiedades físicas de interés para materiales 2D con IEO de tipo Rashba.

Como parte de los esfuerzos tempranos que han servido como inspiración para este trabajo, se encuentra el estudio llevado a cabo por Dugaev (Dugaev *et al.*, 2005) para la conductividad Hall anómala en un gas electrónico 2D con IEO Rashba, en el cual se identifican dos tipos de contribuciones: una intrínseca relacionada con la fase de Berry en el espacio de momentos y una extrínseca relacionada a las dispersiones debido a las impurezas, ambas proporcionales a la segunda potencia del acoplamiento de Rashba α , donde ambas contribuciones además de ser similares en magnitud, también son diferentes de cero.

También se tiene el estudio para la polarización de espín y la conductividad de carga para un gas electrónico bidimensional con IEO Rashba con un campo magnético en el plano realizado por C. M. Wang y M. Q. Pang en el año 2009 (Wang y Pang, 2009), o más recientemente el estudio teórico para describir la polarización de espín en heteroestructuras semiconductoras magnéticas propuesto por Dyrdal (Dyrdal *et al.*, 2017) tomando como modelo un gas electrónico 2D de Rashba sujeto a una magnetización externa con una dirección paralela y perpendicular al plano del gas, además del desarrollo del cálculo de la conductividad y polarización de espín inducida a través de un campo eléctrico para un gas electrónico 2D con IEO de tipo Rashba sujeto a la interacción con un campo magnético en un eje del plano llevado a cabo por Sablikov (Sablikov, 2017).

Inspirados en los estudios anteriores, en el presente trabajo se estudiarán las características del espectro de conductividad óptica del GE2D con IEO de Rashba sujeto a una magnetización externa. A pesar de

que ya se ha hecho un estudio para encontrar la conductividad de carga y polarización de espín para un gas electrónico 2D con IEO de Rashba realizado por C. M. Wang y M. Q. Pang (Wang y Pang, 2009), se complementará el trabajo realizado por estos autores, ya que además de encontrar la conductividad de carga como respuesta a un campo magnético en el plano del gas, también se considera la respuesta a un campo que incide perpendicular al plano para distintas posiciones del nivel de Fermi respecto al gap entre las bandas, incluyendo el estudio de alguna propiedad óptica presente para cada situación como lo puede ser un posible caso de dicroísmo lineal o circular.

Al igual que algunos de los estudios señalados anteriormente, se considera un gas electrónico 2D con IEO de Rashba en presencia de un campo magnético con dirección arbitraria, del cual se obtendrán las propiedades espectrales del estado base para estudiar dos casos distintos, uno en el cual el campo incide en dirección perpendicular al plano y segundo, cuando el campo se encuentra en el plano del gas, lo anterior por razones de simplicidad y tiempo. Se prestará especial atención en analizar el efecto que produce un cambio en la magnitud de la magnetización, la energía de Fermi o la dirección de magnetización (en caso que se encuentre en el plano del gas) en el espectro de conductividad y en las propiedades ópticas ya mencionadas.

Aunque en este trabajo se obtienen las conductividades de carga y propiedades ópticas para una magnetización en en plano del gas $\mathbf{H} = \mathbf{H}_{||}$, se han obtenido las expresiones de algunas propiedades espectrales para el caso de magnetización con dirección arbitraria, esto deja la posibilidad de complementar esta investigación considerando el efecto del grado de libertad asociado a la componente angular polar de la magnetización en los espectros de conductividad de carga así como en las propiedades ópticas presentes.

1.4. Hipótesis

El Hamiltoniano de estudio permite entender algunas propiedades generales de sistemas 2D, asociadas a la preservación o el rompimiento de simetrías. En particular, la dirección del campo magnético introduce un elemento de control al permitir la manifestación de tal o cual propiedad óptica, como la absorción o el dicroísmo lineal o circular, lo que a su vez representa una huella óptica de la presencia o ausencia de determinada simetría. Aunque se trata de un gas electrónico con acoplamiento espín-órbita, el estudio involucra conceptos, aproximaciones y técnicas que permiten el acercamiento al caso de materiales de Dirac, como grafeno y otros similares.

1.5. Objetivos

1.5.1. Objetivo general

Estudiar la respuesta óptica de un gas electrónico 2D con interacción espín-órbita de Rashba, magnetizado o en presencia de un campo magnético externo, a través del cálculo del tensor de conductividad eléctrica y propiedades ópticas relacionadas.

1.5.2. Objetivos específicos

- Aprender el formalismo de Kubo para calcular el tensor de conductividad óptica de un sistema 2D modelado por un hamiltoniano genérico de dos bandas.
- Aplicar las fórmulas derivadas para las contribuciones intra- e interbanda al caso de un gas electrónico 2D con acoplamiento de Rashba en presencia de un campo magnético externo con dirección arbitraria.
- Considerar los casos particulares en que el campo magnético es perpendicular y paralelo al plano del gas
- En cada caso, estudiar propiedades ópticas relacionadas, tal como el espectro de absorción óptica, y compararlas en función de parámetros materiales y la posición del nivel de Fermi.

Capítulo 2. Conductividad óptica de un sistema genérico de dos bandas

Ya que el tensor de conductividad representa una cantidad de gran utilidad para el estudio de propiedades ópticas en gases electrónicos 2D, en este capítulo se han de obtener expresiones generales para las propiedades espectrales y el tensor conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ para un sistema genérico de dos bandas. Las expresiones para el tensor de conductividad se obtienen mediante el formalismo de respuesta lineal de Kubo. Una vez obtenidas estas cantidades, se estudiará la conductividad eléctrica y la absorción óptica de un gas electrónico 2D con acoplamiento espín-órbita de Rashba en presencia de un campo magnético.

2.1. Hamiltoniano genérico de dos bandas

En el espacio de momentos $\mathbf{k}$, un sistema de dos niveles energéticos se puede expresar por medio del Hamiltoniano

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) &= \varepsilon_0(\mathbf{k})\sigma_0 + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= \begin{pmatrix} \varepsilon_0(\mathbf{k}) + d_z(\mathbf{k}) & d_x(\mathbf{k}) - id_y(\mathbf{k}) \\ d_x(\mathbf{k}) + id_y(\mathbf{k}) & \varepsilon_0(\mathbf{k}) - d_z(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (8)$$

donde $\varepsilon_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ es la energía del electrón libre, $\sigma_0 = \mathbb{I}_{2 \times 2}$ representa la matriz identidad y $\boldsymbol{\sigma}$ el vector de matrices de Pauli 2×2 . Los términos ε_0 y $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ que dependen de los materiales a estudiar determinan la estructura de bandas, aunque en nuestro caso particular $\boldsymbol{\sigma}$ se refiere al grado de libertad de espín electrónico, las fórmulas derivadas en este capítulo se pueden emplear cuando $\boldsymbol{\sigma}$ representa, por ejemplo, el pseudo-espín (o "espín de sitio") de los electrones en materiales como el grafeno y similares. Entre los sistemas descritos por (8), se pueden encontrar

- espín 1/2 acoplado un campo (clásico) externo,
- átomo de dos niveles acoplado a un campo electromagnético (clásico),
- gas electrónico/huecos 2D,
- materiales 2D de Dirac tipo grafeno (Tkachov, 2016),

$$^2\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

- aislantes topológicos (Shen, 2012),
- semimetales de Weyl (Armitage, *et al.*, 2018; Sonowal, 2019),
- materiales anisotrópicos bidimensionales (Saber-Pouya, *et al.*, 2017; Nemilentsau, *et al.*, 2016),
- ⋮

Por ser nuestro caso de interés un gas electrónico bidimensional, se considera $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, por tanto, para obtener los eigenestados del Hamiltoniano del sistema bidimensional, reescribimos el campo vectorial de la siguiente forma:

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \mathbf{d}_{\parallel}(\mathbf{k}) + d_z \hat{\mathbf{z}} = d(\mathbf{k}) \hat{\mathbf{d}}, \quad (9)$$

donde $\mathbf{d}_{\parallel}(\mathbf{k}) \equiv d_x \hat{\mathbf{x}} + d_y \hat{\mathbf{y}}$, $d(\mathbf{k}) = \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2}$, $\hat{\mathbf{d}} = \sin \gamma \cos \eta \hat{\mathbf{x}} + \sin \gamma \sin \eta \hat{\mathbf{y}} + \cos \gamma \hat{\mathbf{z}}$ y $\gamma \in [0; \pi]$, $\eta \in [0; 2\pi]$ representan los ángulos polar y azimutal en la esfera unitaria.

2.2. Propiedades espectrales

De (8) se obtienen las eigenenergías dadas por:

$$\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \lambda d(\mathbf{k}), \quad (10)$$

donde $\lambda = \pm$ representa la *helicidad* de las sub-bandas $|\varepsilon_{\lambda}\rangle$, notando que la diferencia en signos de estas energías podría dar lugar a una ruptura en la degeneración de los estados. Diagonalizando (8) con una transformación unitaria $UHU^{\dagger}$, donde $U = \sigma \cdot \hat{\mathbf{n}}$ y

$$\hat{\mathbf{n}} = \sin \frac{\gamma}{2} \cos \eta \hat{\mathbf{x}} + \sin \frac{\gamma}{2} \sin \eta \hat{\mathbf{y}} + \cos \frac{\gamma}{2} \hat{\mathbf{z}}, \quad (11)$$

se pueden encontrar los eigenestados $|\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})\rangle = |\varepsilon_{\lambda}\rangle$ en términos de las bases del operador σ_z :

$$|\varepsilon_{+}\rangle = \cos \frac{\gamma}{2} |+\rangle + \sin \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} |-\rangle, \quad |\varepsilon_{-}\rangle = \sin \frac{\gamma}{2} |+\rangle + \cos \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} |-\rangle, \quad (12)$$

ó en términos del vector $\mathbf{d}$

$$\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) = \sqrt{\frac{d + \lambda d_z}{2d}} \begin{pmatrix} 1 \\ \lambda \frac{d_{\parallel}}{d + \lambda d_z} e^{i\eta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} N_{\lambda} \\ \lambda N_{-\lambda} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad (13)$$

donde

$$\cos \gamma = \frac{d_z}{d}, \quad \tan \eta = \frac{d_y}{d_x}, \quad N_{\lambda} \equiv \sqrt{\frac{d + \lambda d_z}{2d}}, \quad N_{\lambda}^2 + N_{-\lambda}^2 = 1 \quad e^{i2\eta} = \frac{d_x + id_y}{d_x - id_y}.$$

Por otra parte si se considera al gas electrónico 2D como un ensemble de electrones, cada uno con su respectivo estado de polarización el vector $\langle \sigma_i \rangle_\lambda \equiv \langle \varepsilon_\lambda | \sigma_i | \varepsilon_\lambda \rangle$

$$\begin{aligned}
 \langle \varepsilon_\lambda | \sigma_i | \varepsilon_\lambda \rangle &= (\langle \varepsilon_\lambda | \sigma_x | \varepsilon_\lambda \rangle, \langle \varepsilon_\lambda | \sigma_y | \varepsilon_\lambda \rangle, \langle \varepsilon_\lambda | \sigma_z | \varepsilon_\lambda \rangle) \\
 &= \lambda (\sin \gamma \cos \eta, \sin \gamma \sin \eta, \cos \gamma) \\
 &= \lambda \left(\frac{d_{||}}{d} \frac{d_x}{d_{||}}, \frac{d_{||}}{d} \frac{d_y}{d_{||}}, \frac{d_z}{d} \right) \\
 &= \lambda \hat{\mathbf{d}}(\mathbf{k}),
 \end{aligned} \tag{14}$$

representa el vector de polarización de espín, el cual indica la dirección en la cual apunta el espín electrónico en las bandas.

Por otro lado, para encontrar el número de transiciones permitidas entre las sub-bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ separadas por una energía $\hbar\omega$, se define la densidad conjunta de estados. En el límite de temperatura cero se define como

$$\begin{aligned}
 D_{+-}(\omega) &= \int' \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\omega) \\
 &= \int' \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \delta(2d(\mathbf{k}) - \hbar\omega),
 \end{aligned} \tag{15}$$

donde la delta de Dirac impone la restricción $2d(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ debido a la conservación de la energía y la prima en la integral indica que la integral se evalúa para valores (k_x, k_y) que se encuentran dentro del intervalo $\varepsilon_-(\mathbf{k}) < \varepsilon_F < \varepsilon_+(\mathbf{k})$. Esta condición indica que solo se pueden dar aquellas transiciones entre bandas a una energía $\hbar\omega$, que caigan dentro del intervalo $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$ y sobre la curva definida a partir de

$$\hbar\omega = 2d(\mathbf{k}) \tag{16}$$

la cual se conoce como curva de resonancia $C_r(\omega)$.

2.3. Fórmula de Kubo para el tensor de conductividad

Una vez obtenida la energía de las bandas ε_λ , calcularemos el tensor de conductividad óptica con la fórmula de Kubo. Trabajando dentro de un contexto estadístico-cuántico, se define la fórmula de Kubo para el tensor de conductividad de corriente eléctrica como

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} [\Pi_{ij}(\omega) - \Pi_{ij}(0)], \quad (17)$$

donde $i, j = x, y$ representa un índice tensorial, $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$ y

$$\Pi_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_i(t), \hat{J}_j(0)] \rangle, \quad (18)$$

$$\Pi_{ij}(0) = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow 0} \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{J}_i(t), \hat{J}_j(0)] \rangle, \quad (19)$$

el término η también definido como $\eta = 0^+$ juega el papel de un tiempo de relajación inverso $\eta = \tau^{-1}$, el cual usualmente se asocia a procesos disipativos (Novko, 2016; Wang, 2010) y además permite regularizar la integral, $\langle [\hat{J}_i(t), \hat{J}_j(0)] \rangle$ representa la función de correlación corriente-corriente (de carga) la cual mide la correlación entre corriente del sistema $\hat{J}_i(0)$ a un tiempo cero con su valor a un tiempo t $\hat{J}_i(t)$ ($t > 0$), al ser perturbada por un campo eléctrico externo $\mathbf{E}(t)$ y los brackets indican que se toma el promedio cuántico (la traza) y estadístico (se introduce el peso de la función de distribución de Fermi-Dirac).

En términos del operador de corriente $\hat{J}_i = e\hat{v}_i$, donde $\hat{v}_i$ es el operador de velocidad

$$\hat{v}_i = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \epsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right), \quad (20)$$

es posible expresar ec. (17) como

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{e^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [\hat{v}_i(t), \hat{v}_j(0)] \rangle, \quad (21)$$

e es la carga elemental del electrón, $e^2/\hbar = \sigma_0/2 = e^2/2\pi\hbar = \alpha c/2\pi \approx 7.7 \times 10^5 \Omega^{-1}$, donde σ_0 es el cuanto de conductancia y $\alpha \equiv e^2/\hbar c$ es la constante de estructura fina. Insertando $|\epsilon_\lambda\rangle$ dentro de los elementos del conmutador y haciendo uso de la relación de cerradura, se puede escribir el conmutador $\langle [\hat{v}_i(t), \hat{v}_j(0)] \rangle$ como

$$\langle \epsilon_\lambda | [\hat{v}_i(t), \hat{v}_j(0)] | \epsilon_\lambda \rangle = \sum_{\lambda'} e^{i(\epsilon_\lambda - \epsilon_{\lambda'})t/\hbar} \langle \epsilon_\lambda | \hat{v}_i(0) | \epsilon_{\lambda'} \rangle \langle \epsilon_{\lambda'} | \hat{v}_j(0) | \epsilon_\lambda \rangle - e^{i(\epsilon_{\lambda'} - \epsilon_\lambda)t/\hbar} \langle \epsilon_\lambda | \hat{v}_i(0) | \epsilon_{\lambda'} \rangle \langle \epsilon_{\lambda'} | \hat{v}_j(0) | \epsilon_\lambda \rangle. \quad (22)$$

Con esto, la fórmula de Kubo (18) y (19) para sistemas descritos por (8)

$$\begin{aligned}\Pi_{ij}(\omega) &= e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda} f_{\lambda} \sum_{\lambda'} \langle [\hat{v}_i(t), \hat{v}_j(0)] \rangle \\ &= e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda, \lambda'} (f_{\lambda} - f_{\lambda'}) \frac{\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}},\end{aligned}\quad (23)$$

$$\Pi_{ij}(0) = e^2 \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda, \lambda'} (f_{\lambda} - f_{\lambda'}) \frac{\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}}, \quad (24)$$

donde $\tilde{\omega}$ la frecuencia óptica, $f(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k})) = f(\varepsilon_{\lambda})$ es la función de distribución de Fermi-Dirac. De este modo, el tensor de conductividad (17) se puede reescribir como

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}(\omega) &= i \frac{e^2}{\tilde{\omega}} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda, \lambda'} (f_{\lambda} - f_{\lambda'}) \langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle \left(\frac{1}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}} - \frac{1}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \\ &= -ie^2 \hbar \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \sum_{\lambda, \lambda'} \left(\frac{f_{\lambda} - f_{\lambda'}}{\varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}} \right) \frac{\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_{\lambda} - \varepsilon_{\lambda'}}.\end{aligned}\quad (25)$$

Para encontrar $\sigma_{ij}(\omega)$, es necesario desarrollar el término $\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle \equiv V_{ij}$, para ello se parte de la expresión:

$$\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \epsilon_0}{\partial k_i} + \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \cdot \langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma} | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \delta_{\lambda'\lambda} + \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \cdot \langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma} | \varepsilon_{-\lambda} \rangle \delta_{\lambda', -\lambda} \right), \quad (26)$$

donde $\delta_{\lambda\lambda'}$ indica la presencia de transiciones intrabanda, mientras que $\delta_{\lambda', -\lambda'}$ indica la presencia de transiciones interbanda (Maytorena, 2006). Al emplear la relación

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle &= \lambda \hat{\mathbf{d}} \delta_{\lambda'\lambda} + \left(-i\lambda(\hat{\mathbf{d}}_{\parallel} \times \hat{\mathbf{z}}) + (\hat{\mathbf{d}}_{\parallel} \times \hat{\mathbf{z}}) \times \hat{\mathbf{d}} \right) \delta_{\lambda', -\lambda} \\ &= \lambda \hat{\mathbf{d}} \delta_{\lambda'\lambda} + \left(-i\lambda(\hat{\mathbf{d}}_{\parallel} \times \hat{\mathbf{z}}) - \frac{d_z}{d} \hat{\mathbf{d}}_{\parallel} + \frac{d_{\parallel}}{d} \hat{\mathbf{z}} \right) \delta_{\lambda', -\lambda} \\ &= \lambda \hat{\mathbf{d}} \delta_{\lambda'\lambda} + \left(\frac{-i\lambda}{d_{\parallel}} (\mathbf{d} \times \hat{\mathbf{z}}) + \frac{1}{d_{\parallel}d} (\mathbf{d} \times \hat{\mathbf{z}}) \times \mathbf{d} \right) \delta_{\lambda', -\lambda} \\ &= \lambda \hat{\mathbf{d}} \delta_{\lambda'\lambda} + \left(\frac{-i\lambda}{d_{\parallel}} (\mathbf{d} \times \hat{\mathbf{z}}) - \frac{d_z}{d_{\parallel}} \hat{\mathbf{d}} + \frac{d}{d_{\parallel}} \hat{\mathbf{z}} \right) \delta_{\lambda', -\lambda},\end{aligned}\quad (27)$$

siendo $\hat{\mathbf{d}}_{||} = \frac{\mathbf{d}_{||}(\mathbf{k})}{d_{||}(\mathbf{k})}$ inmediatamente se obtiene:

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{-\lambda} \rangle &= (\langle \varepsilon_{\lambda} | \sigma_x | \varepsilon_{-\lambda} \rangle, \langle \varepsilon_{\lambda} | \sigma_y | \varepsilon_{-\lambda} \rangle, \langle \varepsilon_{\lambda} | \sigma_z | \varepsilon_{-\lambda} \rangle) \\ &= (-\cos \gamma \cos \eta - i\lambda \sin \eta, -\cos \gamma \sin \eta + i\lambda \cos \eta, \sin \gamma) \\ &= \left(-\frac{d_z}{d} \frac{d_x}{d_{||}} - i\lambda \frac{d_y}{d_{||}}, -\frac{d_z}{d} \frac{d_y}{d_{||}} + i\lambda \frac{d_x}{d_{||}}, \frac{d_{||}}{d} \right),\end{aligned}\quad (28)$$

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_{-\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{\lambda} \rangle &= (\langle \varepsilon_{-\lambda} | \sigma_x | \varepsilon_{\lambda} \rangle, \langle \varepsilon_{-\lambda} | \sigma_y | \varepsilon_{\lambda} \rangle, \langle \varepsilon_{-\lambda} | \sigma_z | \varepsilon_{\lambda} \rangle) \\ &= (-\cos \gamma \cos \eta + i\lambda \sin \eta, -\cos \gamma \sin \eta - i\lambda \cos \eta, \sin \gamma) \\ &= \left(-\frac{d_z}{d} \frac{d_x}{d_{||}} + i\lambda \frac{d_y}{d_{||}}, -\frac{d_z}{d} \frac{d_y}{d_{||}} - i\lambda \frac{d_x}{d_{||}}, \frac{d_{||}}{d} \right),\end{aligned}\quad (29)$$

se puede notar que en el caso $\lambda' = \lambda$, se recupera el término (14). Así, los elementos matriciales

$$\begin{aligned}\langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{-\lambda} \rangle \langle \varepsilon_{-\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle &= \left(\frac{d_z}{d} \frac{d_x}{d_{||}} + i\lambda \frac{d_y}{d_{||}}, \frac{d_z}{d} \frac{d_y}{d_{||}} - i\lambda \frac{d_x}{d_{||}}, -\frac{d_{||}}{d} \right) \left(\frac{d_z}{d} \frac{d_x}{d_{||}} + i\lambda \frac{d_y}{d_{||}}, \frac{d_z}{d} \frac{d_y}{d_{||}} - i\lambda \frac{d_x}{d_{||}}, -\frac{d_{||}}{d} \right) \\ &= \begin{pmatrix} \frac{d^2 - d_x^2}{d^2} & -\frac{d_x d_y + i\lambda d d_z}{d^2} & -\frac{d_x d_z - i\lambda d d_y}{d^2} \\ -\frac{d_x d_y - i\lambda d d_z}{d^2} & \frac{d^2 - d_y^2}{d^2} & -\frac{d_y d_z + i\lambda d d_x}{d^2} \\ -\frac{d_x d_z + i\lambda d d_y}{d^2} & -\frac{d_y d_z - i\lambda d d_x}{d^2} & \frac{d^2 - d_z^2}{d^2} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (30)$$

los cuales vistos de forma equivalente

$$\langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_j | \varepsilon_{-\lambda} \rangle \langle \varepsilon_{-\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{\lambda} \rangle = \frac{1}{d^2} [d^2 \delta_{ij} - d_i d_j] + i \frac{\lambda}{d} \epsilon_{ijk} d_k, \quad (31)$$

aquí δ_{ij} es la delta de Kronecker y ϵ_{ijk} es el tensor de Levi-Civita. De esta forma, el término $\langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda'} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda'} | v_j | \varepsilon_{\lambda} \rangle$ dentro de (25) es

$$\langle \varepsilon_{-\lambda} | v_i | \varepsilon_{\lambda} \rangle \langle \varepsilon_{\lambda} | v_i | \varepsilon_{-\lambda} \rangle = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \left(\frac{1}{d^2} [d^2 \delta_{ij} - d_i d_j] + i \frac{\lambda}{d} \epsilon_{ijk} d_k \right), \quad (32)$$

lo cual permite separar la matriz anterior en dos componentes

$$\begin{aligned}V_{ij}^{\lambda} &= \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \left(\frac{1}{d^2} [d^2 \delta_{ij} - d_i d_j] + i \frac{\lambda}{d} \epsilon_{ijk} d_k \right) \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \frac{1}{d^2} [d^2 \delta_{ij} - d_i d_j] + i \frac{\lambda}{d} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \epsilon_{ijk} d_k \right),\end{aligned}\quad (33)$$

nombrados $S_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \frac{1}{d^2} [d^2 \delta_{ij} - d_i d_j]$ y $T_{ij} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \frac{1}{d} \varepsilon_{ijk} d_k$.

Se puede reescribir V_{ij}^λ como

$$V_{ij}^\lambda \equiv S_{ij} + i\lambda T_{ij}, \quad (34)$$

siendo $S_{ij} = S_{ji}$ y $T_{ij} = -T_{ji}$ las partes simétrica y antisimétrica de los elementos de matriz V_{ij}^λ , respectivamente. Empleando

$$\langle \lambda \mathbf{k} | v_i | \lambda' \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\hbar} \left(\lambda \frac{\mathbf{d}}{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \delta_{\lambda' \lambda} + \frac{1}{\hbar} \left[\frac{i\lambda}{d_{\parallel}} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \hat{\mathbf{z}} + \frac{1}{d_{\parallel} d} (\mathbf{d} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \right] \delta_{\lambda', -\lambda} \quad (35)$$

en la ecuación anterior es posible obtener

$$\begin{aligned} V_{ij}^\lambda &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) - \frac{1}{\hbar^2 d^2} \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) + i\lambda \frac{1}{\hbar^2 d} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} \\ &= \frac{1}{\hbar^2 d^2} \left[(\mathbf{d} \cdot \mathbf{d}) \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) - \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \right] + i\lambda \frac{1}{\hbar^2 d} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \left(\frac{1}{d^2} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) + i\lambda \frac{1}{d} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} \right), \end{aligned} \quad (36)$$

con esto, los elementos de matriz del operador de velocidad se pueden expresar como operaciones vectoriales del operador $\mathbf{d}(\mathbf{k})$, esto será de mucha utilidad al momento de obtener expresiones para el tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$. Evaluando la fórmula de Kubo para obtener el tensor de conductividad, se encuentra que el tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ representa una cantidad compleja, es decir, con parte real e imaginaria. Para un sistema bidimensional dicho tensor tiene cuatro componentes y tiene la forma general

$$\sigma_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega) & \sigma_{xy}(\omega) \\ \sigma_{yx}(\omega) & \sigma_{yy}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (37)$$

expresado en términos de las contribuciones debido a la corriente diamagnética y paramagnética se tiene

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= \sigma_{ij}^{inter}(\omega) + \sigma_{ij}^{intra}(\omega) \\ &= \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) + \sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) + \sigma_{ij}^{intra}(\omega), \end{aligned} \quad (38)$$

donde $\sigma_{ij}^{inter,p}(\omega)$ representa la contribución de las transiciones interbanda paramagnética, $\sigma_{ij}^{inter,d}(\omega)$ corresponde a la contribución diamagnética y $\sigma_{ij}^{intra}(\omega)$ representa la contribución intrabanda.

Para el caso en el cual el Hamiltoniano del acoplamiento entre un sistema de dos bandas y un campo

externo tome la forma (8), la componente intrabanda queda expresada como

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^{intra}(\omega) &= i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\omega} \sum_{\lambda} \int d^2k \left(-\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial \varepsilon_{\lambda}} \right) \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_j} \\
&= i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\omega} \sum_{\lambda} \int d^2k \left(-\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial \varepsilon_{\lambda}} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \lambda \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{d(\mathbf{k})} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \left(\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_j} + \lambda \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{d(\mathbf{k})} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \\
&= i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\omega} \sum_{\lambda} \int d^2k \left(-\frac{\partial f_{\lambda}}{\partial \varepsilon_{\lambda}} \right) \left[\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_j} + \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\lambda}{d(\mathbf{k})} \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} + \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \right],
\end{aligned} \tag{39}$$

de igual manera, la contribución interbanda correspondiente a la corriente diamagnética es

$$\sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) = -i \frac{\sigma_0}{4\pi\hbar\omega} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d^3(\mathbf{k})} \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \tag{40}$$

mientras que el término correspondiente a la contribución interbanda paramagnética se expresa

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) &= -\frac{\sigma_0}{\pi} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} \frac{1}{d(\mathbf{k})} \\
&\quad \times \left[\frac{1}{2} \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) + \frac{i}{\hbar\omega} \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \right].
\end{aligned} \tag{41}$$

El peso de Drude, cantidad que nos permite obtener la contribución intrabanda a $\omega \rightarrow 0$ y temperatura se expresa como:

$$\begin{aligned}
D_{ii} &= \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \omega \text{Im} \sigma_{ii}(\mathbf{q}, \omega) \\
&= \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \text{Im} \sigma_{ii}^{intra} \\
&= \frac{\sigma_0}{4\hbar} \sum_{\lambda} \int d^2k \left(\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} + \lambda \frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{d(\mathbf{k})} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right)^2 \delta(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_F).
\end{aligned} \tag{42}$$

Debido a que el término $\frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} = \mathcal{P} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} - i\pi \frac{1}{4d(\mathbf{k})} \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k}))$, donde $\mathcal{P}$ representa el valor principal de Cauchy, se puede reescribir (41)

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) &= -\frac{\sigma_0}{\pi} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \left[\mathcal{P} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} - i\pi \frac{1}{4d(\mathbf{k})} \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \right] \\
&\quad \times \frac{1}{d(\mathbf{k})} \left[\frac{1}{2} \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) + \frac{i}{\hbar\omega} \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \right].
\end{aligned} \tag{43}$$

De esta manera, la parte real de la contribución interbanda paramagnética es

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = & -\frac{\sigma_0}{2\pi} \mathcal{P} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d(\mathbf{k})} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \\ & - \frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})), \end{aligned} \quad (44)$$

mientras que

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = & \frac{\sigma_0}{8} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \\ & - \frac{\sigma_0}{\pi\hbar\omega} \mathcal{P} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d(\mathbf{k})} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} \\ & \quad \times \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right). \end{aligned} \quad (45)$$

Se puede ver que (39), (45) y (40) representan cantidades imaginarias, las cuales se asocian a retardos inductivos (para responder a cambios rápidos en el campo eléctrico) de los portadores de carga, mientras que (44) representa una cantidad real asociada a absorción o emisión de energía y la cual se considera para este trabajo. Hay que remarcar que las expresiones desarrolladas hasta ahora tienen validez para todo Hamiltoniano con un campo $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ arbitrario que se pueda expresar de la forma (8), sin embargo, en capítulos posteriores se desarrollarán expresiones para un $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ particular.

Las componentes disipativas $\text{Re } \sigma_{ij}(\omega)$ ($i = j$), $\text{Im } \sigma_{ij}(\omega)$ ($i \neq j$), determinan diferentes propiedades ópticas tales como la absorción, dicroísmo lineal o circular, rotación de la polarización óptica (efecto Kerr y Faraday), entre otras propiedades, este es el motivo por el cual el cálculo del tensor de conductividad permite explicar dichas propiedades ópticas en términos de la estructura microscópica de un medio. Sin embargo, este proceso funciona a la inversa, ya que el conocimiento de alguna propiedad óptica podría invertir el proceso y permitir la deducción de alguna característica microscópica del medio.

En el campo de los materiales 2D tales como los sistemas de Dirac tipo grafeno (Wang S., 2014), aislantes topológicos (Hasan y Kane, 2010), dicalcogenuros de metales de transición (Qiu, 2013), materiales basados en GaAs, GaN para optoelectrónica (Bernardi, Marco, 2015; Xiang, D. *et al.*, 2018), estructuras de van der Waals, por nombrar algunos, el cálculo de la conductividad óptica ha constituido el punto de interés. Es de este modo como se ha explicado el origen de diversas observaciones tales como el valor universal de la transparencia de grafeno (Sheehy, 2009), valores grandes de la rotación de Faraday

(Crassee, 2011), el efecto Hall anómalo (Nagaosa, 2010), entre otros.

2.4. Absorción óptica

La potencia absorbida promedio por unidad de área, por el medio en interacción con el campo electromagnético está dada por

$$Q = \frac{1}{2} \text{Re}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{E}^*), \quad (46)$$

donde $\mathbf{E}^*$ representa el complejo conjugado del campo eléctrico $\mathbf{E} = E_x \hat{\mathbf{x}} + E_y \hat{\mathbf{y}}$ y $\mathbf{J}$ representa la densidad de corriente superficial. De forma general, en un medio anisotrópico las direcciones de los vectores $\mathbf{J}$ y $\mathbf{E}$ son diferentes, con lo que la ecuación anterior se expresa

$$\begin{aligned} Q &= \frac{1}{2} \text{Re}(J_i E_i^*) \\ &= \frac{1}{2} \text{Re}(\sigma_{ij}(\omega) E_j E_i^*) \\ &= \frac{1}{2} \text{Re}[\sigma_{xx}(\omega) E_x E_x^* + \sigma_{xy}(\omega) E_x E_y^* + \sigma_{yx}(\omega) E_y E_x^* + \sigma_{yy}(\omega) E_y E_y^*] \\ &= \frac{1}{2} (\text{Re} \sigma_{xx}(\omega)) |E_x|^2 + (\text{Re} \sigma_{yy}(\omega)) |E_y|^2 + [\text{Re}(\sigma_{xy}(\omega) + \sigma_{yx}(\omega))] \text{Re}(E_x E_y^*) \\ &\quad + [\text{Im}(\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega))] \text{Im}(E_x E_y^*), \end{aligned} \quad (47)$$

donde se ha hecho uso de la convención de suma para índices repetidos. Para luz polarizada linealmente se encuentra,

$$Q = \frac{\bar{E}^2}{4} [2 \text{Re} \sigma_{xx}(\omega) \cos^2 \zeta + 2 \text{Re} \sigma_{yy}(\omega) \sin^2 \zeta + \text{Re}(\sigma_{xy}(\omega) + \sigma_{yx}(\omega)) \sin(2\zeta)], \quad (48)$$

donde $E_x = \bar{E} \cos \zeta$, $E_y = \bar{E} \sin \zeta$ representan las componentes del campo eléctrico y $\bar{E}$ la amplitud del campo eléctrico. Se puede ver en (48) que en caso para el cual el campo $\mathbf{E}$ apunte en dirección al eje $\hat{\mathbf{x}}$ ($\zeta = 0$), se tiene el caso $Q = \frac{\bar{E}^2}{2} \text{Re} \sigma_{xx}(\omega)$, mientras que si el campo $\mathbf{E}$ apunta en dirección del eje $\hat{\mathbf{y}}$ ($\zeta = \pi/2$), se presenta $Q = \frac{\bar{E}^2}{2} \text{Re} \sigma_{yy}(\omega)$.

Por otra parte, la función respuesta que determina a la corriente inducida $\mathbf{J}_{||} = \sigma_{||}(\omega) \mathbf{E}$ en la dirección del campo eléctrico esta dada por

$$\sigma_{||} = \hat{q}_i \sigma_{ij} \hat{q}_j \quad (49)$$

(donde se suma sobre índices repetidos). De esta manera la corriente paralela se define como $J_i^{||} \equiv$

$\hat{q}_i(\hat{q}_j J_j) = \hat{q}_i(\hat{q}_j \sigma_{jk}(\omega) E_k) = \sigma_{||}(\omega) E_i$, donde $q_i = \cos \zeta \hat{x} + \sin \zeta \hat{y}$ y la conductividad longitudinal queda expresada como

$$\sigma_{||}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) \cos^2 \zeta + \sigma_{yy}(\omega) \sin^2 \zeta. \quad (50)$$

Sin embargo, en caso en el cual las componentes transversales sean distintas de cero, esto es, $\sigma_{ij}(\omega) \neq 0, i \neq j$, el medio absorbe luz con polarización circular izquierda o derecha de manera distinta, siendo $\mathbf{E}_-$ el campo que define LCP y $\mathbf{E}_+$ para RCP. Con esto, se define la conductividad para polarización circular derecha $\mathbf{E}_+$ o izquierda $\mathbf{E}_-$ como

$$\sigma_{\pm}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega) \pm i[\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)], \quad (51)$$

siendo $\sigma_+(\omega)$ la conductividad para RCP y $\sigma_-(\omega)$ la conductividad para LCP. Con esto la corriente inducida para luz polarizada circularmente dada por $\mathbf{J} = \sigma_{\pm} \mathbf{E}_{\pm}$ se relaciona con la potencia absorbida por unidad de área de acuerdo a (47) de la forma

$$\begin{aligned} Q &= \frac{\overline{E}^2}{2} \text{Re}[\sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega)] \mp \text{Im}[\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)] \\ &= \frac{\overline{E}^2}{2} \text{Re} \sigma_{\pm}(\omega), \end{aligned} \quad (52)$$

Más aún, en general se tiene que para un sistema con TRS las componentes $\sigma_{xy}(\omega) = \sigma_{yx}(\omega)$, con lo cual se obtiene $\sigma_+(\omega) = \sigma_-(\omega)$ mientras que para un sistema sin TRS $\sigma_{xy}(\omega) \neq \sigma_{yx}(\omega)$. La interacción del campo eléctrico con el gas electrónico 2D se traducirá en alguna propiedad óptica tal como el *dicroísmo lineal* (representado por la función $\sigma_{||}(\omega)$) o *dicroísmo circular* (representado por $\sigma_{\pm}(\omega)$). A modo de resumen, en el presente capítulo se han calculado expresiones para el tensor de conductividad óptica de un material 2D descrito por un Hamiltoniano genérico de un sistema de dos niveles, ya que este es el modelo que describe las excitaciones de baja energía para sistemas bidimensionales como los descritos anteriormente.

Con las expresiones obtenidas, será posible describir propiedades ópticas de un gas electrónico bidimensional con interacción espín-órbita de Rashba sujeto a una magnetización con una dirección de incidencia particular, como lo es perpendicular al plano (capítulo 4) o que incide en dirección al plano del gas (capítulo 5). Hay que señalar que aunque cada uno de los sistemas mencionados en este apartado presentan propiedades ópticas con características distintivas, el mantener la generalidad en (8) nos ha permitido obtener fórmulas aplicables a muchos sistemas.

Capítulo 3. Gas electrónico 2D con acoplamiento Rashba en un campo de magnetización

Dyrdal *et al.* (2017) estudiaron la polarización de espín inducida por una corriente eléctrica en un gas electrónico 2D con acoplamiento Rashba en proximidad a un campo de magnetización de un sustrato ferromagnético. Se trata de un estudio a frecuencia cero, en el que se consideran casos particulares según la dirección de la magnetización respecto a la dirección del campo eléctrico externo. La presente tesis ha sido motivada por este "modelo ferromagnético de Rashba". En este capítulo se muestran propiedades de estado base de este modelo tales como las eigenfunciones, la estructura de bandas, contornos de Fermi y la orientación del espín en cada banda, considerando una dirección arbitraria de la magnetización. Las expresiones obtenidas nos facilitarán las cantidades necesarias para el cálculo perturbativo de la respuesta óptica en los casos particulares estudiados en los capítulos 4 y 5.

3.1. Hamiltoniano de un GE2D con acoplamiento Rashba en un campo de magnetización con dirección arbitraria

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k})\sigma_0 + \alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (53)$$

en donde $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ es la energía del electrón libre, σ_0 es la matriz identidad 2x2, $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de matrices de Pauli 2x2 y $\alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{H} \cdot \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ representa el acoplamiento entre el sistema de dos bandas con el campo $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \underbrace{(\alpha k_y + H_x)}_{d_x(\mathbf{k})} \hat{\mathbf{x}} + \underbrace{(H_y - \alpha k_x)}_{d_y(\mathbf{k})} \hat{\mathbf{y}} + \underbrace{H_z}_{d_z(\mathbf{k})} \hat{\mathbf{z}}$. El campo Zeeman responsable del desdoblamiento de las bandas es generado debido a un campo magnético, el cual puede ser externo o bien debido a la magnetización de un sustrato ferromagnético, lo escribiremos de la manera siguiente

$$\begin{aligned} \mathbf{H} &= H_x \hat{\mathbf{x}} + H_y \hat{\mathbf{y}} + H_z \hat{\mathbf{z}} \\ &= H(\sin \theta_0 \cos \phi_0 \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta_0 \sin \phi_0 \hat{\mathbf{y}} + \cos \theta_0 \hat{\mathbf{z}}) \\ &= H_{||}(\theta_0) \underbrace{(\cos \phi_0 \hat{\mathbf{x}} + \sin \phi_0 \hat{\mathbf{y}})}_{\hat{\mathbf{e}}_0} + H_z(\theta_0) \hat{\mathbf{z}} \\ &= \mathbf{H}_{||} + H_z \hat{\mathbf{z}}, \end{aligned} \quad (54)$$

donde $\hat{\mathbf{e}}_0 = \cos \phi_0 \hat{\mathbf{x}} + \sin \phi_0 \hat{\mathbf{y}}$, $H_{||}(\theta_0) = H \sin \theta_0$, $H_z(\theta_0) = H \cos \theta_0$ y $|\mathbf{H}| = H$ mientras que los ángulos θ_0 y ϕ_0 definen la dirección del campo magnético respecto a la normal al plano del gas, tal como

se pone de manifiesto en la figura 2. El desdoblamiento de las bandas estará fuertemente influenciado por la magnitud y los valores que guarden entre sí la energía de acoplamiento Rashba $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2$, la energía de magnetización H y la energía de Fermi ε_F .

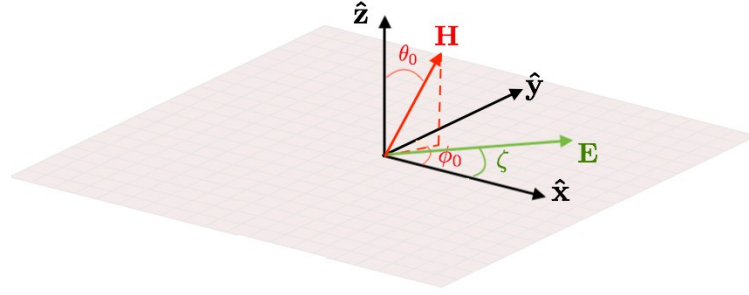


Figura 2: Gas electrónico 2D (en gris) sujeto a un campo externo $\mathbf{H}$, cuya dirección está especificada por los ángulos polar θ_0 y azimutal ϕ_0 . Se desea investigar la corriente eléctrica inducida en este sistema por un campo eléctrico externo $\mathbf{E}$ paralelo al plano del gas y de dirección arbitraria.

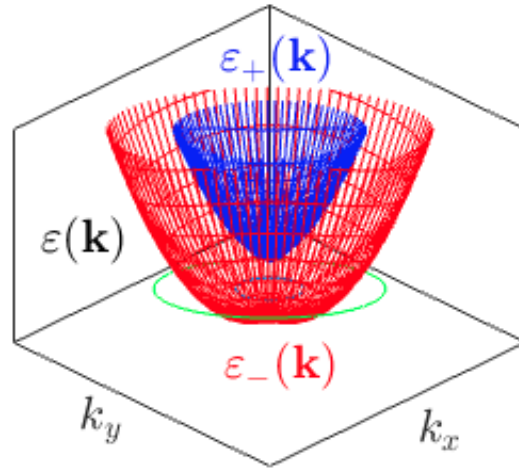


Figura 3: Bandas de energía para un GE2D con IEO Rashba y magnetizado descrita por el modelo (55), para un campo $\mathbf{H}$ en la dirección $\theta_0 = \pi/5$, $\phi_0 = \pi/3$. Adviértase la anisotropía en la separación así como la curva de energía constante proyectada sobre el plano $k_x - k_y$.

3.2. Propiedades del estado base

3.2.1. Espectro de energías, espinores, polarización de espín

Las bandas de energía a partir de (53) en coordenadas polares $\mathbf{k} = k(\cos\theta\hat{\mathbf{x}} + \sin\theta\hat{\mathbf{y}})$ son,

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \sqrt{[\alpha k + H_{||} \sin(\theta - \phi_0)]^2 + H^2 - H_{||}^2 \sin^2(\theta - \phi_0)}, \quad (55)$$

y los eigenestados

$$|\varepsilon_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\gamma}{2} \\ -\cos \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad (56)$$

donde

$$\cos \gamma = \frac{H_z}{d}, \quad \tan \eta = \frac{H_y - \alpha k_x}{\alpha k_y + H_x}, \quad e^{i2\eta} = \frac{\alpha k_y + H_x + i(H_y - \alpha k_x)}{\alpha k_y + H_x - i(H_y - \alpha k_x)}. \quad (57)$$

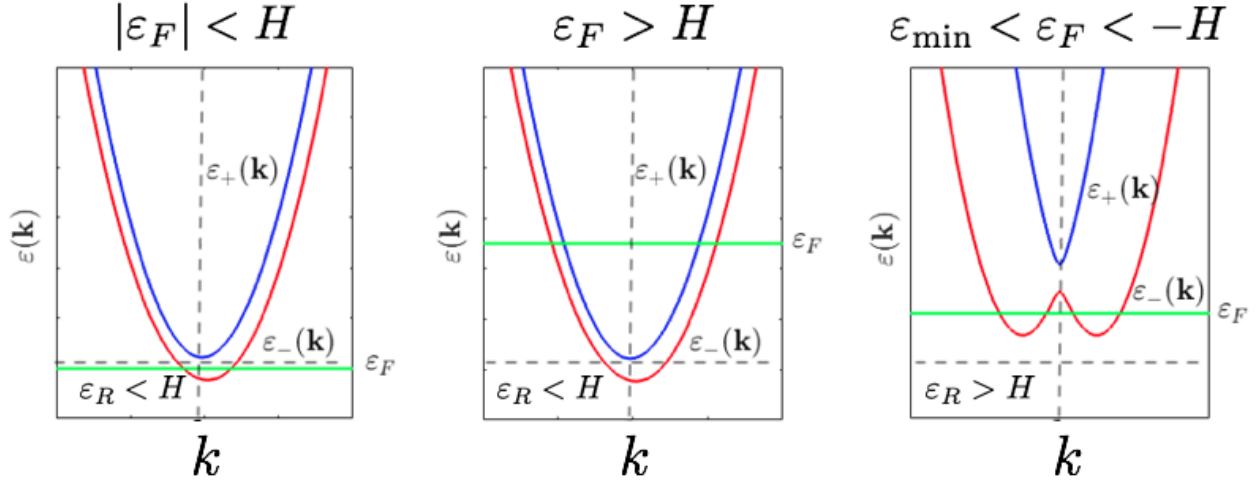


Figura 4: Bandas de energía $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k})$ en la dirección $\theta = 5\pi/6$ con el campo $H = 2.25$ meV, $\theta_0 = \pi/3$ y $\phi_0 = \pi/4$. Las figuras de la izquierda y el centro corresponden a la situación $\varepsilon_R < H$. En la derecha, la condición $\varepsilon_R > H$ permite la aparición de dos mínimos locales en la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. La posición del nivel de Fermi ε_F (línea horizontal) permite adivinar los diferentes contornos de Fermi en cada caso y anticipar las respectivas regiones disponibles para transiciones ópticas.

Mientras tanto, el vector de polarización de espín se encuentra dado por

$$\langle \sigma \rangle_{\lambda} = \lambda [\alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) + \hat{\mathbf{H}}] \quad (58)$$

la cual advierte que para $H_z \neq 0$ la orientación de espín en una banda tendrá una componente en $\hat{\mathbf{z}}$ en cualquier valor de $\theta_0 \neq \pi/2$, y en consecuencia, aunque su proyección en el plano $k_x - k_y$ es muy similar cuando hay una ausencia de campo magnético, los vectores son más cortos. En este caso la suma sobre todos los estados $\mathbf{k}$ en cada banda no será nula, como sucede cuando $H = 0$, sino que habrá una componente neta a lo largo de $\lambda \hat{\mathbf{z}}$. En la figura 5 se compara esta orientación con el caso en el cual hay ausencia de magnetización (izquierda).

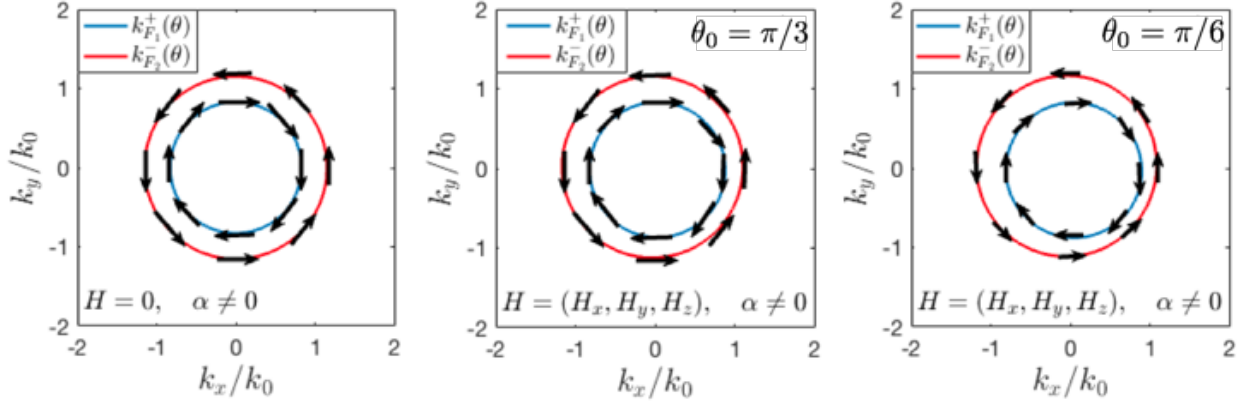


Figura 5: Orientación de espín en cada banda, dibujada sobre los contornos de Fermi para $H = 0$ (izquierda) y dos direcciones θ_0 distintas, con $\phi_0 = \pi/3$, $\theta_0 = \pi/3$ (centro) y $\theta_0 = \pi/6$ (derecha), donde $k_0 = \sqrt{2\pi N}$ es el vector de Fermi en ausencia de IEO y $\mathbf{H}$. Es importante aclarar que para el caso $\varepsilon_R < H$ y de ahora en adelante, en este trabajo se hará uso de valores en los parámetros para heterouniones basadas en InAs, Rashba $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eV m (a menos que se indique lo contrario), densidad electrónica $N = 2 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$. La masa efectiva $m = 0.38m_e$ se basa en las mediciones tomadas por Markelz (Markelz, 1996).

3.2.2. Contornos de Fermi y frecuencias críticas cuando $\varepsilon_F > H$

Ya que en este trabajo se discute la absorción óptica para el caso en la cual ambas bandas de energía están ocupadas, es decir, $\varepsilon_F > H$, se obtendrán las frecuencias críticas para las transiciones ópticas en tal situación, más sin embargo, los vectores de Fermi se obtendrán para un caso general. Los vectores de Fermi, que nos servirán para delimitar el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones electrónicas entre las sub-bandas de energía se obtienen a partir la ecuación $\varepsilon_\lambda(k_x, k_y) = \varepsilon_F$. La solución de ésta corresponde a una curva en el espacio $k_x - k_y$ cuya forma dependerá sensiblemente de los valores relativos de los parámetros ε_R , H , ε_F , ya que como hemos mencionado anteriormente, la forma de las bandas cambia significativamente en función de la magnitud de estos parámetros.

La expresión

$$\varepsilon_\lambda(k(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) = \varepsilon_F, \quad (59)$$

describe una ecuación de cuarto grado cuyos detalles de la solución se encuentran en los anexos, con la cual es posible encontrar las soluciones k válidas para la intersección con las bandas de energía. Estas soluciones se dividen en tres casos que se muestran a continuación

- $|\varepsilon_F| < H$

Cuando la energía de Fermi se encuentra ubicada entre el gap H de energía (figura 4, izquierda), tenemos la única solución para la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (60)$$

donde $a = -4\varepsilon_R^2[1 + \text{sgn}(\varepsilon_F)/\varepsilon_R]$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$, $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$ y $\text{sgn}(\varepsilon_F) = \varepsilon_F$ si $\varepsilon_F > 0$ o $\text{sgn}(\varepsilon_F) = -\varepsilon_F$ si $\varepsilon_F < 0$.

■ $\varepsilon_F > H$

Si la energía de Fermi se ubica arriba del gap H de energía (figura 4, centro), las soluciones k_F^+ , k_F^- para las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, $\varepsilon_-(\mathbf{k})$

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (61)$$

$$k_F^+ = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (62)$$

donde $a = -4\varepsilon_R^2(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$ y k_F^+ , k_F^- representan los vectores de Fermi para la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ respectivamente.

■ $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -H$

En el caso en el cual la energía de Fermi se encuentra ubicada en algún valor el cual intersecta la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ tal como se indica en (figura 4, derecha), tenemos que las raíces para la banda ε_+ , ε_- respectivamente,

$$k_{F,1} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (63)$$

$$k_{F,2} = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (64)$$

donde $x = \alpha k$ con $a = -4\varepsilon_R^2(1 - |\varepsilon_F|/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$ y las raíces $k_{F,1}$, $0 < k_{F,2}$ ($k_{F,1} < k_{F,2}$) corresponderán a los valores k de las bandas ε_+ y ε_- ,

donde se tiene $D^* = A + B - \frac{a}{3}$, además $A = \sqrt[3]{\frac{-q + \sqrt{\Delta}}{2}}$ y $B = \sqrt[3]{\frac{-q - \sqrt{\Delta}}{2}}$ obedecen las relaciones $A^3 + B^3 = -q$ y $AB = -\frac{p}{3}$, con $p = -\frac{a^2}{12} - c$ y $q = -\frac{a^3}{108} - \frac{b^2}{8} + \frac{ac}{3}$.

Por otra parte, de la condición (16) para $\varepsilon_F > H$ (que es caso de interés principal en este trabajo) se tiene

$$2d(\mathbf{k}(\theta)) = \sqrt{H^2 + \alpha^2 k^2 + 2\alpha(k_x H_y - H_x k_y)} = \hbar\omega, \quad (65)$$

la cual al desarrollar algebraicamente define la curva de resonancia $C_r(\omega)$

$$\left(k_x - \frac{H_y}{\alpha}\right)^2 + \left(k_y + \frac{H_x}{\alpha}\right)^2 = \left(\frac{1}{2\alpha}\right)^2 [(\hbar\omega)^2 - (2H_z)^2], \quad (66)$$

que es la ecuación de una circunferencia centrada en $C = (H_y/\alpha, -H_x/\alpha)$ y radio $r = \frac{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - (2H_z)^2}}{(2\alpha)}$ con $\hbar\omega > 2H_z$.

Esta circunferencia permitirá identificar las direcciones en las cuales habrá transiciones ópticas con algún valor mínimo y máximo de energía en determinadas frecuencias para ciertos valores de los parámetros de ocupación y energía de Fermi, dichas frecuencias se conocen como *frecuencias críticas*. La presencia de mínimos, máximos o puntos silla en la dispersión de las energías en el espacio de momentos genera frecuencias críticas en las cuales se generan picos en el espectro de la densidad conjunta de estados. Generalmente, esta inversión en la concavidad del espectro sucede cuando los planos de isofrecuencia tocan la frontera de la zona de Brillouin en sistemas cristalinos periódicos, a esto se le conoce como *singularidades de van Hove*.

Definiendo como $\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0)$ y $\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0)$ a estas frecuencias, es posible encontrar expresiones dependiendo de la magnitud relativa que guarden entre sí la energía de magnetización H y la energía de magnetización en la dirección $\theta_0 = \pi/2$, $\theta = \pi/2 + \phi_0$, que es cuando ocurre una degeneración en las bandas de energía $H_0 \equiv H(\theta_0 = \pi/2; \theta = \pi/2 + \phi_0)$. Estas frecuencias se encuentran (véase anexos) partiendo de la condición en la cual $\hbar\omega_\lambda(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2d(k_F^\lambda(\theta; \theta_0, \phi_0))$ toma un valor mínimo y máximo para algún valor de θ , θ_0 y ϕ_0 , es decir, para alguna dirección entre las bandas $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_+(\mathbf{k})$. Se definen

como $\omega_{\min}$, ω_1 , ω_2 y $\omega_{\max}$ para el caso en el cual $\varepsilon_F > H$:

$$\begin{aligned}
 \omega_{\min}(\theta, \theta_0, \phi_0) &= 2 \left[-\nu \frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], \quad (\theta = \phi_0 + 3\pi/2, \quad \theta_0 = \pi/2), \\
 \omega_1(\theta, \theta_0, \phi_0) &= 2 \left[\frac{\nu m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], \quad (\theta = \phi_0 + 3\pi/2, \quad \theta_0 = \pi/2), \\
 \omega_2(\theta, \theta_0, \phi_0) &= 2 \left[-\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], \quad (\theta = \phi_0 + \pi/2, \quad \theta_0 = \pi/2), \\
 \omega_{\max}(\theta, \theta_0, \phi_0) &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], \quad (\theta = \phi_0 + \pi/2, \quad \theta_0 = \pi/2),
 \end{aligned} \tag{67}$$

donde $\nu = -1$ cuando $H > H_0$ y $\nu = 1$ si $H_0 > H$. Estas frecuencias obedecen el orden $\omega_{\min} < \omega_1 < \omega_2 < \omega_{\max}$ cuando $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2 < H$, sin embargo, ω_1 y ω_2 se intercambian cuando $\varepsilon_R > H$, siendo

$$\Delta\varepsilon = 2[d(k_{F_{\max}}^-(\theta)) - d(k_{F_{\min}}^+(\theta))], \tag{68}$$

el ancho del intervalo de energías en el cual se darán las transiciones entre bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a una energía $\hbar\omega$. En la figura (6) se tiene una visualización más clara de la anisotropía en las dispersiones de energía vistas a una energía de Fermi de 12.5 meV. En las figuras superiores se muestran los contornos k_F^+ , k_F^- y la respectiva curva de resonancia para $\omega_{\min}$ (izquierda) y ω_1 (derecha), mientras que en las imágenes inferiores se tiene ω_2 (izquierda) y $\omega_{\max}$ (derecha).

3.3. Densidad conjunta de estados

Tomando el cambio a coordenadas polares, esto es, $\mathbf{k} = k(\cos\theta, \sin\theta)$, se puede reescribir (15)

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} k dk \delta(\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) - \hbar\omega), \tag{69}$$

donde $\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) = 2d(k_F^\pm(\theta))$ y $k_F^1(\theta) = k_F^+(\theta)$, $k_F^2(\theta) = k_F^-(\theta)$ se definen por la posición del nivel de Fermi y el espectro de energía a través del factor de ocupación $f(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k})))$.

Usando la relación

$$\delta(\hbar\omega_{+-}(\mathbf{k}) - \hbar\omega) = \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))] \Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega] \delta(d(k(\theta)) - \hbar\omega) \tag{70}$$

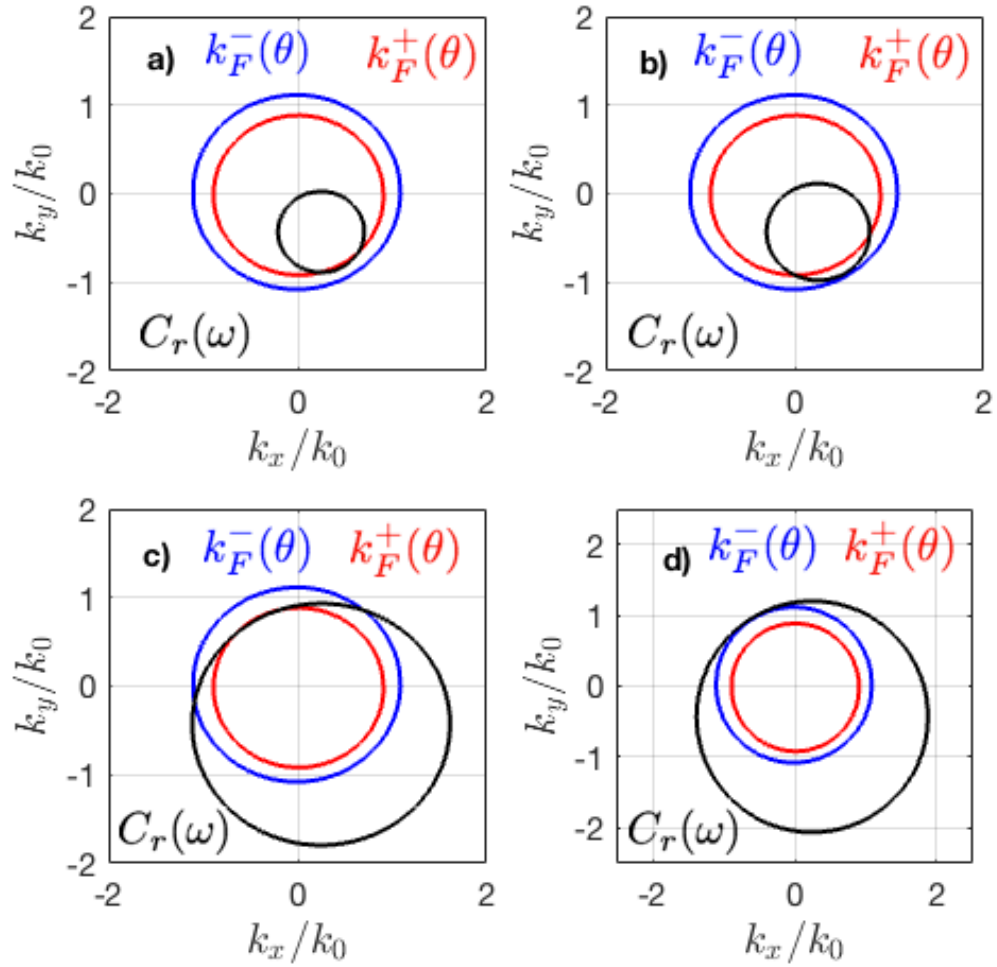


Figura 6: Contornos de Fermi y curvas de resonancia para un GE2D magnetizado con interacción Rashba con $H > \varepsilon_R$ en la dirección $\phi_0 = \pi/6$, $\theta_0 = \pi/3$. Las curvas en color azul (rojo) representa la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ ($\varepsilon_+(\mathbf{k})$) y la curva en color negro representa $C_r(\omega)$ para las frecuencias a) $\omega_{\min}$, b) ω_1 , c) ω_2 y d) $\omega_{\max}$. Los valores empleados son $H = 2.25$ meV, $\varepsilon_F = 12.5$ meV.

es posible simplificar la función delta en (69) como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_F^-(\theta)}^{k_F^+(\theta)} k dk \delta[2d(k(\theta)) - \hbar\omega] \times \Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega] \Theta[\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|] \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))], \quad (71)$$

en este caso

$$d(k_F^\lambda(\theta)) = \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^\lambda{}^2 + 2\alpha H k_F^\lambda \sin \theta_0 \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)}, \quad (72)$$

donde θ representa el ángulo que indica la dirección del vector de onda, ϕ_0 el ángulo azimutal de la magnetización y Θ representa la función escalón unitaria, que a la vez, aseguran que la integral se restringe al intervalo de frecuencias en las cuales hay transiciones electrónicas permitidas entre las bandas $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_+(\mathbf{k})$.

Usando la identidad

$$\delta[g(k(\theta))] = \sum_i \frac{\delta(k - k_i^*(\theta))}{|g'(k_i^*)|}, \quad (73)$$

con

$$k_\pm^*(\theta) = \frac{-H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0) \pm \sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \sin^2 \theta_0 \cos^2(\theta - \phi_0)}}{\alpha}, \quad (74)$$

siendo $k_i^* > 0$ definida por la ecuación $2d(k^*(\theta)) = \hbar\omega$ se obtiene

$$\delta[2d(k(\theta)) - \hbar\omega] = \frac{\hbar\omega}{4\alpha} \frac{\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \sin^2 \theta_0 \cos^2(\theta - \phi_0)}}, \quad (75)$$

por lo tanto, es posible definir la densidad conjunta de estados (71) como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha} \int_0^{2\pi} k^*(\theta) d\theta \Theta[(\hbar\omega/2H - |\sin \theta_0 \cos(\theta - \phi_0)|)] \times \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))] \Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega] \frac{\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \sin^2 \theta_0 \cos^2(\theta - \phi_0)}}. \quad (76)$$

Se puede ver en la figura 7 (izquierda) que para la dirección $\phi_0 = \pi/6$ y $\theta_0 = \pi/3$ la densidad conjunta de estados presenta una forma asimétrica como consecuencia de la anisotropía en las bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$. La distribución angular de frecuencias evidencia claramente que no todas las regiones angulares (parte sombreada, derecha) contribuyen a la densidad conjunta de estados, lo cual refleja el aspecto anisotrópico de la separación entre las bandas. En este caso las frecuencias $\omega_{\min} \approx 2$ meV y $\omega_{\max} \approx 7.3$ meV definen un ancho de banda de absorción de $\Delta\varepsilon \approx 5.3$ meV. Debido a que la dependencia de los parámetros materiales permite modular las frecuencias en las cuales suceden las transiciones entre

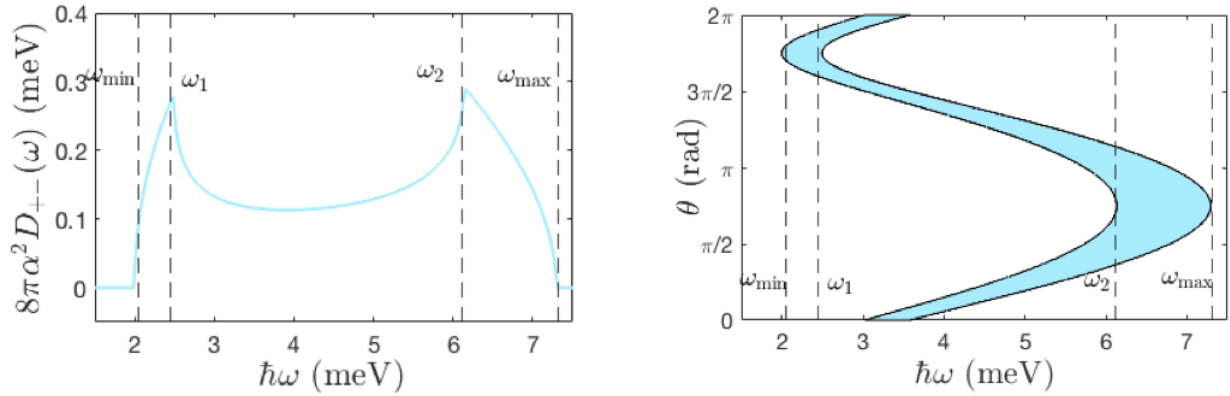


Figura 7: Densidad conjunta de estados (izquierda) para una dirección $\phi_0 = \pi/6$ y $\theta_0 = \pi/3$ donde se refleja claramente el aspecto anisotrópico de la separación entre las bandas y distribución angular de frecuencias (derecha), donde la zona sombreada en la distribución angular de frecuencias indica las regiones angulares que contribuyen a la densidad conjunta de estados para una frecuencia dada. Los parámetros son los mismos que lo empleados en la figura 6.

bandas, es posible determinar los máximos y mínimos de absorción con el simple hecho de ajustar estos parámetros a modo. Los picos en el espectro se deben a las excitaciones electrónicas que involucran estados que caen sobre la curva $C_r(\omega)$ a las frecuencias ω_1 y ω_2 , los cuales corresponden a direcciones $\theta = 11/5\pi$ y $5/6\pi$ para ω_1 y ω_2 , respectivamente.

En la figura (6) se observan los contornos de Fermi para los mismos valores en los parámetros y constantes de acoplamiento que en (7), donde se puede notar claramente una anisotropía en el espectro de energías. A manera de cierre, se debe destacar que con las expresiones derivadas en este capítulo se estudiará la conductividad óptica para un GE2D con IEO Rashba con una dirección de magnetización perpendicular al plano (capítulo 4) y cuando el campo se encuentra en el plano (capítulo 5) y algunas propiedades ópticas relacionadas.

Capítulo 4. H perpendicular al plano del GE2D

Dugaev *et. al.* (2005) consideraron el GE2D con acoplamiento Rashba (54) con el vector $\mathbf{H}$ orientado perpendicularmente al plano del sistema. Se concentraron en estudiar el efecto Hall anómalo, tanto la contribución intrínseca como la debida a impurezas. Su estudio es un cálculo de frecuencia cero. En el presente capítulo, consideraremos el mismo caso del estudio realizado por Dugaev en el cual el campo magnético externo esta orientado perpendicularmente al plano del GE2D, i.e., $\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$ para el sistema ideal sin impurezas, pero manteniendo la frecuencia finita. Como veremos, esto conduce a un tensor de conductividad antisimétrico, con componente transversal no nulo. Esta característica da lugar a fenómenos ópticos, tales como el dicroísmo circular o la rotación de la polarización de Faraday y Kerr. Aquí se mostrarán espectros de dicroísmo circular.

4.1. Propiedades del estado base

4.1.1. Eigenenergías, espinores y polarización de espín

Partiendo de la ideas desarrolladas en el capítulo anterior, como primer paso se obtienen las propiedades espectrales del Hamiltoniano de un gas electrónico 2D con IEO Rashba con un campo magnético en dirección perpendicular al plano. De esta forma, el Hamiltoniano (53) para un gas electrónico 2D con IEO de Rashba cuando $\mathbf{H} = H_z \hat{\mathbf{z}}$ se expresa como

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sigma_0 + \alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + H_z \sigma_z, \quad (77)$$

siendo en este caso $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \alpha k_y \hat{\mathbf{x}} - \alpha k_x \hat{\mathbf{y}} + H_z \hat{\mathbf{z}}$ y $H = H_z$. Las bandas de energía a partir de (55) son

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \sqrt{\alpha^2 k^2 + H_z^2}, \quad (78)$$

nótese que la separación entre las bandas en (78) es la misma en cualquier dirección a una magnitud k dada, y que no existe punto de contacto entre ellas. Además, debido a la inexistencia de un punto en el espacio de momentos para el cual el vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ sea nulo, se refleja el rompimiento de la simetría de inversión temporal. Esto es importante, pues de antemano puede advertirse que cuando se presenta el caso en el que el campo magnético $\mathbf{H}$ tenga una inclinación (una componente) a lo largo del plano del gas, se abre la posibilidad de que exista un punto de degeneración, lo que constituye una situación radicalmente diferente, "topológicamente" distinta, lo cual genera consecuencias importantes respecto al

tipo de respuesta óptica posible. Así los eigenestados se expresan para este caso

$$|\varepsilon_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\gamma}{2} \\ -\cos \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad (79)$$

donde $\cos \gamma = \frac{H_z}{d}$, $\tan \eta = -\frac{k_x}{k_y}$, $e^{2i\eta} = \frac{k_y - ik_x}{k_y + ik_x}$.

En el presente caso, la orientación de espín en una banda tendrá una componente fuera del plano y su proyección en éste se verá muy similar al caso cuando $H = 0$, pero con flechitas más cortas. En cada banda, la suma sobre todos los estados k no será nula, como sucede cuando $H=0$, sino que tendrá una componente neta a lo largo de $\lambda \hat{z}$ (ver figura 8).

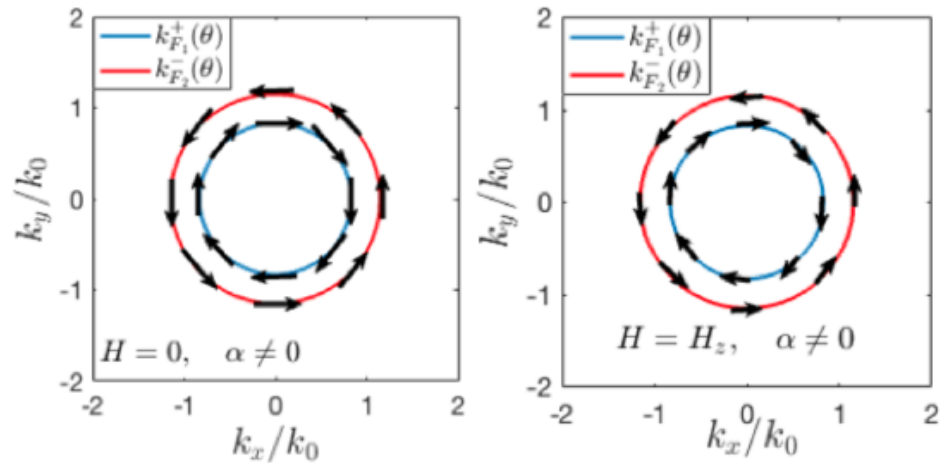


Figura 8: Proyección en el plano $k_x k_y$ de la polarización de espín cuando $H = 0$ (izquierda) y para el caso $H = H_z \hat{z}$ (derecha). Si $H_z \neq 0$, cada banda presenta una polarización de espín neta en la dirección $\lambda \hat{z}$.

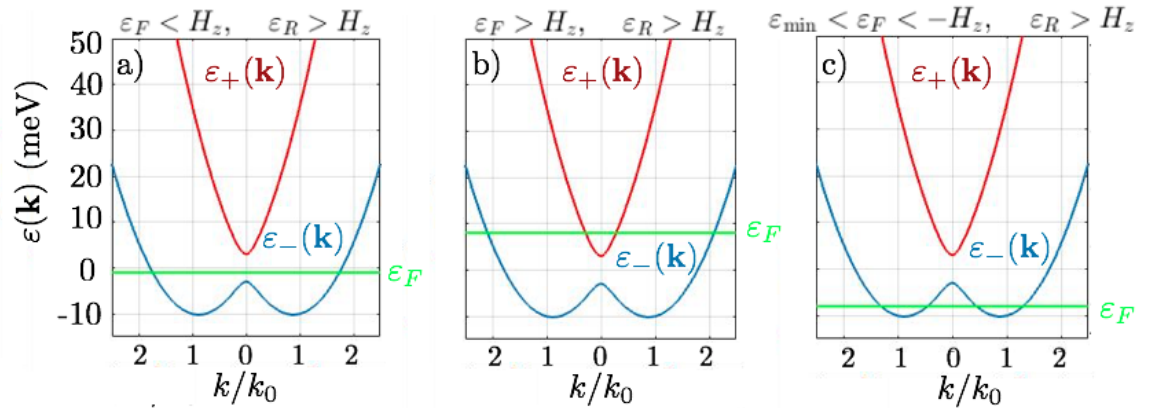


Figura 9: Bandas de energía para distintos valores de la energía de Fermi (línea color verde), con $\alpha = 20 \times 10^{-11}$ eVm y un campo magnético $H_z = 3$ meV, con $\varepsilon_R > H_z$. Se puede ver como cambia la región en el espacio k donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia el nivel de Fermi.

4.1.2. Contornos de Fermi

Los contornos de Fermi de acuerdo al factor de ocupación de las bandas de energía son

- $|\varepsilon_F| < H_z$

Ya que en este caso la energía de Fermi se encuentra en el gap, únicamente intersecta con la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, tal como se manifiesta en el caso a) de la figura 9. Por lo tanto a partir de la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_-(\mathbf{k})$ se obtiene

$$k_F^- = \frac{\sqrt{2}\varepsilon_R}{\alpha} \sqrt{1 + \varepsilon_R^{-1} \left(\varepsilon_F + \sqrt{\varepsilon_R^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F + H_z^2} \right)}, \quad (80)$$

donde $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2$ es la energía característica del acoplamiento Rashba y

$$d(k_F^-) = \sqrt{\alpha^2 k_F^{-2} + H_z^2} = \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F + \varepsilon_R}, \quad (81)$$

$$\omega = \frac{2}{\hbar} \left[\sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F + \varepsilon_R} \right]. \quad (82)$$

Se advierte en la figura (10) el contorno de Fermi de la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ para un valor de $\varepsilon_F = 0.5$ meV (izquierda) y $\varepsilon_F = 1.5$ meV (derecha) para una energía de magnetización $H_z = 3$ meV. Se observa como a medida que la energía de Fermi se ubique en valores cercanos al mínimo de energía de la banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, se hará más grande la proyección de la banda en el plano $k_x k_y$ y consecuentemente, aumentará el espacio $\mathbf{k}$ para las transiciones permitidas.

- $\varepsilon_F > H_z$

Aquí la energía de Fermi se ubica en algún valor tal que intersecta ambas bandas de energía, como se ve en b) de la figura 9. Debido a esto, a partir de la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ se obtienen los valores solución para las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, $\varepsilon_-(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned} k_F^+ &= \frac{\sqrt{2}\varepsilon_R}{\alpha} \sqrt{1 + \varepsilon_R^{-1} \left(\varepsilon_F + \sqrt{\varepsilon_R^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F + H_z^2} \right)}, \\ k_F^- &= \frac{\sqrt{2}\varepsilon_R}{\alpha} \sqrt{1 + \varepsilon_R^{-1} \left(\varepsilon_F - \sqrt{\varepsilon_R^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F + H_z^2} \right)}, \end{aligned} \quad (83)$$

donde

$$d(k_F^\pm) = \sqrt{\alpha^2 k_F^{\pm 2} + H_z^2} = \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F \mp \varepsilon_R}, \quad (84)$$

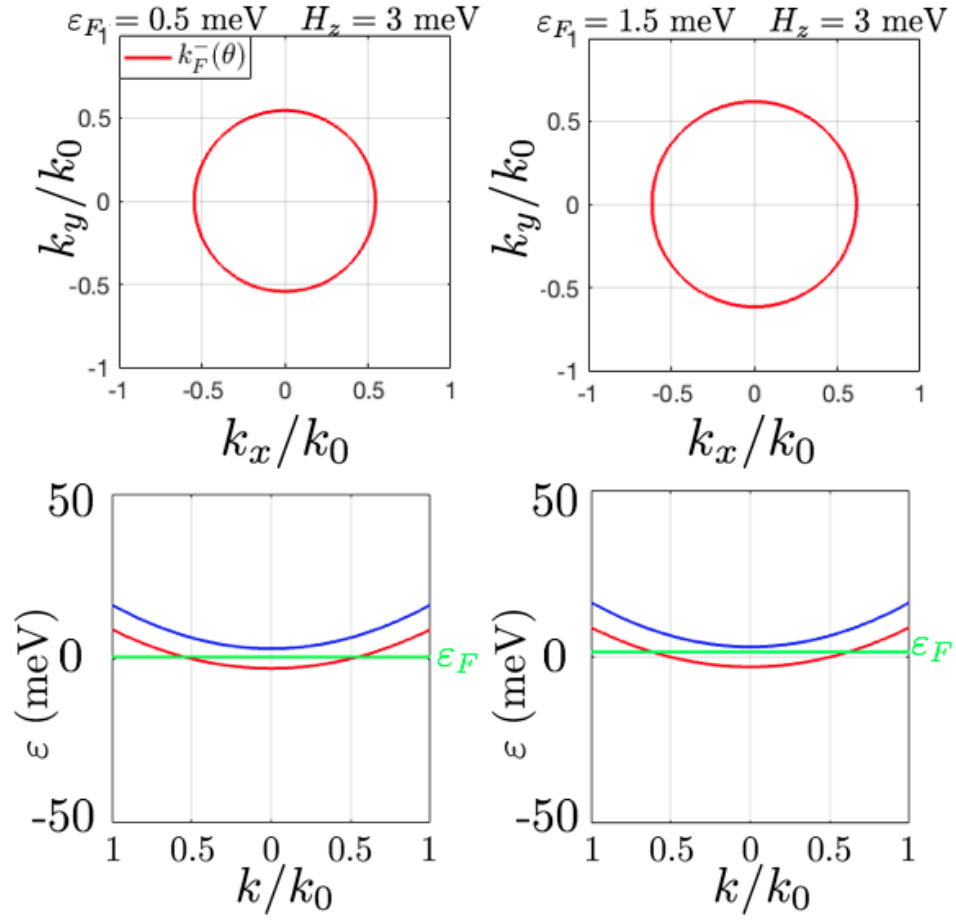


Figura 10: Energías y contornos de Fermi con distintos valores de energía de Fermi ε_F y magnetización H_z para el caso en el cual $\varepsilon_F > H_z$ y $\varepsilon_R < H_z$, donde $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm. Se puede ver como cambia la región donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia la magnitud de magnetización H .

de esta forma, se definen las frecuencias que definen el ancho de banda para las transiciones

$$\omega_+ = \frac{2}{\hbar} \left[\sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F} - \varepsilon_R \right], \quad (85)$$

$$\omega_- = \frac{2}{\hbar} \left[\sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 + 2\varepsilon_R\varepsilon_F} + \varepsilon_R \right]. \quad (86)$$

La figura (11) muestra los contornos de Fermi para las bandas $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (k_F^-) y $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ (k_F^+) para un valor de $H = H_z = 1.1$ meV (izquierda) y $H = H_z = 2.9$ meV (derecha) a una energía de Fermi de 12.5 meV. Se observa cómo a medida que incrementa la energía Zeeman incrementará el desdoblamiento de las sub-bandas de energía. Tal incremento en el desdoblamiento provocará que la energía de Fermi interseccione las bandas en una situación tal que el espacio $\mathbf{k}$ disponible para transiciones ópticas se hará mas grande a medida que H se acerque a la energía de Fermi, lo cual

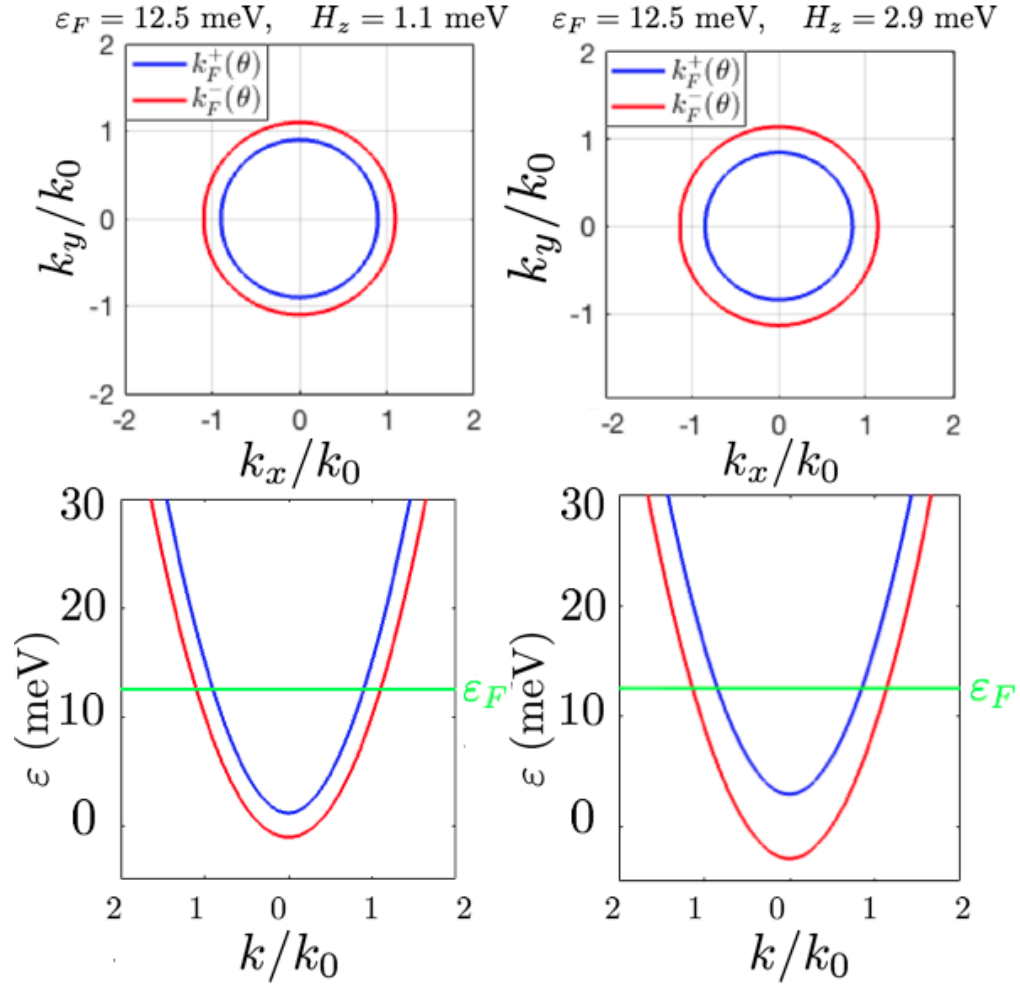


Figura 11: Energías y contornos de Fermi con distintos valores de energía de Fermi ε_F y magnetización H_z para el caso $\varepsilon_F > H_z$ y $\varepsilon_R < H_z$, donde $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm. Se puede ver como cambia la región donde se darán las transiciones ópticas a medida que cambia H .

se puede ver claramente en la figura 11 (derecha). Para la figura de la derecha se tiene un ancho de banda de absorción mayor que la figura de la izquierda.

■ $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -H_z$

Este caso se presenta cuando $\varepsilon_R > H_z$, pues se genera un desdoblamiento de la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ tal que se presentan dos mínimos como en el caso c) de la figura 9, con lo cual los valores obtenidos partir de la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_-(\mathbf{k})$ son

$$\begin{aligned} k_{F,1}^- &= \frac{\sqrt{2}\varepsilon_R}{\alpha} \sqrt{1 - \varepsilon_R^{-1} \left(|\varepsilon_F| + \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|} \right)}, \\ k_{F,2}^- &= \frac{\sqrt{2}\varepsilon_R}{\alpha} \sqrt{1 - \varepsilon_R^{-1} \left(|\varepsilon_F| - \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|} \right)}, \end{aligned} \quad (87)$$

con $k_{F,1} < k_{F,2}$.

$$d(k_{F,1}^-) = \sqrt{\alpha^2 k_F^{-2} + H_z^2} = \varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|}, \quad (88)$$

$$d(k_{F,2}^-) = \sqrt{\alpha^2 k_F^{-2} + H_z^2} = \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|} + \varepsilon_R, \quad (89)$$

$$\omega_{F,1} = \frac{2}{\hbar} \left[\varepsilon_R - \sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|} \right], \quad (90)$$

$$\omega_{F,2} = \frac{2}{\hbar} \left[\sqrt{\varepsilon_R^2 + H_z^2 - 2\varepsilon_R|\varepsilon_F|} + \varepsilon_R \right]. \quad (91)$$

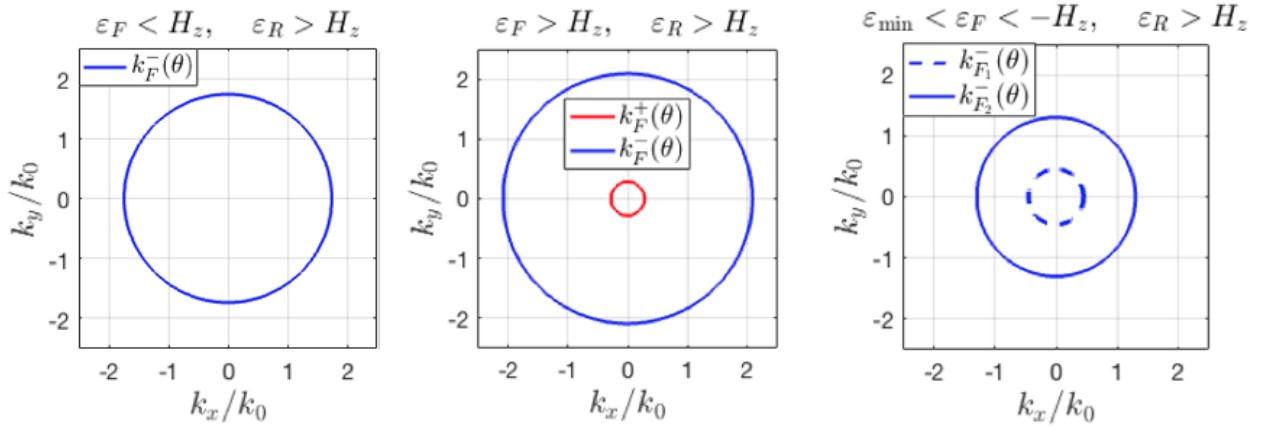


Figura 12: Contornos de Fermi para distintas posiciones del nivel de Fermi. En la figura de la izquierda, el interior del círculo corresponde al espacio disponible para transiciones interbanda, de acuerdo al principio de Pauli. En las figuras del centro y a la derecha, dicha región corresponde al espacio anular entre los contornos de Fermi. Nótese que en el caso de la derecha el nivel de Fermi corta solo y dos veces la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. Los valores de la energía de Fermi son de $\varepsilon_F = -1$ meV (izquierda), $\varepsilon_F = 8$ meV (centro) y $\varepsilon_F = -8$ meV (derecha) para un $H_z = 3$ meV y $\alpha = 20 \times 10^{-11}$ eVm.

4.2. Densidad conjunta de estados

Por otra parte, la densidad conjunta de estados (76) vista en el capítulo anterior se reduce en este caso

$$\begin{aligned} D_{+-}(\omega) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_1(\theta)}^{k_2(\theta)} k dk \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega] \delta[g(k(\theta))] \\ &= \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\theta \frac{k}{k^*} \delta(k - k_+^*(\theta)) \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega], \end{aligned} \quad (92)$$

donde el término

$$k_+^*(\theta) = \frac{\sqrt{(\hbar\omega)^2 - (2H_z)^2}}{2\alpha}, \quad (93)$$

se debe a la relación

$$\delta[g(k(\theta))] = \sum_i \frac{\delta(k - k_i^*(\theta))}{|g'(k_i^*)|} = \frac{\hbar\omega}{4\alpha^2 k^*} [\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))], \quad (94)$$

con $g(k) = \hbar\omega - 2d(k_F^\pm(\theta))$, $g'(k_i^*) \neq 0$ y la condición $k_\pm^*(\theta) > 0$.

La densidad conjunta de estados queda definida, dependiendo el factor de ocupación

- Caso $\varepsilon_F < |H_z|$

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\theta \delta(k - k_+^*(\theta)) \Theta[2d(k_F^2(\theta)) - \hbar\omega], \quad (95)$$

ecuación lineal en ω donde $d(k_F^2(\theta)) = d(k_F^-(\theta))$ y la función $\Theta[2d(k_F^2(\theta)) - \hbar\omega]$ define el límite de absorción óptica.

- Caso $\varepsilon_F > H_z$

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\theta \Theta[(\hbar\omega - |2H_z|)] \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^1(\theta))] \Theta[2d(k_F^2(\theta)) - \hbar\omega], \quad (96)$$

$d(k_F^1(\theta)) = d(k_F^+(\theta))$, $d(k_F^2(\theta)) = d(k_F^-(\theta))$ y los límites de absorción óptica están dados por $\Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))]$, $\Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega]$.

- Caso $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -H_z$

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha^2} \int_0^{2\pi} d\theta \Theta[(\hbar\omega - |2H_z|)] \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^1(\theta))] \Theta[2d(k_F^2(\theta)) - \hbar\omega], \quad (97)$$

$d(k_F^1(\theta)) = d(k_{F,1}(\theta))$, $d(k_F^2(\theta)) = d(k_{F,2}(\theta))$ y los límites de absorción óptica están dados por las funciones escalón $\Theta[\hbar\omega - 2d(k_{F,1}(\theta))]$ y $\Theta[2d(k_{F,2}(\theta)) - \hbar\omega]$.

Las ecuaciones (95), (96) y (97), representadas gráficamente en la figura 13 muestran que la densidad conjunta de estados depende linealmente de ω para el intervalo en que se presentan las transiciones entre bandas (delimitado por las funciones escalón), mientras que se anula fuera del ancho de banda de absorción. En todos los casos, se tiene $\varepsilon_R > H_z$ para un valor de H_z de 3 meV, lo cual permite explorar las tres situaciones descritas por la figura 12, siendo la energía de Fermi para el caso de la izquierda de -1 meV, el cual genera un ancho de banda de absorción de $\Delta\varepsilon \approx 78$ meV, mientras que en la figura del centro, la energía de Fermi con un valor de 8 meV presenta $\Delta\varepsilon \approx 80$ meV. Para la figura de la derecha la energía de Fermi tiene un valor de -8 meV y ancho de banda de $\Delta\varepsilon \approx 37.5$ meV.

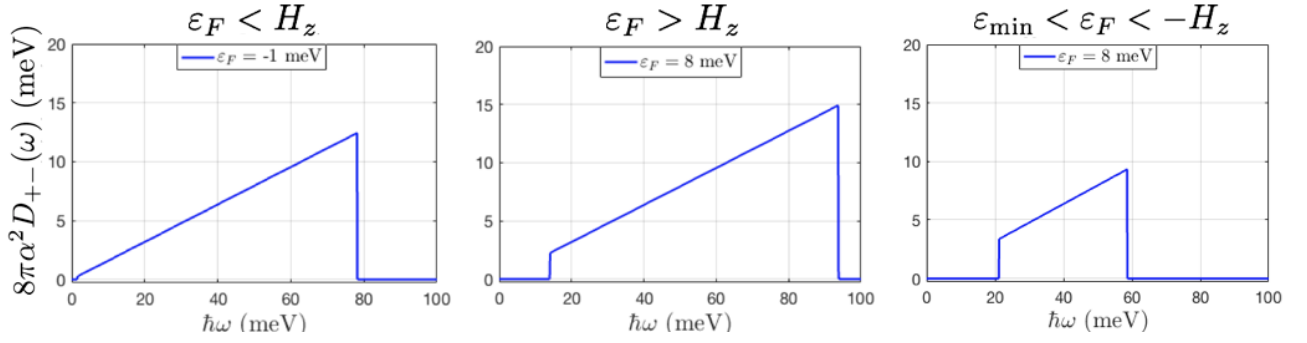


Figura 13: Densidad conjunta de estados para tres posiciones de la energía de Fermi, donde $\varepsilon_R > H_z$. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12.

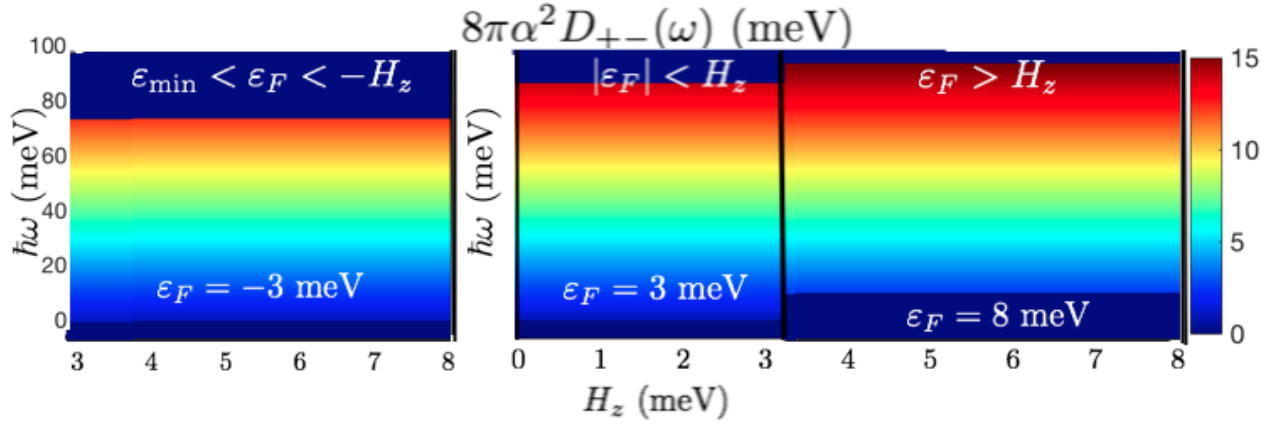


Figura 14: Mapa de intensidad de la densidad conjunta de estados para la frecuencia ω contra energía de magnetización H_z (en meV) con tres distintos valores de la energía de Fermi para los tres casos de estudio presentes cuando $\varepsilon_R > H_z$. Se puede ver la evolución del número de transiciones ópticas permitidas conforme cambia el cociente ε_F/H_z . Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12.

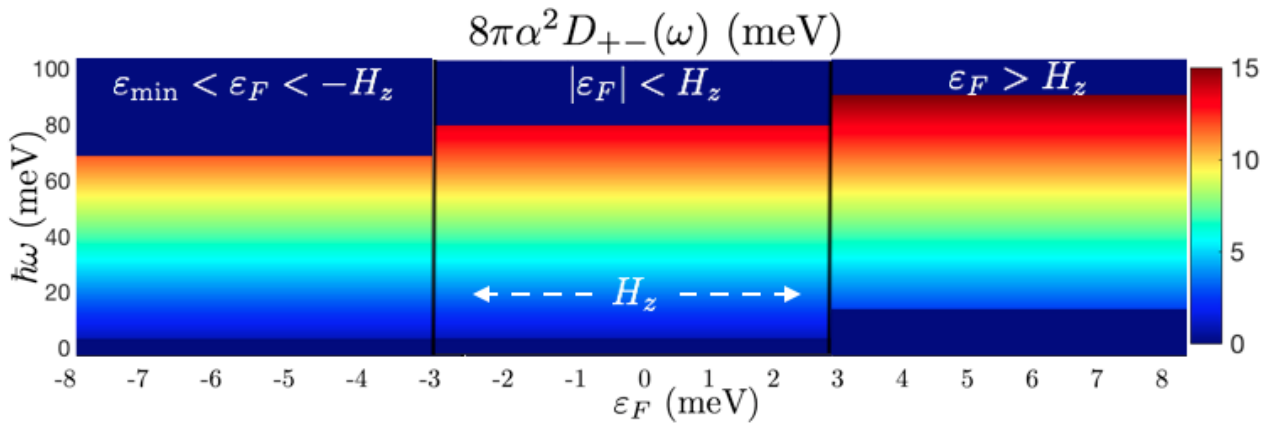


Figura 15: Mapa de intensidad para la densidad conjunta de estados para frecuencia ω contra energía de Fermi ε_F (en meV) para una energía de magnetización $H_z = 3$ meV para los tres casos de estudio presentes cuando $\varepsilon_R > H_z$. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12.

En todos los casos, se nota como cuando intervalo de absorción se desplaza a frecuencias más grandes, incrementa la densidad conjunta de estados, esto es, el número de transiciones permitidas, ya que a medida que aumenta la energía de Fermi, las energías involucradas en las transiciones también serán mayores conforme aumenta el valor de ε_F .

Esta evolución se puede apreciar más claramente en las figuras 14 y 15, las cuales señalan con mayor detalle el cambio en el número de transiciones permitidas, dependiendo del valor relativo de ε_F/H_z , para alguna de las tres situaciones contempladas cuando $\varepsilon_R > H_z$. En resumen, esta función manifiesta como la isotropía en la dispersión de energías en la ecuación (78), la densidad conjunta de estados presenta un aspecto diferente para distintos valores de ε_F , lo cual difiere notablemente en comparación cuando el campo $\mathbf{H}$ presenta una componente en el plano $k_x - k_y$ como se puede apreciar en la figura 7 (izquierda), además, confirman que la isotropía de las bandas de energía genera un espectro claramente isotrópico.

4.3. Conductividad óptica

Para obtener expresiones para el tensor de conductividad óptica debido a las distintas contribuciones dadas por (38) para el caso en el cual $H = H_z$, se parte de las expresiones (39), (41) y (40) vistas anteriormente con las cuales se obtiene:

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = i\delta_{ij} \frac{\sigma_0 \alpha^4}{4\hbar\omega} \sum_{\lambda} \int_0^{\infty} dk \frac{k^3}{d^2(\mathbf{k})} \left[\lambda + \frac{\hbar^2 d(\mathbf{k})}{m\alpha^2} \right]^2 \delta(\varepsilon_{\lambda}(\mathbf{k}) - \varepsilon_F), \quad (98)$$

$$\sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = \frac{\sigma_0 \alpha^2}{\hbar\tilde{\omega}} \int_{k_1}^{k_2} k dk \frac{1}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - (2d(\mathbf{k}))^2} \frac{1}{d(\mathbf{k})} [i\delta_{ij} (d^2(\mathbf{k}) + H_z^2) + \hbar\tilde{\omega} H_z \varepsilon_{ijz}], \quad (99)$$

$$\sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) = i\delta_{ij} \frac{\sigma_0 \alpha^2}{4\hbar\omega} \int_{k_1}^{k_2} k dk \frac{d^2(\mathbf{k}) + H_z^2}{d^3(\mathbf{k})}, \quad (100)$$

donde k_2 y k_1 representan los valores k_F en los cuales suceden las transiciones ópticas, es decir, los límites de integración $k_2 > k_1$. Para el Hamiltoniano (77) se encuentran las siguientes expresiones

$$f_{ij}^{(0)}(\theta) = k^2 [\delta_{ij} (\cos^2 \theta \delta_{ix} + \sin^2 \theta \delta_{iy}) + (1 - \delta_{ij}) \sin \theta \cos \theta], \quad (101)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 d_z \varepsilon_{zij}, \quad (102)$$

$$\left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 (d_z^2 \delta_{ij} + d_i d_j) = \alpha^2 [(\alpha^2 k^2 + H_z^2) \delta_{ij} - \alpha^2 f_{ij}^{(0)}(\theta)], \quad (103)$$

$$\delta(g(k(\theta))) = \sum_i \frac{\delta(k - k_i^*(\theta))}{|g'(k_i^*)|} = \frac{\hbar\omega}{4\alpha^2 k^*} [\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))], \quad (104)$$

que permiten escribir las contribuciones al tensor de conductividad en la siguiente forma.

- Caso $\varepsilon_F < |H_z|$

Las componentes diagonales del tensor $\sigma_{ij}(\omega)$ son iguales

$$\sigma_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \sigma_{xx}(\omega) & \sigma_{xy}(\omega) \\ -\sigma_{xy}(\omega) & \sigma_{xx}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (105)$$

donde las contribuciones interbanda diagonales son

$$\text{Re } \sigma_{xx}^{inter}(\omega) = \frac{\pi\sigma_0}{16} \left[\left(\frac{2H_z}{\hbar\omega} \right)^2 + 1 \right] \Theta \left(1 - \left| \frac{\hbar\omega - [d(k_F^-) + H_z]}{d(k_F^-) - H_z} \right| \right), \quad (106)$$

así como las componentes Hall interbanda

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0 H_z}{4\hbar\omega} \ln \left| \frac{[\hbar\omega - 2H_z][\hbar\omega + 2d(k_F^-)]}{[\hbar\omega + 2H_z][\hbar\omega - 2d(k_F^-)]} \right|, \quad (107)$$

$$\text{Im } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\sigma_0 \pi \frac{H_z}{4\hbar\omega} \Theta \left(1 - \left| \frac{\hbar\omega - [d(k_F^-) + H_z]}{d(k_F^-) - H_z} \right| \right). \quad (108)$$

- Caso $\varepsilon_F > H_z$

Se presentan las contribuciones interbanda de la conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$. Al igual que en el caso en el cual $\varepsilon_F < H_z$ componentes longitudinales son iguales $\sigma_{xx}(\omega) = \sigma_{yy}(\omega)$, siendo

$$\text{Re } \sigma_{xx}^{inter}(\omega) = \frac{\pi\sigma_0}{16} \left[\left(\frac{2H_z}{\hbar\omega} \right)^2 + 1 \right] \Theta \left(1 - \left| \frac{\hbar\omega - [d(k_F^+) + d(k_F^-)]}{2\varepsilon_R} \right| \right), \quad (109)$$

y componentes a la conductividad Hall

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0 H_z}{4\hbar\omega} \ln \left| \frac{[\hbar\omega - 2d(k_F^+)][\hbar\omega + 2d(k_F^-)]}{[\hbar\omega + 2d(k_F^+)][\hbar\omega - 2d(k_F^-)]} \right|, \quad (110)$$

$$\text{Im } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\sigma_0 \pi \frac{H_z}{4\hbar\omega} \Theta \left(1 - \left| \frac{\hbar\omega - [d(k_F^+) + d(k_F^-)]}{2\varepsilon_R} \right| \right). \quad (111)$$

$$\blacksquare \quad \varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -H_z$$

En este caso, las componentes del tensor de conductividad son dadas por

$$\operatorname{Re} \sigma_{xx}^{inter}(\omega) = \frac{\pi \sigma_0}{16} \left[\left(\frac{2H_z}{\hbar \omega} \right)^2 + 1 \right] \Theta \left(1 - \left| \frac{\hbar \omega - [d(k_{F,1}^-) + d(k_{F,2}^-)]}{d(k_{F,2}^-) - d(k_{F,1}^-)} \right| \right), \quad (112)$$

y las componentes Hall

$$\operatorname{Re} \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0 H_z}{4\hbar \omega} \ln \left| \frac{[\hbar \omega - 2d(k_{F,1}^-)][\hbar \omega + 2d(k_{F,2}^-)]}{[\hbar \omega + 2d(k_{F,1}^-)][\hbar \omega - 2d(k_{F,2}^-)]} \right|, \quad (113)$$

$$\operatorname{Im} \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\sigma_0 \pi \frac{H_z}{4\hbar \omega} \ln \left| \frac{[\hbar \omega - 2d(k_F^+)][\hbar \omega + 2d(k_F^-)]}{[\hbar \omega + 2d(k_F^+)][\hbar \omega - 2d(k_F^-)]} \right|. \quad (114)$$

Con las expresiones obtenidas hasta aquí, se calculará la conductividad para los tres casos, poniendo énfasis en el efecto que genera la energía de Fermi en estas transiciones. Se puede ver en general que las componentes disipativas $\operatorname{Re} \sigma_{xx}^{inter}(\omega)$, $\operatorname{Im} \sigma_{xy}^{inter}(\omega)$, dadas por (106), (108), (109), (111), (112) y (114) quedarán delimitadas por la función escalón $\Theta(\omega)$, lo cual les da forma al espectro en la figura 16, mientras que la componente transversal $\operatorname{Re} \sigma_{xy}^{inter}(\omega)$ presenta una forma logarítmica en todos los casos, los cuales se anulan fuera del ancho de banda de absorción.

La figura 16 señala el espectro de conductividad para tres distintos valores de la energía de Fermi para un valor de H_z . La dependencia del espectro con la energía de Fermi es similar en los tres casos para las distintas contribuciones, ya que aumentar la energía de Fermi y/o el campo magnético genera un desplazamiento del ancho de banda de absorción hacia frecuencias mayores, lo cual coincide con los espectros mostrados anteriormente en la densidad conjunta de estados en la figura 13. Sin embargo, se ha de notar como a razón que la energía de Fermi se mueva hacia estados con mayor energía, el espacio $\mathbf{k}$ para las transiciones crecerá y en consecuencia, habrá un incremento en ancho de banda de la conductividad, siendo notable un incremento en la absorción a bajas frecuencias para los tres casos, el cual se refleja como un pico conforme $\varepsilon_F \rightarrow H_z$.

En general, el espectro de conductividad de las componentes disipativas de $\sigma_{ij}(\omega)$ es muy parecido en los tres casos, siendo similar la evolución de la magnitud como función de ω , ε_F y H_z , dentro de todo el ancho de banda de absorción en que se darán las transiciones.

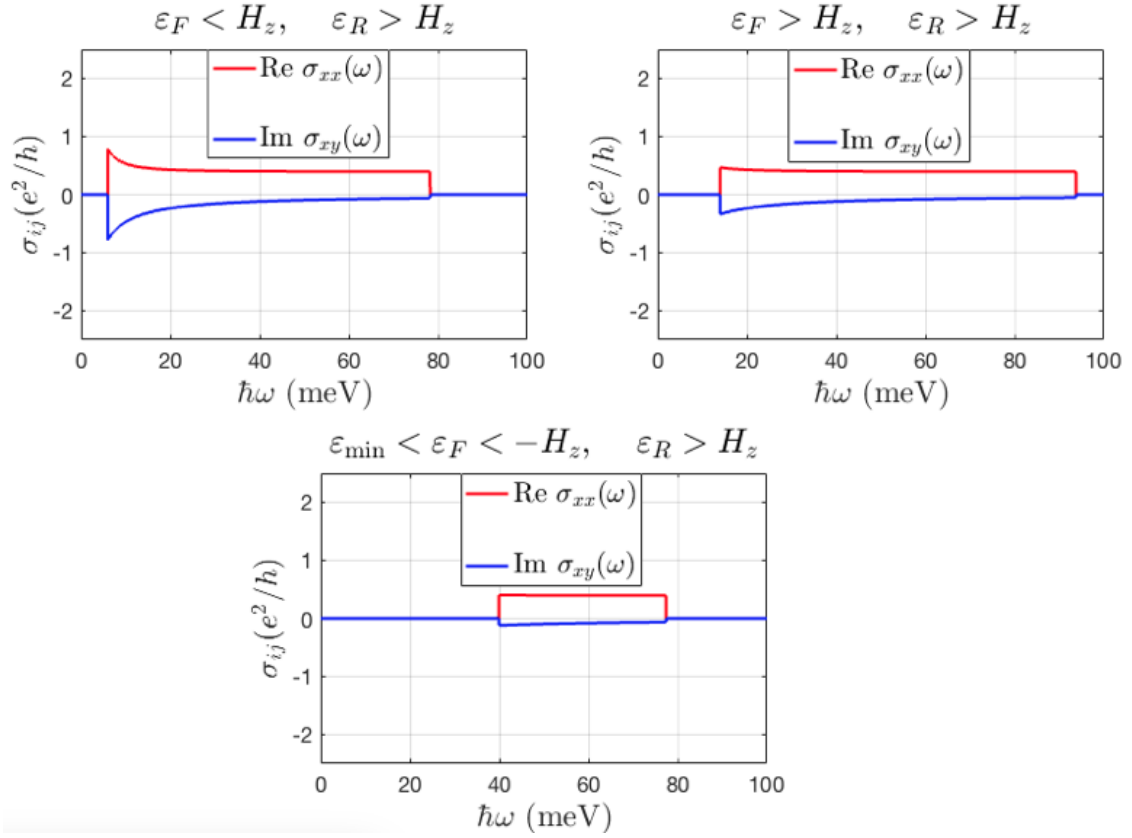


Figura 16: Componentes disipativas del tensor de conductividad $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ y $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$. Puede verse como a bajas frecuencias se da un máximo (mínimo) en la absorción para la componente $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ ($\text{Im } \sigma_{xx}(\omega)$) para las tres distintas posiciones de la energía de Fermi. Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 12.

Se puede ver un máximo en la amplitud para valores cercanos a la frecuencia mínima de transición para posteriormente, tomar un valor casi constante en vista que incrementa la energía de transición, tal como se indica en las figuras 19, 20, que indican la conductividad como función de la frecuencia ω y energía de magnetización H_z , mientras que las figuras 17 y 18 lo hacen de manera similar como función de la frecuencia ω y energía de Fermi ε_F . Este comportamiento pone de manifiesto como la isotropía presente en la dispersión de las bandas de energía permite que todas las regiones angulares del espacio $\mathbf{k}$ disponible para transiciones ópticas contribuyan al espectro de conductividad, lo cual advierte un marcado contraste con el caso en el cual el campo magnético $\mathbf{H}$ presenta alguna(s) componente(s) en dirección al plano del gas electrónico 2D.

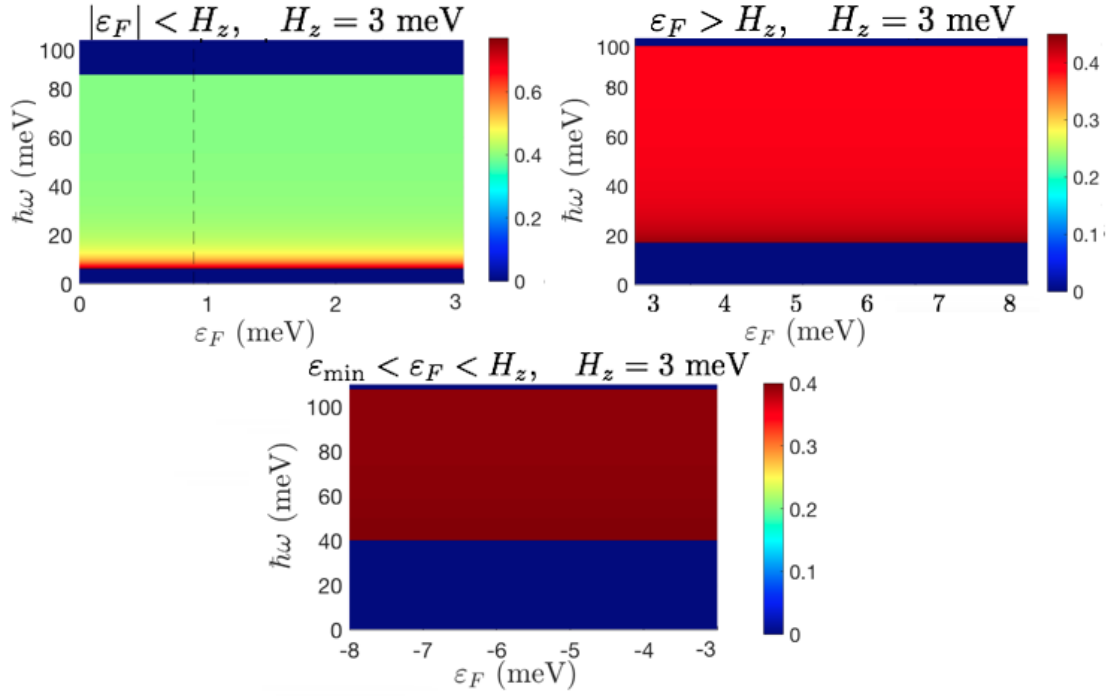


Figura 17: Componente disipativa $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ como función de la frecuencia y energía de Fermi, en los intervalos especificados de ésta, cuando $H_z = 3$ meV y $\epsilon_R > H_z$. Nótese una evolución similar del espectro para todas las componentes a medida que varía el cociente H_z/ϵ_F , alcanzando una amplitud máxima a bajas frecuencias.

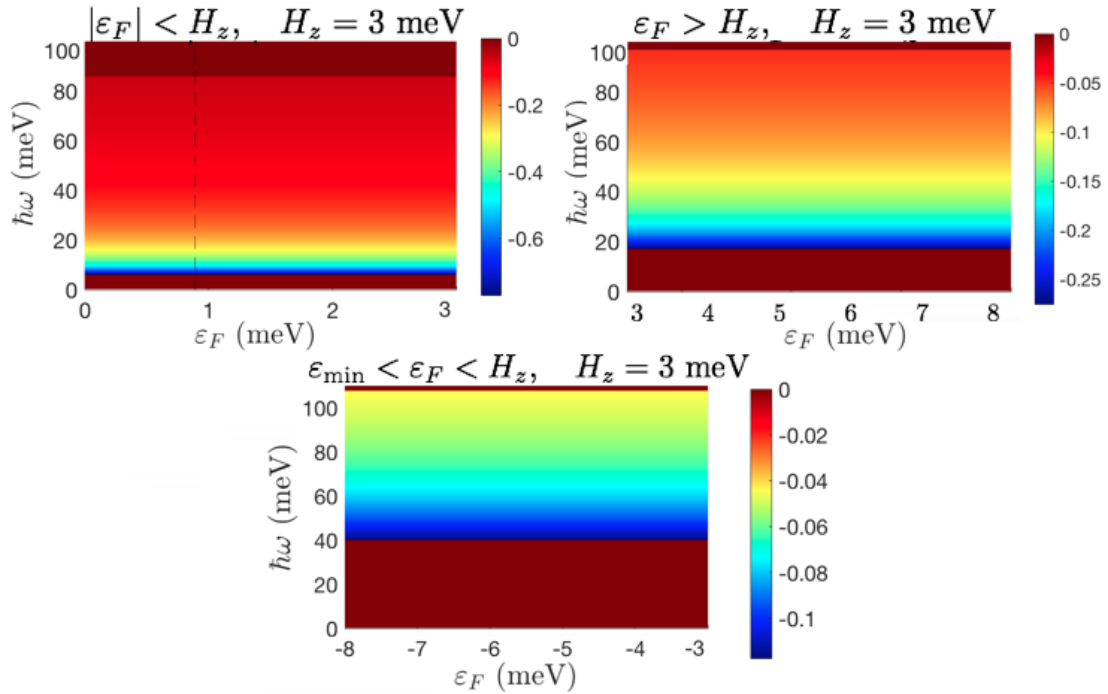


Figura 18: Componente disipativa $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$ como función de la frecuencia y energía de Fermi, en los intervalos especificados de ésta, cuando $H_z = 3$ meV y $\epsilon_R > H_z$. Véase como la evolución del espectro indica una absorción en todo el ancho de banda, con máximos en la amplitud a menores frecuencias.

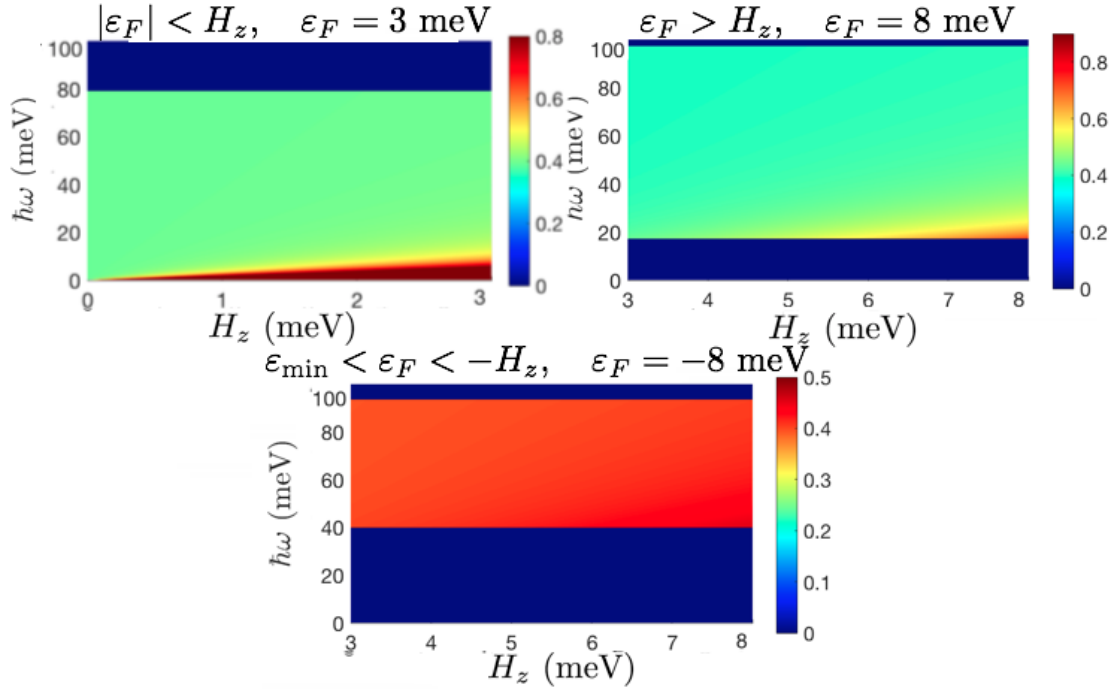


Figura 19: Componente disipativa $\text{Re } \sigma_{xx}(\omega)$ como función de la frecuencia ω y energía de magnetización H_z (meV) para tres distintos valores de energía de Fermi. En los tres casos, se nota un máximo en el pico de absorción a bajas frecuencias a medida que $H_z \rightarrow |\varepsilon_F|$.

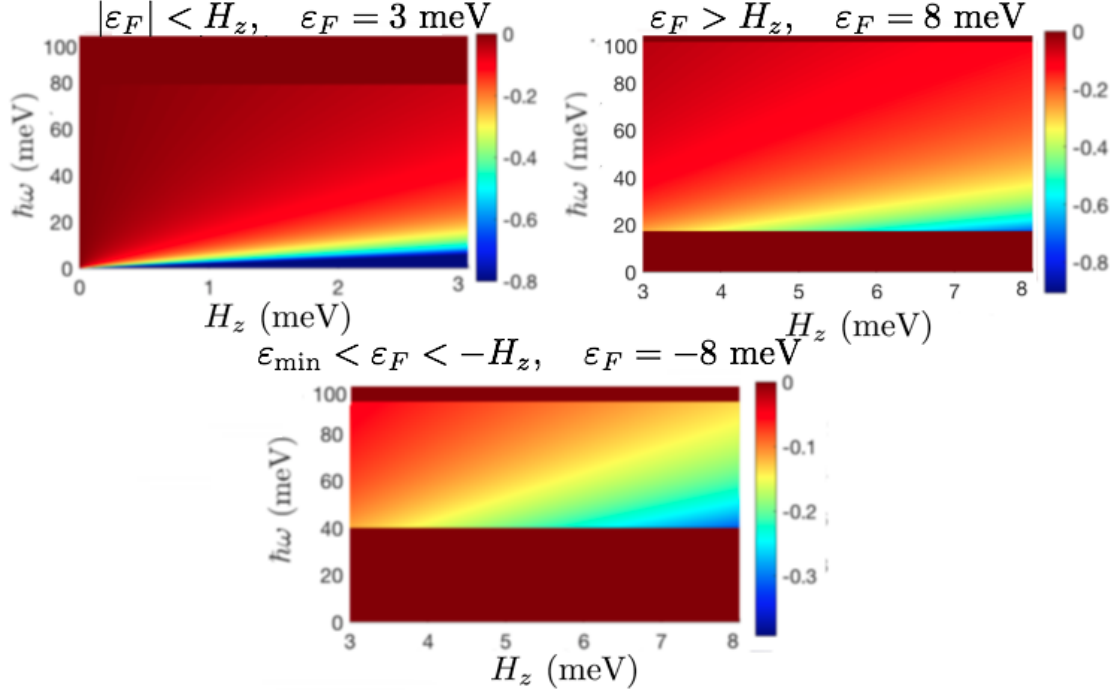


Figura 20: Componente disipativa $\text{Im } \sigma_{xy}(\omega)$ como función de la frecuencia ω y energía de magnetización H_z (meV) para tres distintos valores de ε_F . Se puede ver el característico pico de absorción a bajas frecuencias, cuando $H_z/|\varepsilon_F| \approx 1$, mostrando un mayor cambio en la amplitud en este caso respecto a las componentes reales.

4.4. Dicroísmo circular

De acuerdo a la expresión (48) la potencia de absorción de luz polarizada linealmente está determinada solo por la parte real de $\sigma_{xx}(\omega)$, comentada en la sección anterior. Sin embargo, en el caso de polarización circular, vemos que la existencia de las componente transversales, tales que $\sigma_{yx}(\omega) = -\sigma_{xy}(\omega)$, causa que la potencia absorbida sea diferente según la helicidad de la polarización. Este dicroísmo circular queda caracterizado por la parte real de la función respuesta $\sigma_{\pm}(\omega)$ (51)

$$\begin{aligned}\text{Re } \sigma_{\pm}(\omega) &= \text{Re}\{[\sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega)] \pm i[\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)]\} \\ &= 2 \text{Re}[\sigma_{xx}(\omega) \pm i\sigma_{xy}(\omega)].\end{aligned}\tag{115}$$

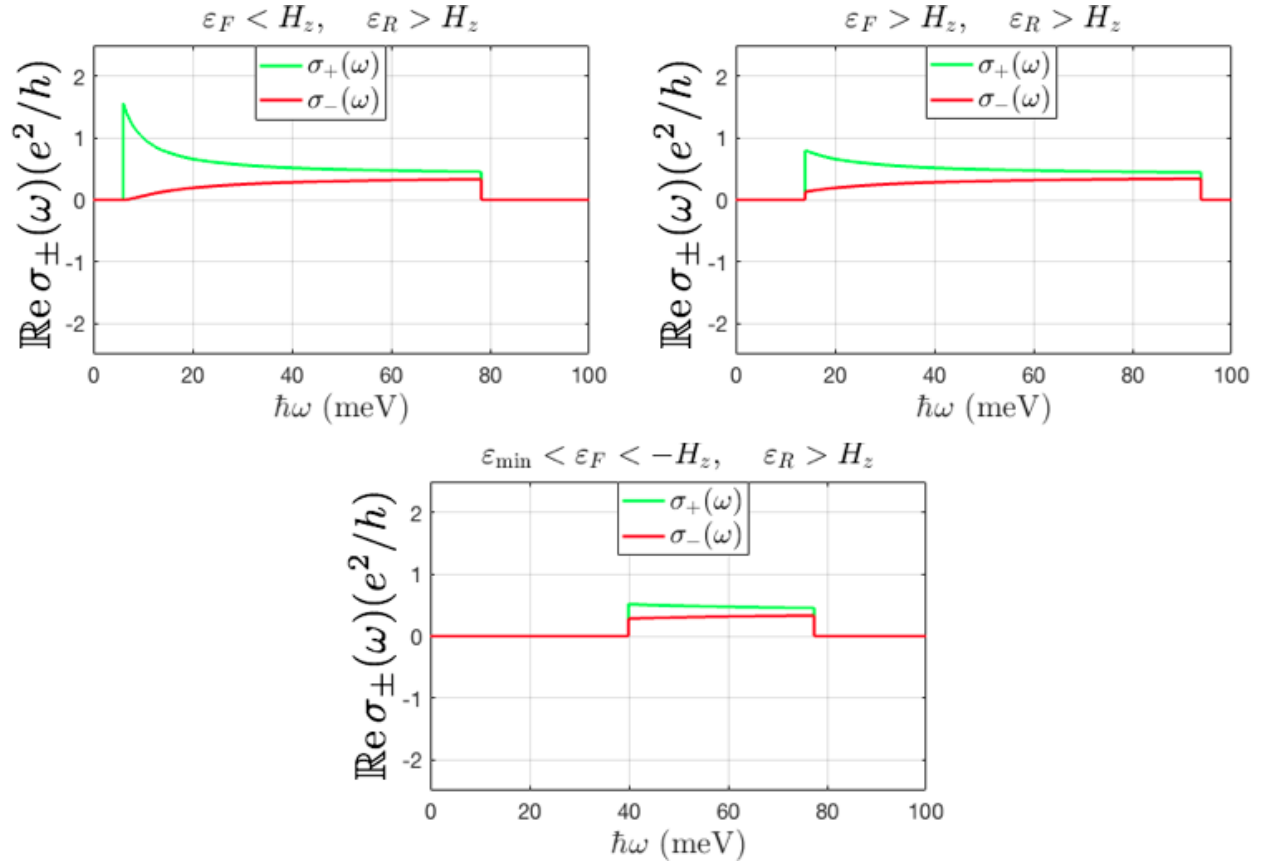


Figura 21: Parte real de la conductividad $\sigma_{\pm}(\omega)$ para polarización circular $\mathbf{E}_{\pm}(\omega)$. Los valores en los parámetros son los mismos que en la figura 16.

Los cálculos para $\text{Re } \sigma_{\pm}(\omega)$ que se exhiben en la figura 21, evidencian un dicroísmo circular en este sistema a consecuencia que la componente Hall en el tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ no desaparece. En general, se tiene una mayor absorción en $\sigma_+(\omega)$ (RCP) para los tres casos de distintas posiciones de nivel de Fermi, las cuales evidencian un pico de absorción a la frecuencia mínima de transición, el cual

disminuye en tanto que aumenta la energía requerida para llevar a cabo tal transición. Por otra parte, se puede ver el caso contrario para $\sigma_{-}(\omega)$ (LCP), donde los espectros evidencian una ausencia en los picos en la absorción en todo el intervalo de frecuencias, además de una menor absorción en comparación con el $\sigma_{+}(\omega)$, aunque aquí tiende a aumentar conforme la energía requerida aumenta. Estos resultados dejan en manifiesto como debido a la ruptura de TRS, se manifiesta un dicroísmo circular en el sistema, tal espectro, al igual que los espectros de conductividad esta delimitado por los bordes de absorción.

Capítulo 5. H orientado en el plano del GE2D

El trabajo realizado por C.M. Wang y M.Q. Pang (Wang y Pang, 2009) considera el caso de un campo magnético orientado en el plano del gas. En dicho trabajo se estudió la polarización de espín y la corriente inducidas por un campo eléctrico externo, donde los resultados muestran una fuerte dependencia de la dirección del campo magnético y la clara diferencia de los espectros respecto al caso en que este campo es nulo (Maytorena, *et al.*, 2006). En el presente capítulo revisamos tal cálculo enfocándonos con detalle en el espectro de transiciones interbanda a través del estudio de la densidad conjunta de estados. Mediante un cálculo analítico de los contornos de Fermi, e identificando el origen de frecuencias críticas, es posible explicar con detalle la forma del espectro de conductividad óptica, en función de la posición del nivel de Fermi y de los parámetros materiales del sistema. Una diferencia importante, que sin embargo requerirá un mayor escrutinio numérico, respecto al trabajo de Wang y Pang es que obtenemos un tensor de conductividad con $\sigma_{xx}(\omega) \neq \sigma_{yy}(\omega)$, lo que significa una anisotropía en la absorción óptica.

5.1. Propiedades del estado base

5.1.1. Eigenenergías, espinores y polarización de espín

El Hamiltoniano (53) cuando $H_z \hat{\mathbf{z}} = 0$ es

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \sigma_0 + \alpha(\mathbf{k} \times \hat{\mathbf{z}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} + H_x \sigma_x \hat{\mathbf{x}} + H_y \sigma_y \hat{\mathbf{y}}. \quad (116)$$

Las eigenenergías (56) son

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \lambda \sqrt{[\alpha k + H \sin(\theta - \phi_0)]^2 + H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}, \quad (117)$$

donde $H = \sqrt{H_x^2 + H_y^2}$ y sus eigenestados

$$|\varepsilon_+\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\gamma}{2} \\ \sin \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad |\varepsilon_-\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\gamma}{2} \\ -\cos \frac{\gamma}{2} e^{i\eta} \end{pmatrix}, \quad (118)$$

con $\tan \eta = \frac{H_y - \alpha k_x}{\alpha k_y + H_x}$, $e^{2i\eta} = \frac{\alpha k_y + H_x + i(H_y - \alpha k_x)}{\alpha k_y + H_x - i(H_y - \alpha k_x)}$, $\gamma = \frac{\pi}{2}$. A diferencia de la situación considerada en el capítulo anterior, en el presente caso la separación anisotrópica de las bandas tendrá un punto de contacto en vectores de onda $\mathbf{k}$ tales³ que $(k_x, k_y) = \frac{1}{\alpha} (H_y, -H_x)$.

³Ya que $d_x(\mathbf{k}) = H_x + \alpha k_y = 0$ y $d_y(\mathbf{k}) = H_y - \alpha k_x = 0$.

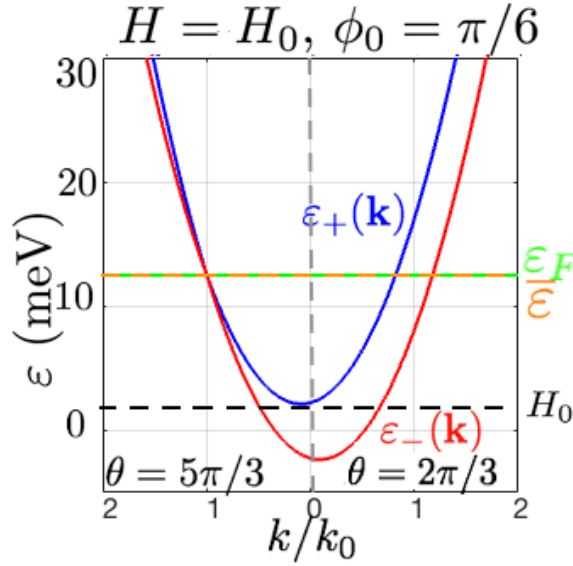


Figura 22: Bandas de energía y contornos de Fermi para $H = H_0 = \alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar \approx 2.25$ meV, con $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eVm y $\varepsilon_R < H$; $k_0 = \sqrt{2\pi N} \approx 1.12 \times 10^8$ m $^{-1}$. Se puede ver la degeneración en las bandas de energía al nivel de Fermi en la dirección $\theta = 5\pi/3$ a una energía $\bar{\varepsilon} = 12.5$ meV $= \varepsilon_F$.

Lo anterior implica que el punto de degeneración va en dirección perpendicular al campo $\mathbf{H}_{\parallel} = (H_x, H_y)$ en la línea $\hat{\mathbf{e}}_0 \cdot \hat{\mathbf{k}} = 0$, siendo $\hat{\mathbf{e}}_0 = \cos \phi_0 \hat{\mathbf{x}} + \sin \phi_0 \hat{\mathbf{y}}$ y $\bar{\varepsilon} = \frac{\hbar^2 H^2}{2m\alpha^2}$ la energía en este punto. Se puede verificar en la figura 22 que al nivel de Fermi las bandas de energía se tocarán entre sí a un valor particular H_0 del campo externo, el cual está dado por $H_0 = \frac{\alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar}$.

Por otra parte, el vector de polarización de espín (14) se encuentra dado por

$$\langle \varepsilon_{\lambda} | \boldsymbol{\sigma}_i | \varepsilon_{\lambda} \rangle = \lambda (\sin \eta \hat{\mathbf{x}} - \cos \eta \hat{\mathbf{y}}). \quad (119)$$

La figura 23 (derecha) muestra cómo un campo magnético en el plano provoca una alineación del espín de aspecto semejante al caso en el cual se tenga presencia de IEO Rashba sin un campo magnético externo (misma figura, izquierda). Aunque en este caso la polarización neta de espín es cero tal como lo describe la ecuación (119), se puede notar el aspecto anisotrópico de las bandas de energía dada una dirección de magnetización en el plano $k_x - k_y$.

5.1.2. Contornos de Fermi y frecuencias críticas

Tomando como punto de partida las expresiones (60), (61), (62), (63) y (64) obtenidas en el capítulo 3, es posible encontrar los contornos de Fermi cuando $\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$ (es decir, tomando el ángulo de magnetización polar $\theta_0 = \pi/2$), los cuales se presentan a continuación en función del factor de ocupación de las bandas.

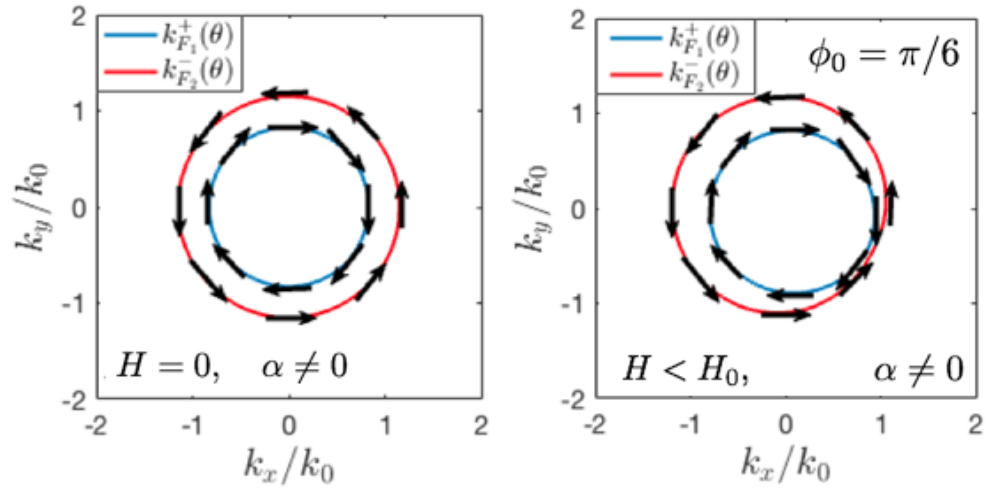


Figura 23: Orientación del espín en las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ (azul) y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ (rojo) cuando no hay campo (izquierda) y cuando el campo está en el plano del gas en la dirección $\phi_0 = \pi/6$ (derecha) donde $\varepsilon_R < H$ ($\varepsilon_R = 0.2\text{meV}$), la energía de magnetización es $H = 2.9\text{ meV}$. Habrá un punto de contacto entre las bandas en la dirección $\theta = 5\pi/3$.

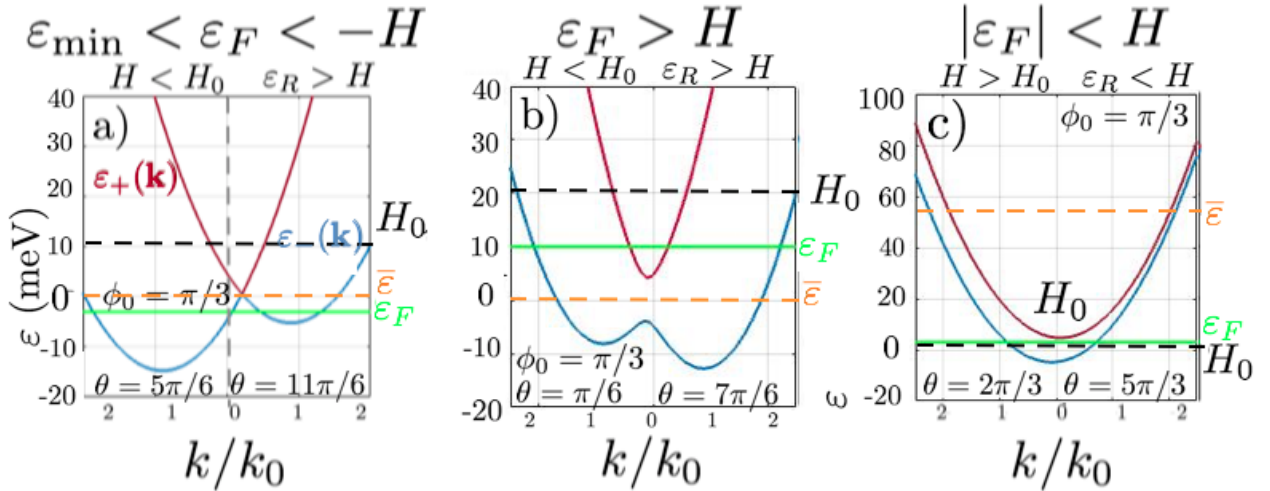


Figura 24: Bandas de energía en varias direcciones θ para $\phi_0 = \pi/3$ y varios valores del nivel de Fermi ε_F , con $\alpha = 20 \times 10^{-11}\text{ eVm}$ (figuras a, b) y $\alpha = 2 \times 10^{-11}\text{ eVm}$ (figura c) con $H = 4.75\text{ meV}$ en todos los casos. Las líneas en color verde representan la energía de Fermi, las líneas punteadas en color anaranjado (negro), indican $\bar{\varepsilon} = H^2/2\varepsilon_R$ ($H_0 = \alpha\sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar$), donde $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2$ es la energía característica del acoplamiento Rashba. Se puede ver que a medida que varía el nivel de Fermi, cambia la región en el espacio $\mathbf{k}$ disponible para las transiciones ópticas. En los casos a) $\varepsilon_F = -3\text{ meV}$ ($H_0 = 11\text{ meV}$, $\bar{\varepsilon} = 0.56\text{ meV}$) y b) $\varepsilon_F = 10\text{ meV}$ ($H_0 = 20\text{ meV}$, $\bar{\varepsilon} = 0.56\text{ meV}$) se tiene $\varepsilon_R > H$ y c) $\varepsilon_F = 3\text{ meV}$ ($H_0 = 1.1\text{ meV}$, $\bar{\varepsilon} = 56\text{ meV}$).

■ $|\varepsilon_F| < H$

Para el caso en el cual solo la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ se encuentre ocupada al nivel de Fermi, de acuerdo a la figura 24 (derecha), se tiene

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (120)$$

donde $x = \alpha k$, $a = -4\varepsilon_R^2(1 + \text{sgn}(\varepsilon_F)/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$. Se puede presentar cuando $\varepsilon_R < H$.

■ $\varepsilon_F > H$

En el caso en el cual ambas bandas de energía se encuentren ocupadas al nivel de Fermi, tal como lo muestra la figura 24 (centro), se tienen las soluciones

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (121)$$

$$k_F^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (122)$$

donde $x = \alpha k$, $a = -4\varepsilon_R^2(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$. Esta situación puede presentarse si $\varepsilon_R > H$, tal como se ve en la figura 24 b) o $\varepsilon_R < H$, como la presente en la figura 26, más abajo.

■ $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -H$

Si el desdoblamiento de las bandas de energía permite que se formen dos mínimos en la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, y la energía de Fermi se encuentra en un valor tal que la situación de la figura 24 (izquierda) se presente

$$k_{F,1} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (123)$$

$$k_{F,2} = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (124)$$

donde $x = \alpha k$ con $a = -4\varepsilon_R^2(1 - |\varepsilon_F|/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$ y las raíces $k_{F,2}^+$, $k_{F,2}^-$ corresponderán a los valores k de las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. Es el único caso en el cual estrictamente se debe cumplir que $\varepsilon_R > H$.

Las frecuencias críticas se obtienen tomando como base las expresiones obtenidas para el caso en el cual $\mathbf{H}$ tiene una dirección arbitraria (67), tomando el ángulo $\theta_0 = \pi/2$. De esta forma, las frecuencias

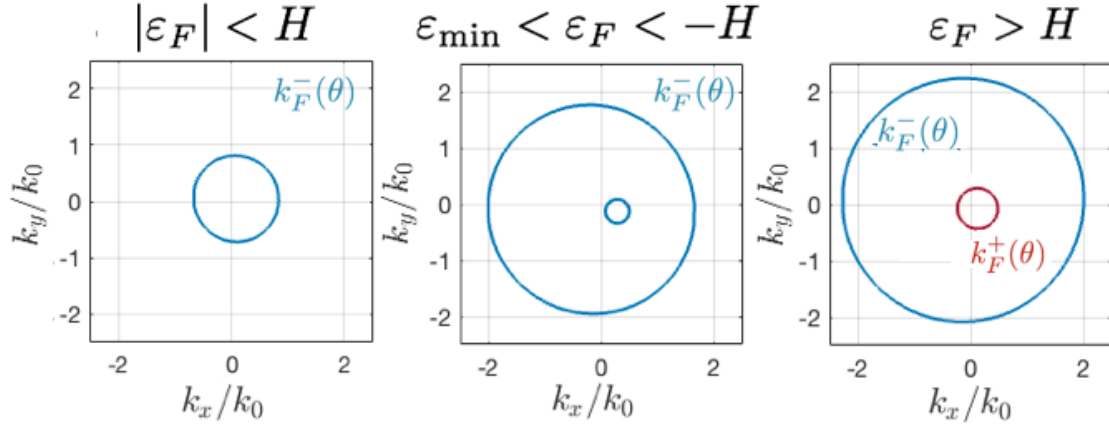


Figura 25: Contornos de Fermi para distintas posiciones del nivel de Fermi un campo magnético en el plano. Se observa como cambia la región del espacio $\mathbf{k}$ disponible para transiciones ópticas en tanto que cambia el nivel de Fermi. Los parámetros son los mismos que en la figura 24.

críticas obtenidas son

$$\begin{aligned}
 \omega_{\min}(\theta, \phi_0) &= 2 \left[-\nu \frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], & (\theta = \phi_0 + 3\pi/2), \\
 \omega_1(\theta, \phi_0) &= 2 \left[\frac{\nu m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], & (\theta = \phi_0 + 3\pi/2), \\
 \omega_2(\theta, \phi_0) &= 2 \left[-\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], & (\theta = \phi_0 + \pi/2), \\
 \omega_{\max}(\theta, \phi_0) &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], & (\theta = \phi_0 + \pi/2),
 \end{aligned} \tag{125}$$

las cuales obedecen $\omega_{\min} < \omega_1 < \omega_2 < \omega_{\max}$, con $\nu = -1$ cuando $H > H_0$ y $\nu = 1$ si $H_0 > H$, sin embargo, ω_1 y ω_2 se intercambian cuando $\varepsilon_R > H$.

Partiendo de la condición (16) con (117),

$$2d(\mathbf{k}(\theta)) = 2\sqrt{H^2 + \alpha^2 k^2 + 2\alpha(k_x H_y - H_x k_y)} = \hbar\omega \tag{126}$$

con lo cual se define la curva de resonancia $C_r(\omega)$

$$\left(k_x - \frac{H_y}{\alpha}\right)^2 + \left(k_y + \frac{H_x}{\alpha}\right)^2 = \left(\frac{\hbar\omega}{2\alpha}\right)^2, \tag{127}$$

que representa la ecuación de una circunferencia centrada en $C(H_y/\alpha, -H_x/\alpha)$ y radio $r = \frac{\hbar\omega}{2\alpha}$. En la figura 27 se muestran los contornos de Fermi y las curvas de resonancia $C_r(\omega)$ para el caso en el

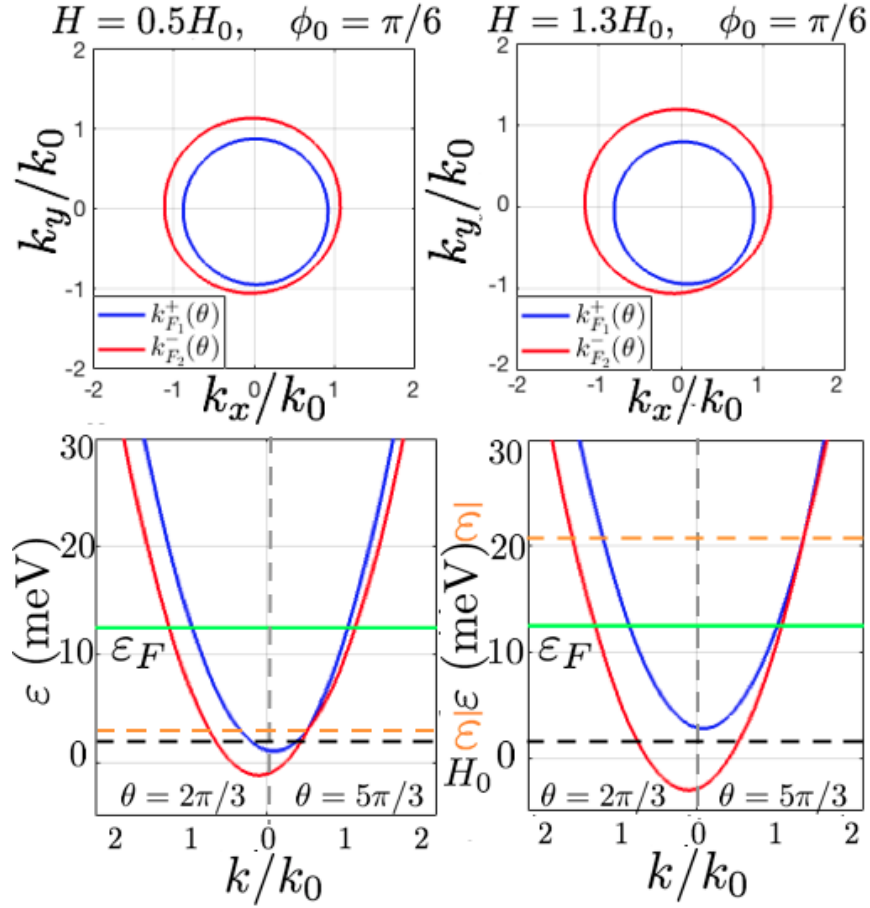


Figura 26: Energías y contornos de Fermi para una dirección de magnetización fija $\phi_0 = \pi/6$ y dos valores de su magnitud, por arriba ($H = 0.5H_0$) y por debajo ($H = 1.3H_0$) de $H_0 = 1.23$ meV. Los parámetros son los mismos que la figura 22, donde se tiene $\bar{\varepsilon} = 3.125$ meV para $H = 0.5H_0$ y $\bar{\varepsilon} = 21.125$ meV para $H = 1.3H_0$.

cual se tienen ocupadas ambas bandas al nivel de Fermi empleando los mismos parámetros que en la figura 26 (derecha). Se puede ver como los cambios en las transiciones permitidas a medida que varía la frecuencia, se reflejan en la curva de resonancia $C_r(\omega)$, dada la región angular disponible para transiciones ópticas entre $k_F^+(\theta)$ y $k_F^-(\theta)$. Ya que las transiciones permitidas se dan por los puntos de $C_r(\omega)$ que caigan en esta región angular, se puede ver que no todas las regiones angulares contribuirán a la integral para la densidad conjunta de estados.

Además, se observa en la misma figura que $\omega_{\min}$ define una circunferencia $C_r(\omega)$ tangente interna a $k_F^+(\theta)$, mientras que $\omega_{\max}$ lo hace cuando $k_F^-(\theta)$ es tangente interna a $C_r(\omega)$. Las frecuencias ω_1 y ω_2 , siendo $\omega_1 < \omega_2$ al igual que en el caso de $\mathbf{H}$ con una dirección arbitraria también corresponden a picos en la absorción, delimitan circunferencias, en este caso ω_1 se da cuando $C_r(\omega)$ es tangente interna a $k_F^-(\theta)$, mientras que ω_2 se da cuando $k_F^+(\theta)$ es tangente interna a $C_r(\omega)$ para distintos valores de H .

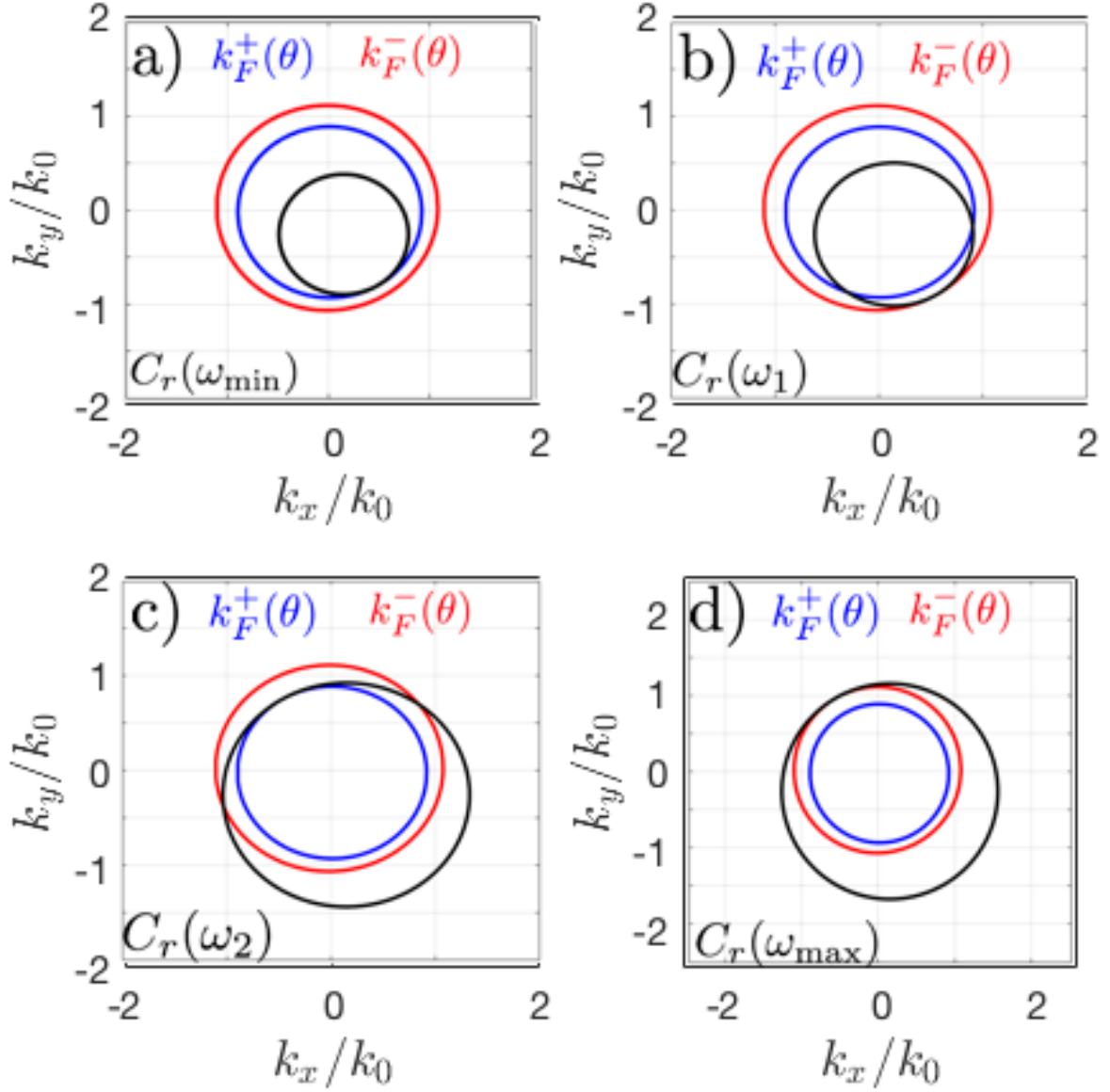


Figura 27: Contornos de Fermi y curvas de resonancia $C_r(\omega)$ para un gas electrónico 2D con IEO Rashba magnetizado, donde las curvas en color negro corresponden a la curva de resonancia $C_r(\omega)$ descrita por (127), correspondientes a la situación $H > \varepsilon_R$ para el caso $H < H_0$. A una frecuencia dada, solo aquellos estados cuyos vectores de onda caen sobre el arco de la curva de resonancia contenido dentro de la región encerrada por los contornos de Fermi están disponibles para transiciones verticales y contribuirán a la respuesta óptica. Tal restricción es consecuencia de los principios de exclusión y conservación de energía. Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 6, tomando el ángulo de magnetización $\theta_0 = \pi/2$.

5.2. Densidad conjunta de estados

Usando la relación (70) es posible expresar la densidad conjunta de estados (69) para el caso en cual el campo magnético esta orientado en el plano del gas (y $\varepsilon_F > H$), esto es $\mathbf{H} = (H_x, H_y)$ como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_1(\theta)}^{k_2(\theta)} k dk \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))] \Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega] \delta[2d(k(\theta)) - \hbar\omega], \quad (128)$$

siendo Θ la función escalón y

$$d(k_F^\lambda(\theta)) = \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^\lambda{}^2 + 2\alpha H k_F^\lambda \sin(\theta - \phi_0)}. \quad (129)$$

Por medio de la relación

$$\delta[2d(k(\theta)) - \hbar\omega] = \frac{\hbar\omega}{4\alpha} \frac{\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}}, \quad (130)$$

donde

$$k_\pm^*(\theta) = \frac{-H \sin(\theta - \phi_0) \pm \sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}}{\alpha}, \quad (131)$$

con $k_\pm^*(\theta) > 0$ definida por la ecuación $2d(k^*(\theta)) = \hbar\omega$ y la condición $k_1(\theta) \leq k_\pm^*(\theta) \leq k_2(\theta)$, la cual a su vez implica que $2d(k_1(\theta)) \leq \hbar\omega \leq 2d(k_2(\theta))$ y

$$-\frac{\hbar\omega}{2H} \leq \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_0 \leq \frac{\hbar\omega}{2H}. \quad (132)$$

De este modo se puede escribir la ecuación (128) para densidad conjunta de estados como

$$D_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2\alpha} \int_0^{2\pi} k^*(\theta) d\theta \Theta[(\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|)] \\ \times \Theta[\hbar\omega - 2d(k_F^+(\theta))] \Theta[2d(k_F^-(\theta)) - \hbar\omega] \frac{\delta(k - k_+^*(\theta)) + \delta(k - k_-^*(\theta))}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}}. \quad (133)$$

En las figuras 28, 29 y 30 se puede observar la densidad conjunta de estados (izquierda) y la región angular disponible para transiciones ópticas en función de la frecuencia (derecha) para una dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$. Para observar el efecto que produce en las transiciones permitidas un cambio en la energía de magnetización, se presentan los casos en los cuales H tiene el valor $H = 0.3H_0 \approx 0.675$ meV y $H = 0.5H_0 \approx 1.125$ meV ($H_0 \approx 2.25$ meV), los cuales evidencian un incremento en el ancho de banda de absorción, el cual esta dado por la diferencia $\Delta\varepsilon = \hbar(\omega_{\text{máx}} - \omega_{\text{mín}})$ y es de $\Delta\varepsilon \approx 3.5$ para

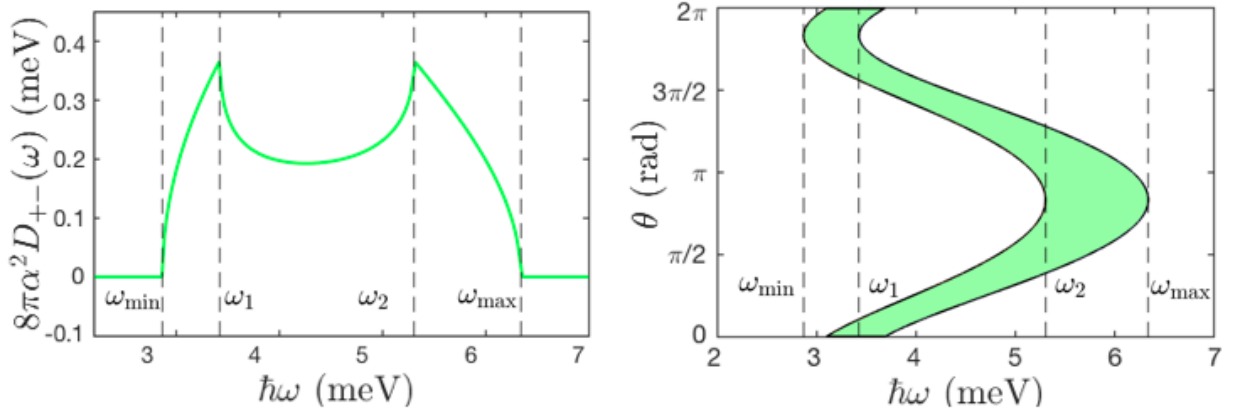


Figura 28: Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para transiciones verticales en función de la frecuencia para una energía de magnetización $H = 0.3H_0 \approx 0.675$ meV, una $\varepsilon_F = 12.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} \approx 2.8$ meV y $\hbar\omega_{\max} \approx 6.3$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 3.5$ meV, donde $\varepsilon_R < H$

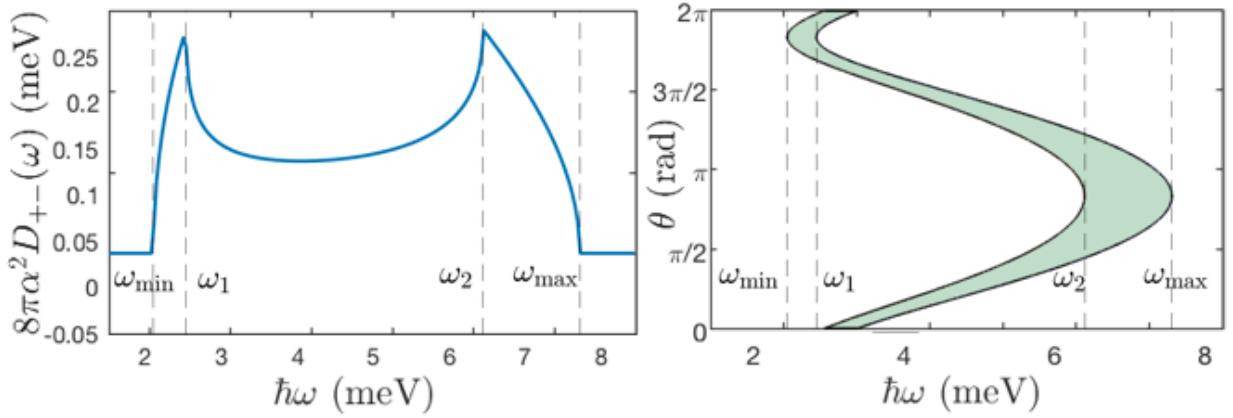


Figura 29: Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para $H = 0.5H_0 \approx 1.125$ meV una $\varepsilon_F = 12.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} = 2$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 7.3$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 5.3$ meV y $\varepsilon_R < H$

$H = 0.3H_0$ y $\Delta\varepsilon \approx 5.3$ meV para $H = 0.5H_0$. A consecuencia de esto, se tiene un desplazamiento en los picos del espectro hacia frecuencias menores en el caso de ω_1 y mayores para ω_2 , mientras que para observar el efecto que produce un cambio en la energía de Fermi, se emplearon dos ε_F del orden de $\varepsilon_F = 7.5$ meV y $\varepsilon_F = 12.5$ meV, mostrando un efecto semejante para ω_1 y ω_2 siendo que en todos los casos $\varepsilon_R < H$.

Por otra parte, para analizar la dependencia de la densidad conjunta de estados y la región angular disponible para transiciones ópticas con la dirección de magnetización, se muestran las figuras 28 y 31, en ambos casos se emplea una misma energía de Fermi $\varepsilon_F = 12.5$ meV y energía de magnetización

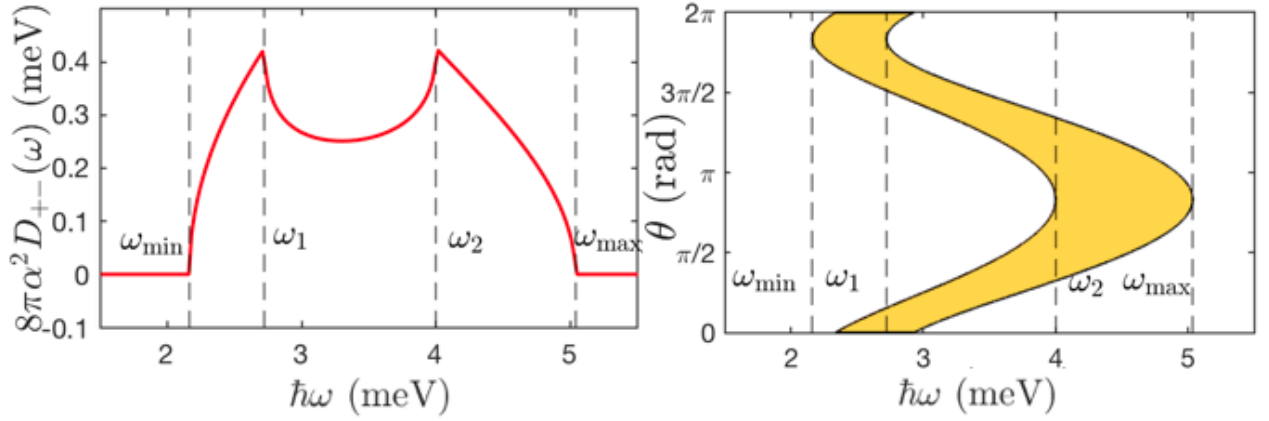


Figura 30: Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para $H = 0.3H_0 \approx 1.125$ meV una $\varepsilon_F = 7.5$ meV y un ángulo $\phi_0 = \pi/3$, donde $\hbar\omega_{\min} = 2.1$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 5$ meV y un ancho de banda de absorción $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV y $\varepsilon_R < H$

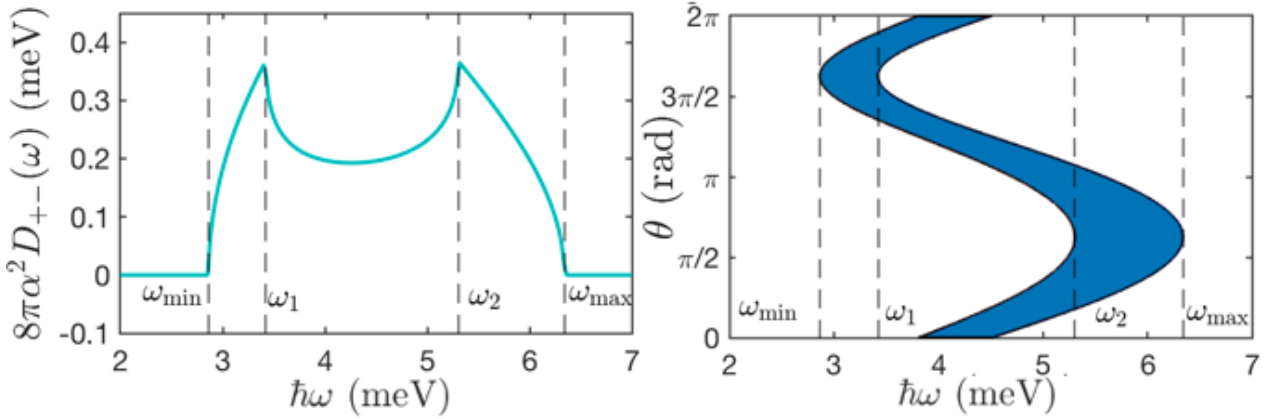


Figura 31: Densidad conjunta de estados (izquierda) y región angular disponible para transiciones ópticas (derecha) como función de la frecuencia ω para la dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/8$. Los parámetros son los mismos que en la figura 28.

$H = 0.3H_0 \approx 0.675$ meV, las cuales manifiestan como la forma de los espectros difiere dado que cambia la dirección de magnetización, siendo $\phi_0 = \pi/3$ y $\phi_0 = \pi/8$ las direcciones para el primer y segundo caso, respectivamente.

Cualquier cambio en la dirección de $\mathbf{H}$ genera un aspecto asimétrico del espectro, el cual dependerá fuertemente de la dirección de ϕ_0 , sin embargo, habrá una mayor similitud en los picos para las frecuencias ω_1 y ω_2 cuando dicho ángulo se acerca a $\pi/4$, dirección en la cual las componentes H_x y H_y serán iguales. De manera similar a la figura 7, los picos en el espectro se deben a excitaciones electrónicas que involucran estados que se encuentran sobre la curva de resonancia $C_r(\omega)$ a frecuencias ω_1 y ω_2 , las cuales de manera similar al caso en el cual $\mathbf{H}$ tiene una dirección arbitraria, corresponden a los puntos

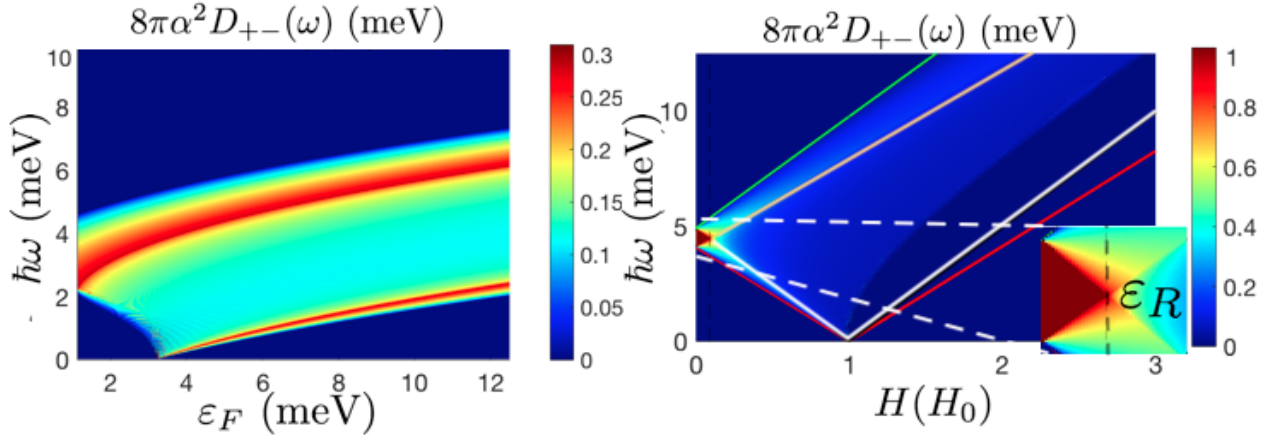


Figura 32: Densidad conjunta de estados como función de la frecuencia y la energía de Fermi ε_F para $H = 0.3H_0 = 0.675$ meV (izquierda), y como función de la energía de magnetización H para $\varepsilon_F = 12.5$ meV (derecha) con una dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$. En la figura izquierda se puede ver la presencia de máximos en todo el ancho de banda de absorción, los cuales se encuentran dados a las frecuencias ω_1 y ω_2 , mientras que en la figura derecha, las líneas indican las frecuencias $\omega_{\min}$ (línea roja), $\omega_{\max}$ (línea verde), así como las singularidades de van Hove ω_1 (línea blanca), ω_2 (línea amarilla).

singulares de van Hove. Es importante señalar que la presencia de las singularidades de van Hove en este sistema, contrasta con sistemas con acoplamiento espín-órbita en ausencia de campos magnéticos (Maytorena, J. *et al.*, 2006).

En la figura 32 se puede observar de manera más completa la evolución de los espectros en la densidad conjunta de estados como función de la frecuencia ω y energía de Fermi (izquierda), así como de la frecuencia ω y la energía de magnetización (derecha). En la medida que incrementa la energía de magnetización y se acerca al valor de la energía de Fermi, la región disponible para transiciones incrementará, aunque paralelamente, la intensidad del espectro disminuye (esto es, el número de transiciones permitidas a una frecuencia determinada).

Sin embargo, cuando $H = \varepsilon_R$, se tiene un hecho interesante, ya que en este caso las frecuencias ω_1 y ω_2 se igualan, lo cual se expresa como un solo pico en el espectro dado por $\omega_1 = \omega_2 = 2 \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{-\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}\varepsilon_F}$, lo cual se puede ver claramente en el acercamiento de la figura 32 (derecha). Por otra parte, si se tiene $\varepsilon_R = m\alpha^2/\hbar^2 > H$, en este caso una pequeña región (comprendida en este caso entre 4 y 5 meV) presenta la mayor amplitud de todo el espectro. Este valor máximo en la densidad conjunta de estados (≈ 1 meV) se puede ver como resultado de un mayor número de transiciones ópticas, lo cual es consecuencia de un mayor desdoblamiento en las bandas de energía en tanto que el cociente ε_R/H se hace más grande.

En general, se nota cómo de forma similar al caso en el cual $\mathbf{H}$ tiene una dirección arbitraria (76), la densidad conjunta de estados presenta una forma asimétrica como consecuencia de la anisotropía en las bandas de energía $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$, lo cual indica que no todas las regiones angulares (parte sombreada de la región angular disponible para transiciones ópticas) contribuyen a la densidad conjunta de estados, tal como se mostró en la figura 27. Esto refleja claramente el aspecto anisotrópico de la separación entre las bandas para un campo $\mathbf{H}$ en el plano.

5.3. Conductividad óptica

Para encontrar las componentes del tensor de conductividad óptica $\sigma_{ij}(\omega)$, se definen las expresiones

$$f_{ij}^{(0)}(\theta) = \delta_{ij}(\cos^2 \theta \delta_{ix} + \sin^2 \theta \delta_{iy}) + (1 - \delta_{ij}) \sin \theta \cos \theta, \quad (134)$$

$$f_{ij}^{(1)}(\theta) = \delta_{ij}(\sin^2 \theta \delta_{ix} + \cos^2 \theta \delta_{iy}) + (1 - \delta_{ij}) \sin \theta \cos \theta, \quad (135)$$

$$f_{ij}^{(2)}(\theta) = 2\delta_{ij}(\cos \phi_0 \sin \theta \delta_{ix} - \sin \phi_0 \cos \theta \delta_{iy}) - (1 - \delta_{ij}) \cos(\theta + \phi_0), \quad (136)$$

$$f_{ij}^{(3)}(\theta) = \delta_{ij}(\alpha k \cos \theta - H_y) + (1 - \delta_{ij})(\alpha k \sin \theta + H_x), \quad (137)$$

$$f_{ij}^{(4)}(\theta) = \delta_{ij}(\alpha k \sin \theta + H_x) + (1 - \delta_{ij})(\alpha k \cos \theta - H_y), \quad (138)$$

$$f_{ij}^{(5)}(\theta) = \delta_{ix}(\alpha k \cos^2 \theta - H_y \cos \theta) + \delta_{iy}(\alpha k \sin^2 \theta + H_x \sin \theta), \quad (139)$$

$$f_{ij}^{(6)}(\theta) = \frac{1}{2} \alpha k \sin(2\theta) + H_i(\delta_{ix} \cos \theta - \delta_{iy} \sin \theta), \quad (140)$$

$$f_{ij}^{(7)}(\theta) = \delta_{jx}(\alpha k \cos^2 \theta - H_y \cos \theta) + \delta_{jy}(\alpha k \sin^2 \theta + H_x \sin \theta), \quad (141)$$

$$f_{ij}^{(8)}(\theta) = \frac{1}{2} \alpha k \sin(2\theta) + H_j(\delta_{jx} \cos \theta - \delta_{jy} \sin \theta), \quad (142)$$

de las que se encuentran las siguientes cantidades involucradas en la fórmula de Kubo (cap.3)

$$\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_j} = \frac{\hbar^4 k^2}{m^2} f_{ij}^{(0)}(\theta), \quad (143)$$

$$\left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 [\alpha^2 k^2 f_{ij}^{(1)}(\theta) + \alpha k H f_{ij}^{(2)}(\theta) + H_i H_j], \quad (144)$$

$$\left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 [\delta_{ix}(\alpha k \cos \theta - H_y) f_{ij}^{(1)}(\theta) + \delta_{iy}(\alpha k \sin \theta + H_x) f_{ij}^{(2)}(\theta)], \quad (145)$$

$$\lambda \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} = \lambda \frac{\alpha \hbar^2 k}{m} \delta_{ij} f_{ij}^{(5)}(\theta) + (1 - \delta_{ij}) f_{ij}^{(6)}(\theta), \quad (146)$$

$$\lambda \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_j} \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} = \lambda \frac{\alpha \hbar^2 k}{m} \delta_{ji} f_{ij}^{(7)}(\theta) + (1 - \delta_{ji}) f_{ij}^{(8)}(\theta), \quad (147)$$

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 d_z \epsilon_{zij} = 0. \quad (148)$$

De (148), se encuentra que

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = & -\frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} \\ & \times \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right) \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})), \end{aligned} \quad (149)$$

por tanto el tensor de conductividad (38) toma la forma

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= \sigma_{ij}^{inter}(\omega) + \sigma_{ij}^{intra}(\omega) \\ &= \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) + \sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) + \sigma_{ij}^{intra}(\omega) \\ &= \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) + i \left(\text{Im } \sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) + \text{Im } \sigma_{ij}^{intra}(\omega) \right), \end{aligned} \quad (150)$$

usando la relación

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) + \sigma_{ij}^{inter,d}(\omega) = \delta_{ij} \frac{ine^2}{m\tilde{\omega}} \quad (151)$$

donde $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$, $\eta = \tau^{-1}$ es un parámetro disipativo y n es el número de portadores de carga, el tensor de conductividad definido en (38) toma la siguiente forma

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\omega) &= \delta_{ij} \frac{ne^2}{m} \frac{i\omega + \eta}{\omega^2 + \eta^2} + \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) \\ &= \underbrace{\delta_{ij} \frac{ne^2}{m} \frac{\eta}{\omega^2 + \eta^2} + \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega)}_{\text{Re } \sigma_{ij}(\omega)} + i \underbrace{\left(\delta_{ij} \frac{ne^2}{m} \frac{\omega}{\omega^2 + \eta^2} + \text{Im } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) \right)}_{\text{Im } \sigma_{ij}(\omega)}. \end{aligned} \quad (152)$$

Al considerar únicamente la parte real de la contribución interbanda a la conductividad (152), la cual esta dada por (149) se tiene

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = & -\frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int d^2k [f(\varepsilon_+(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_-(\mathbf{k}))] \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \\ & \times \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \frac{\partial \mathbf{d}(\mathbf{k})}{\partial k_j} \right), \end{aligned} \quad (153)$$

haciendo uso de esta propiedad $f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) = \Theta(\varepsilon_F - \varepsilon_\lambda)$ al trabajar en el límite de temperatura cero y

empleando las relaciones $f_{ij}^{(1)}(\theta)$ y $f_{ij}^{(2)}(\theta)$ en coordenadas polares $\mathbf{k} = k(\cos \theta, \sin \theta)$

$$\text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = \frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int \int d\theta dk \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} [\alpha^2 k^2 f_{ij}^{(1)}(\theta) + \alpha k H f_{ij}^{(2)}(\theta) + H_i H_j] \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})). \quad (154)$$

Al satisfacer las condiciones impuestas para $k_1(\theta) \leq k_{\pm}^*(\theta) \leq k_2(\theta)$ es posible expresar (154) como

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16} \left(\frac{2}{\hbar\omega} \right)^2 \int d\theta \frac{\Theta[(\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|)]}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}} \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega] \\ \times \left\{ \alpha^3 [(k_+^*(\theta))^3 + (k_-^*(\theta))^3] f_{ij}^{(1)}(\theta) + \alpha^2 [(k_+^*(\theta))^2 + (k_-^*(\theta))^2] H f_{ij}^{(2)}(\theta) \right. \\ \left. + \alpha [(k_+^*(\theta)) + (k_-^*(\theta))] H_i H_j \right\}, \end{aligned} \quad (155)$$

donde

$$k_{\pm}^*(\theta) = \frac{-H \sin(\theta - \phi_0) \pm \sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}}{\alpha}, \quad (156)$$

con $k_{\pm}^*(\theta) > 0$. Debido a que el interés principal en este trabajo consiste en encontrar la absorción óptica para el GE2D en el caso en cual ambas bandas se encuentran ocupadas al nivel de Fermi ($\varepsilon_F > H$), solo se empleará la parte real de (152). Además, a modo de comparación para la región óptica con el caso discutido en el capítulo (4), solo se mostrarán los resultados para la parte real de la contribución interbanda $\sigma_{ij}^{inter}(\omega)$. Así, las componentes diagonales del tensor de conductividad (155) son

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{xx}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int \int d\theta dk \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} [\alpha^2 k^2 f_{xx}^{(1)}(\theta) + \alpha k H f_{xx}^{(2)}(\theta) + H_x H_x] \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \\ = \frac{\sigma_0}{16} \left(\frac{2}{\hbar\omega} \right)^2 \int d\theta \frac{\Theta[(\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|)]}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}} \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega] \\ \times \left\{ \alpha^3 [(k_+^*(\theta))^3 + (k_-^*(\theta))^3] f_{xx}^{(1)}(\theta) + \alpha^2 [(k_+^*(\theta))^2 \right. \\ \left. + (k_-^*(\theta))^2] H f_{xx}^{(2)}(\theta) + \alpha [(k_+^*(\theta)) + (k_-^*(\theta))] H_x^2 \right\}, \end{aligned} \quad (157)$$

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{yy}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int \int d\theta dk \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} [\alpha^2 k^2 f_{yy}^{(1)}(\theta) + \alpha k H f_{yy}^{(2)}(\theta) + H_y H_y] \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \\ = \frac{\sigma_0}{16} \left(\frac{2}{\hbar\omega} \right)^2 \int d\theta \frac{\Theta[(\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|)]}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}} \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega] \\ \times \left\{ \alpha^3 [(k_+^*(\theta))^3 + (k_-^*(\theta))^3] f_{yy}^{(1)}(\theta) + \alpha^2 [(k_+^*(\theta))^2 \right. \\ \left. + (k_-^*(\theta))^2] H f_{yy}^{(2)}(\theta) + \alpha [(k_+^*(\theta)) + (k_-^*(\theta))] H_y^2 \right\}, \end{aligned} \quad (158)$$

mientras que las componentes no-diagonales con

$$\begin{aligned}
\text{Re } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) &= \frac{\sigma_0}{4\hbar\omega} \int \int d\theta dk \frac{1}{d^2(\mathbf{k})} [\alpha^2 k^2 f_{xy}^{(1)}(\theta) + \alpha k H f_{xy}^{(2)}(\theta) + H_x H_y] \delta(\hbar\omega - 2d(\mathbf{k})) \\
&= \frac{\sigma_0}{16} \left(\frac{2}{\hbar\omega} \right)^2 \int d\theta \frac{\Theta[(\hbar\omega/2H - |\cos(\theta - \phi_0)|)]}{\sqrt{(\hbar\omega/2)^2 - H^2 \cos^2(\theta - \phi_0)}} \Theta[\hbar\omega - 2d(k_1(\theta))] \Theta[2d(k_2(\theta)) - \hbar\omega] \\
&\quad \times \left\{ \alpha^3 [(k_+^*(\theta))^3 + (k_-^*(\theta))^3] f_{xy}^{(1)}(\theta) + \alpha^2 [(k_+^*(\theta))^2 \right. \\
&\quad \left. + (k_-^*(\theta))^2] H f_{xy}^{(2)}(\theta) + \alpha [(k_+^*(\theta)) + (k_-^*(\theta))] H_x H_y \right\} \\
&= \text{Re } \sigma_{yx}^{inter,p}(\omega).
\end{aligned} \tag{159}$$

Si H tiene signo positivo, $k_+^*(\theta)$ es la expresión válida en (157), (158) y (159), mientras que en caso de que H presente signo negativo, i.e. $\mathbf{H} = (-H_x, -H_y)$, será $k_-^*(\theta)$ el valor correcto.

Las expresiones para $\text{Re } \sigma_{xx}^{inter}(\omega)$ y $\text{Re } \sigma_{yy}^{inter}(\omega)$ son equivalentes a las reportadas por C.M Wang y M.Q. Pang (Wang y Pang 2009) para la conductividad de carga. Los términos entre llaves dentro de las integrales para las componentes diagonales (157) y (158) definirán en conjunto la forma característica del espectro de conductividad, la cual se muestra en las figuras que se presentan más adelante. Sin embargo, a consecuencia del peso de la dirección de magnetización ϕ_0 contenida dentro de los términos $\cos \phi_0$ y $\sin \phi_0$, se ha obtenido una discrepancia de $\text{Re } \sigma_{yy}^{inter,p}(\omega)$ respecto al término $\text{Re } \sigma_{xx}^{inter,p}(\omega)$. No es difícil apreciar que si $H \rightarrow 0$, la conductividad dada por la ecuación (155) se reduce al caso con acoplamiento espín-órbita de Rashba, $\text{Re } \sigma_{ij}^{inter,p}(\omega) = \delta_{ij} \sigma_R = \delta_{ij} e^2 / 16\hbar$.

A comparación, se visualiza la influencia de la contribución intrabanda en la figura 33 (izquierda). Ya que tal contribución es dominante respecto a la conductividad interbanda, se puede advertir que al considerarla en el estudio de la absorción total, las diferencias en el espectro serán muy pequeñas. Debido a que en este trabajo nos concentramos en la contribución a la conductividad debido a la interacción espín-órbita, no se considerará el estudio de la contribución intrabanda en el espectro de conductividad en las figuras complementarias a esta sección (y en el posterior estudio de la absorción óptica). El valor de referencia para el parámetro $\tau \approx 1.6 \times 10^{-12} \text{s}$, en $\sigma_{ij}(\omega)$ se obtuvo del trabajo de Wong para la conductividad Hall de espín de 2008 (Wong, *et al.*, 2008).

Una vez dicho lo anterior, estudiar la anisotropía en la conductividad, lo cual refleja la influencia de la dirección de $\mathbf{H}$, se calculará el tensor de conductividad a partir de (155) como función del ángulo de

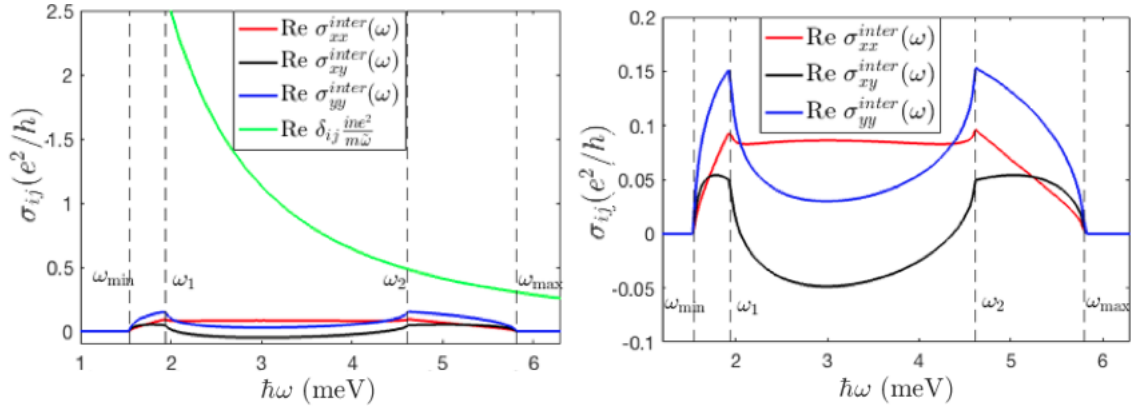


Figura 33: Parte real de la conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$, con (izquierda) y sin (derecha) la contribución intrabanda. La energía de Fermi es $\varepsilon_F = 7.5$ meV, el campo $H = 0.5H_0$ y el ángulo $\phi_0 = \pi/3$. Se puede notar que la contribución intrabanda resulta domina respecto a la contribución Drude.

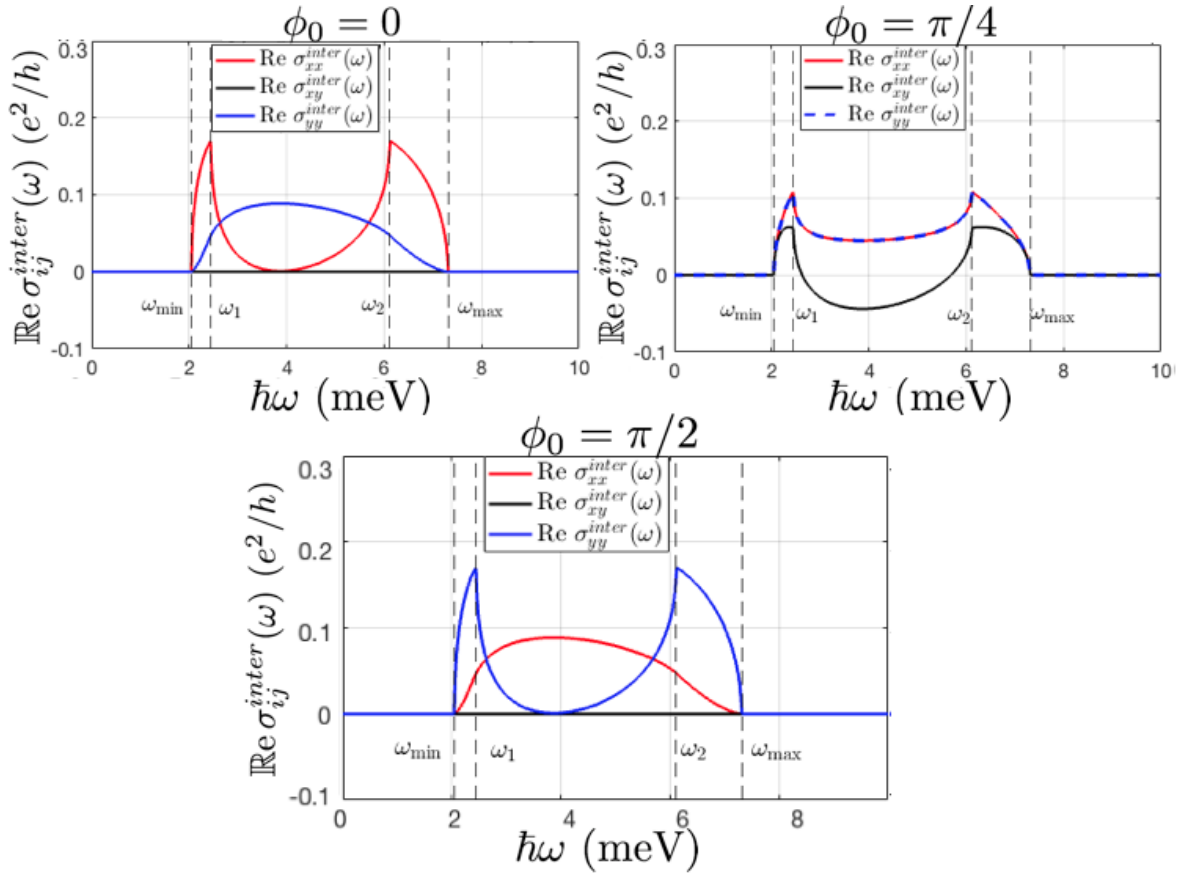


Figura 34: Parte real de la conductividad interbanda para para distintas direcciones de magnetización ϕ_0 con $H = 0.5H_0 = 1.1$ meV ($H_0 \approx 2.25$ meV), $\varepsilon_F = 12.5$ meV y $\alpha = 2 \times 10^{-11}$ eV m. Nótese como la dirección de $\mathbf{H}$ modifica el espectro de manera notable a medida que incide paralela y perpendicularmente a la dirección de $\mathbf{E}$. Las frecuencias son $\hbar\omega_{\min} = 2$ meV, $\hbar\omega_1 = 3.4$ meV, $\hbar\omega_2 = 5.2$ meV y $\hbar\omega_{\max} = 7.4$ meV y un ancho de banda de absorción de $\Delta\varepsilon \approx 5.4$ meV.

magnetización ϕ_0 y la frecuencia (ω). De esta forma, en las figuras 34, 35 y 36 se obtienen los espectros de conductividad para distintos parámetros de ε_F y H . En estos casos, se observa una diferencia en las

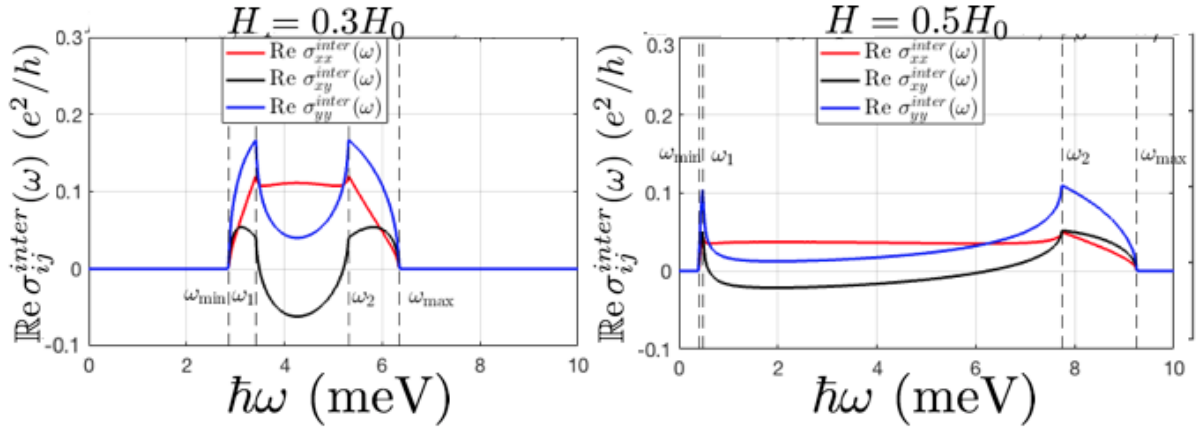


Figura 35: Parte real de la conductividad interbanda para una dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$, con $\varepsilon_F = 12.5$ meV y $H_0 = 2.2$ meV. Véase como cambia la forma del espectro a razón que cambia H/H_0 , lo cual conduce a una menor amplitud en la conductividad a medida que incrementa el ancho de banda de absorción, los cuales en este caso son de $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV para $H = 0.3H_0$ (izq.) a $\Delta\varepsilon \approx 5.2$ meV para $H = 0.9H_0$ (der.)

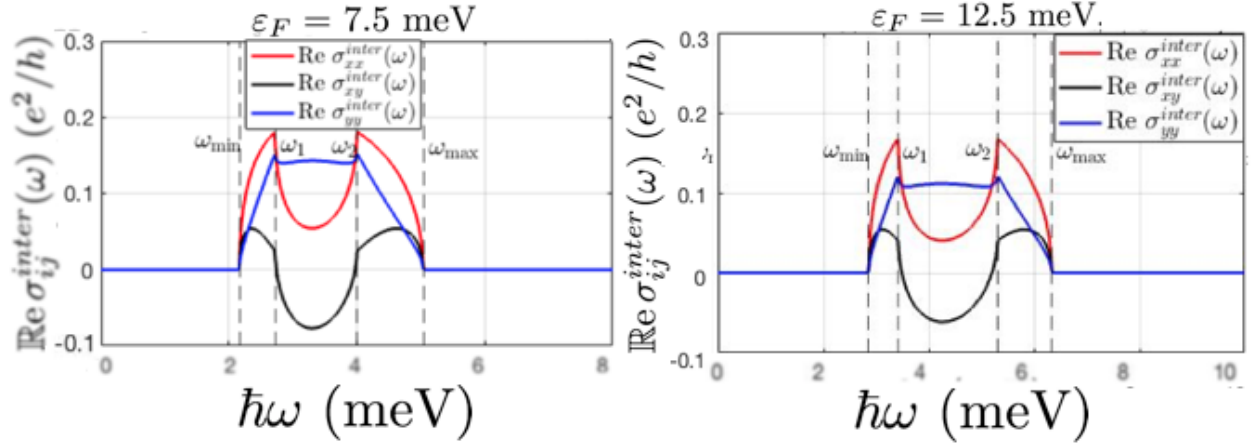


Figura 36: Parte real de la conductividad interbanda para la dirección $\phi_0 = \pi/3$ para distintos valores de ε_F con una energía $H = 0.3H_0$. Adviértase como cambia el ancho de banda absorción con valores mayores de ε_F , el cual pasa de $\Delta\varepsilon \approx 2.9$ meV, donde $H_0 = 1.73$ meV (izq.) a $\Delta\varepsilon \approx 3.6$ meV, siendo en este caso $H_0 = 2.2$ meV (der.).

componentes reales del tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ a medida que varía ϕ_0 , siendo notorio el caso mostrado en la figura 34, donde al emplear los mismos parámetros materiales para distintas direcciones de magnetización se evidencia un cambio notable en la amplitud y forma del espectro de conductividad por el hecho de tomar la dirección ϕ_0 paralela o perpendicular a la dirección de $\mathbf{E}$. Las figuras 35 y 36 confirman cómo al cambiar las energías de magnetización y Fermi, se afecta el ancho de banda de absorción, siendo que ya que a medida que aumentan las energías involucradas, la región cóncava tiende a incrementar y consecuentemente, la conductividad tiende a disminuir dentro de esta región.

Por otra parte, las figuras 37, 38 y 39 exponen de forma más completa la evolución del espectro como

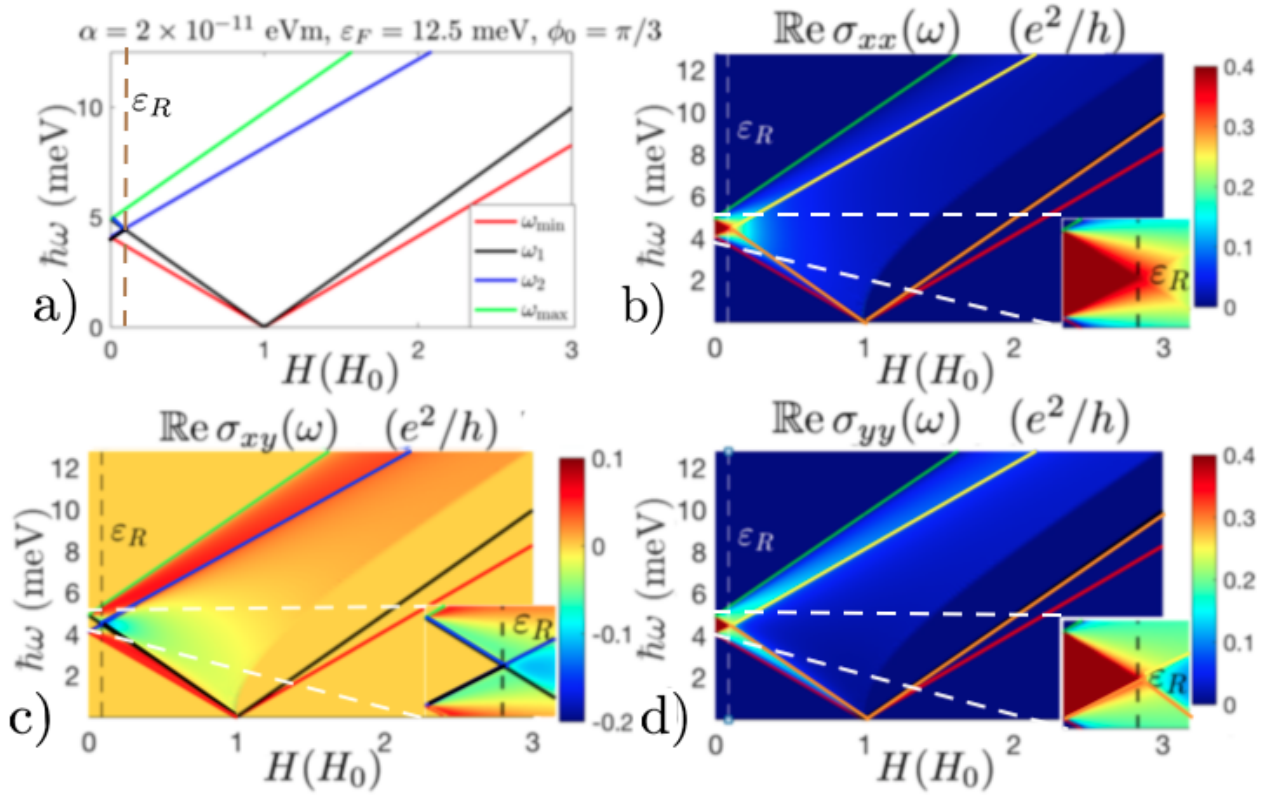


Figura 37: Componentes reales de la conductividad (154) como función de ω y H (b), c) y d)) y frecuencias críticas $\omega_{\min}$, $\omega_{\max}$ y singularidades de van Hove ω_1 y ω_2 como función del campo magnético $H(H_0)$ a) para una energía de Fermi de 12.5 meV. El valor de H esta dado en unidades de $H_0 = \alpha\sqrt{2m\epsilon_F}/\hbar \approx 2.2\text{meV}$. Se puede ver como las componentes diagonales de $\text{Re } \sigma_{ij}(\omega)$ alcanzan el valor máximo dentro del régimen $H < \epsilon_R$, mientras que las componentes Hall prácticamente se anulan dentro de este régimen.

función de la energía de Fermi y la energía de magnetización H . En estas figuras muestran un aumento del ancho de banda de absorción a razón que aumentan estas energías, lo cual ocasiona el desplazamiento de las frecuencias críticas hacia regiones de menor y mayor energía, tal como se señalo en las figuras 35 y 36, de manera similar a lo que se obtuvo cuando $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$, donde se pudo ver que un mayor desdoblamiento en las bandas de energía, ya sea debido al aumento de la energía de magnetización o energía de Fermi, generarán un incremento del espacio $\mathbf{k}$ permitido para transiciones, es decir, un espectro de absorción más amplio. Aunque en estos casos, los espectros de conductividad mostrarán comportamientos distintos en su forma y amplitud, dependiendo de la relación que tengan ϵ_F y H , tal como se puede apreciar en las figuras 40, 41 y 42, las cuales por ejemplo, ilustran claramente un cambio de signo en la componente $\text{Re } \sigma_{xy}(\omega)$ a medida que incrementa la frecuencia y para cualquier dirección de magnetización, hecho que contrasta con lo que se manifiesta en las componentes diagonales.

También se puede ver que las frecuencias como función de H manifiestan un comportamiento lineal, tal como se ilustra en la figura 37. Un dato interesante se presenta cuando $H = H_0$, ya que el mínimo de

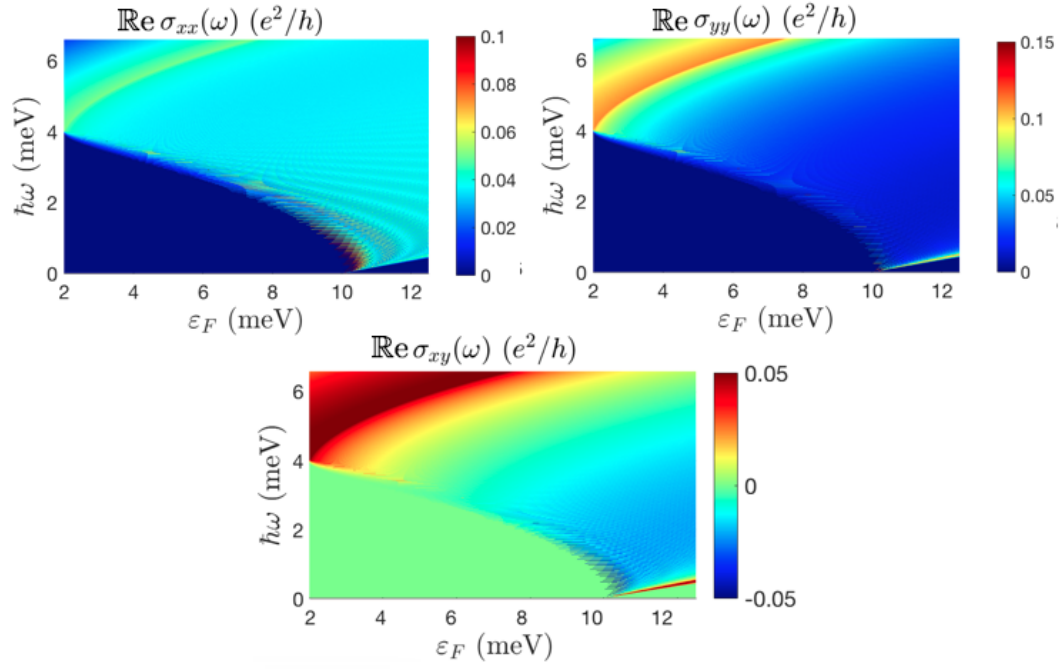


Figura 38: Componentes reales de la conductividad (154) en la dirección $\phi_0 = \pi/3$ para distintos valores de ω y ε_F , con $H = 2$ meV con $H > \varepsilon_R$. El cociente H/ε_F es el factor que determina el valor de la amplitud en $\text{Re} \sigma_{ij}(\omega)$, donde tal valor será mayor a razón que $H/\varepsilon_F \approx 1$. Se aprecia una mayor amplitud en la componente $\text{Re} \sigma_{yy}(\omega)$ respecto a las componentes $\text{Re} \sigma_{xx}(\omega)$, $\text{Re} \sigma_{xy}(\omega)$, por la dirección de magnetización $\phi_0 = \pi/3$.

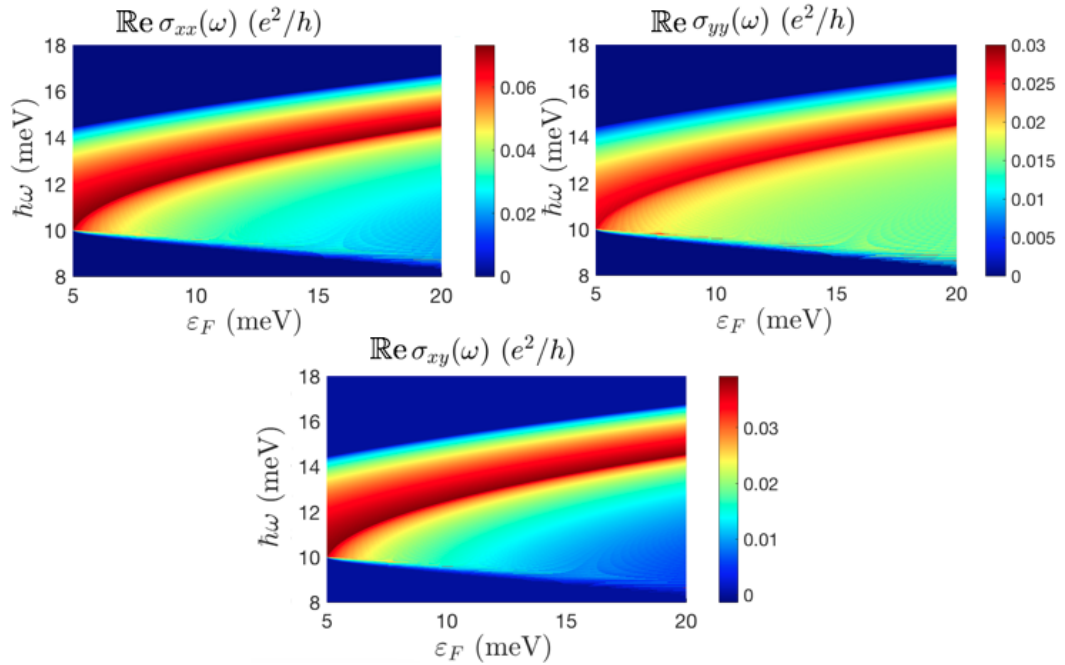


Figura 39: Componentes reales de la conductividad (154) en la dirección $\phi_0 = \pi/6$ con un valor $H = 4$ meV para distintos valores de ω y ε_F , con $H > \varepsilon_R$. Se observa una mayor amplitud en la componente $\sigma_{xx}(\omega)$ respecto a las componentes $\sigma_{yy}(\omega)$, $\sigma_{xy}(\omega)$, debido a la dirección de H . A razón que aumenta la energía de Fermi, incrementará el espacio $\mathbf{k}$ para las transiciones entre las bandas de energía $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, aunque la amplitud disminuye.

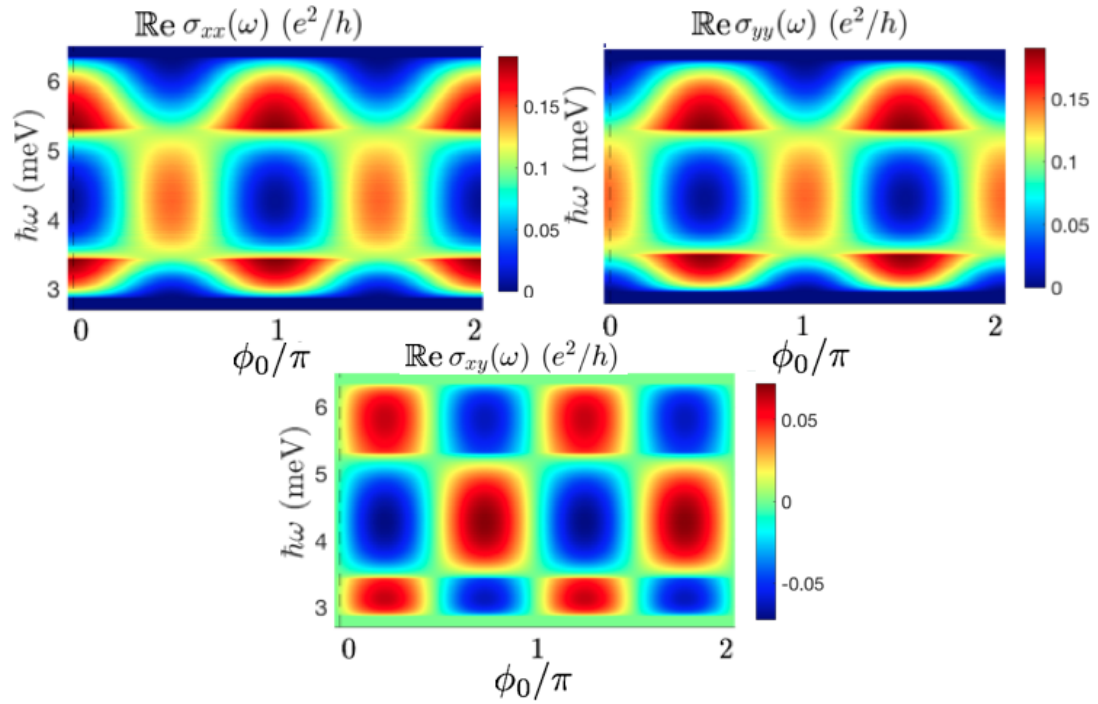


Figura 40: Componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y el ángulo de magnetización ϕ_0 para $H = 0.3H_0$. Adviértase un aspecto distintivo para cada uno de los espectros en los tres casos presentes, la cual permite la posibilidad de modular la conductividad como función de ϕ_0 cada múltiplo de π . Los parámetros empleados son los mismos que en la figura 34.

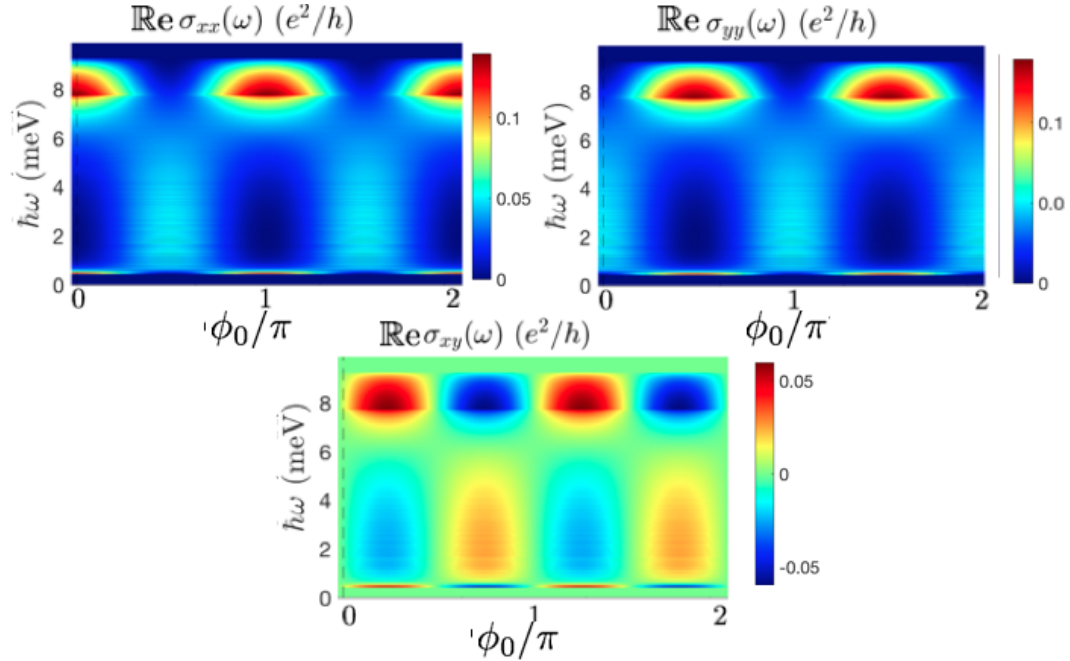


Figura 41: Mapa de intensidad de las componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y el ángulo de magnetización ϕ_0 . La energía de magnetización $H = 0.9H_0$ permite la existencia de un pico en la absorción para valores de energía cercanos al valor mínimo. Los parámetros empleados son los mismos de la figura 34.

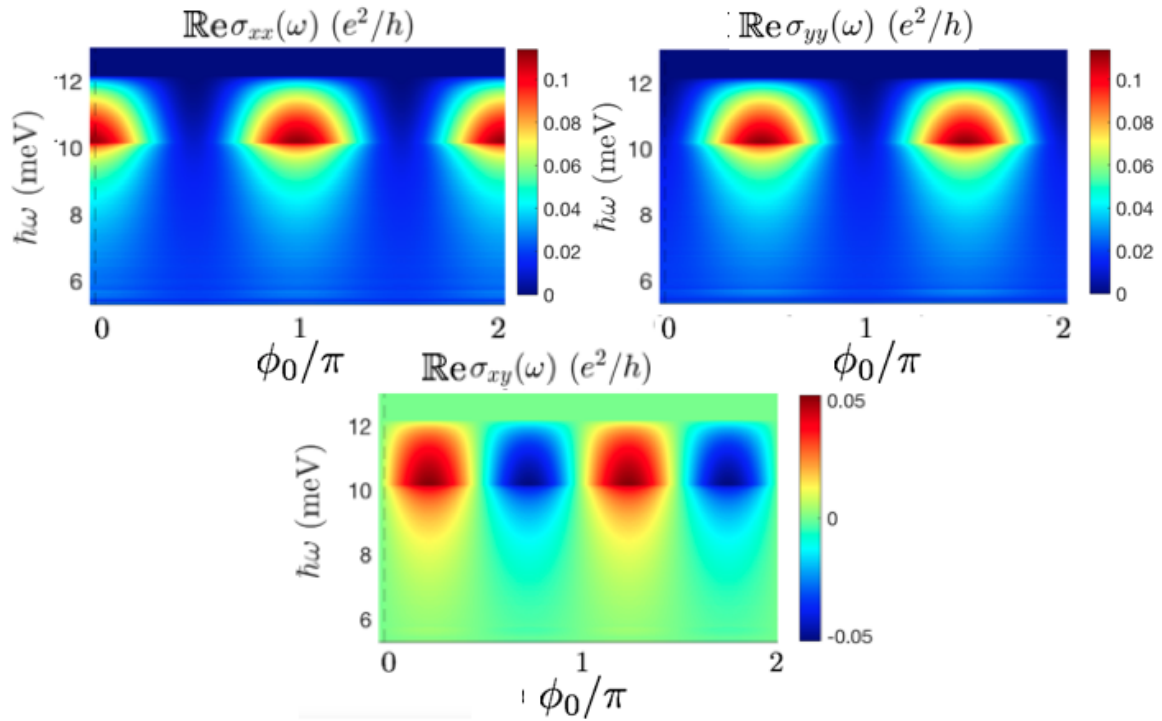


Figura 42: Mapa de intensidad de las componentes reales de la conductividad (154) como función de la frecuencia ω y ϕ_0 para un valor $H = 1.5H_0$. Adviértase como a medida que aumenta la magnitud de H , el desplazamiento en las frecuencias provoca que la región cóncava aumente y en consecuencia, el espectro solo presentará un pico en la absorción, es decir, valores máximos a frecuencias mayores. De esta forma, se puede advertir que el espectro de conductividad solo tomará una forma distinta a la mostrada en la figura 40 a medida que H/H_0 tome valores mayores a la unidad. Los parámetros empleados son los mismos de la figura 34.

energía genera un punto degenerado cuando la frecuencia tiende a cero, lo cual podría abrir la posibilidad de explorar algún tipo de fenómeno presente para la conductividad DC.

En general, los cálculos realizados evidencian como la anisotropía de las bandas de energía debidas a la dirección de magnetización ϕ_0 generan diferencias notables, tanto en la forma del espectro, como en la amplitud de las componentes diagonales y no diagonales del tensor de conductividad $\text{Re} \sigma_{ij}(\omega)$, lo cual se puede ver con más detalle en las figuras 40, 41 y 42. Algo importante a destacar respecto a las componentes diagonales del tensor de conductividad, es que debido al ángulo de magnetización, estas presentan la propiedad $\text{Re} \sigma_{xx}(\omega) \neq \text{Re} \sigma_{yy}(\omega)$, a excepción de cuando el ángulo de magnetización toma las direcciones $\phi_0 = \pi/4$ y $\phi_0 = 3\pi/4$, caso en el cual las tales componentes se igualan (figura 34, superior derecha). Esto refleja la dependencia de las componentes diagonales del tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ con la dirección de magnetización en el plano ϕ_0 .

Por último, pero no menos importante, con los resultados obtenidos se puede comprobar una diferencia importante con el caso $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ (capítulo 4), en el cual la orientación de magnetización está fija y el único

elemento de control es el cociente H_z/ε_F (figuras 19, 20, 17 y 18), ya que la existencia de TRS en el presente caso provocará una forma distinta del espectro dependiendo de la orientación relativa de $\mathbf{H}$ y $\mathbf{E}$. Por ejemplo, si el campo magnético tiene a alinearse paralelamente con el campo eléctrico, el espectro de la conductividad exhibe una forma distintiva respecto a alguna otra dirección de $\mathbf{H}$, ya que en este caso, para valores de $H < H_0$, los picos en el espectro de absorción a frecuencias ω_1 y ω_2 , es decir, las singularidades de van Hove alcanzan el valor máximo, tomando un mínimo en la región cóncava, mientras que cuando ambos campos son perpendiculares, las singularidades de van Hove desaparecen para dar forma a un espectro de tipo convexo.

Esto puede verse con mayor detalle en las figuras 40 y 41, donde se muestra la evolución de completa de $\text{Re } \sigma_{ij}(\omega)$ respecto a ω y ϕ_0 . Sin embargo, a medida que H/H_0 tiende a un valor más grande, la forma del espectro cambia de forma notable, ya que además de incrementar el ancho de banda de absorción, el pico mostrado a frecuencia ω_1 tiende a desvanecer, lo cual se puede ver en la figura 42.

5.4. Dicroísmo lineal

Con base a los resultados obtenidos en la sección anterior, se analizará el dicroísmo lineal presente. De acuerdo a (157), (158), (159) la parte real del tensor de conductividad es

$$\text{Re } \sigma_{ij}(\omega) = \begin{pmatrix} \text{Re } \sigma_{xx}(\omega) & \text{Re } \sigma_{xy}(\omega) \\ \text{Re } \sigma_{xy}(\omega) & \text{Re } \sigma_{yy}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (160)$$

con lo cual, la conductividad interbanda para luz linealmente polarizada descrita por (50) es

$$\text{Re } \sigma_{\parallel}^{inter}(\omega) = \text{Re } \sigma_{xx}^{inter}(\omega) \cos^2 \zeta + \text{Re } \sigma_{yy}^{inter}(\omega) \sin^2 \zeta, \quad (161)$$

expresión que describirá la dependencia de la absorción con el ángulo de polarización de $\mathbf{E}$. Esta dependencia se puede ver en las figuras 44 y 43, donde se hacen notables las variaciones en la absorción a medida que se toman distintas direcciones de polarización ζ .

Para concluir, hay que destacar que los resultados obtenidos para la conductividad indican una fuerte dependencia de las componentes disipativas $\text{Re } \sigma_{ij}(\omega)$ con el ángulo ϕ_0 , la cual abre la posibilidad de estudiar una propiedad óptica como lo es el dicroísmo lineal. Lo anterior es importante ya que como se pudo observar anteriormente, debido a que la conductividad presenta la propiedad $\text{Re } \sigma_{ij}(\phi_0) = \text{Re } \sigma_{ij}(\phi_0 + \pi)$, se brinda la posibilidad de manipular y modular la magnitud de la absorción cambiando la dirección del

campo magnético ϕ_0 ó la dirección del campo eléctrico ζ .

Esto abre la posibilidad de calcular los espectros de absorción para alguna dirección de polarización, los cuales evidencian la anisotropía en la absorción de la luz. Con el modelo presentado se abre la posibilidad de explorar situaciones en donde la energía de Fermi induzca otro tipo de transiciones ópticas además de las presentadas en este caso, como puede ser el caso en el cual solo corte una banda de energía, sumar la IEO tipo Dresselhaus ó introducir el ángulo de magnetización polar θ_0 como un elemento más de control.

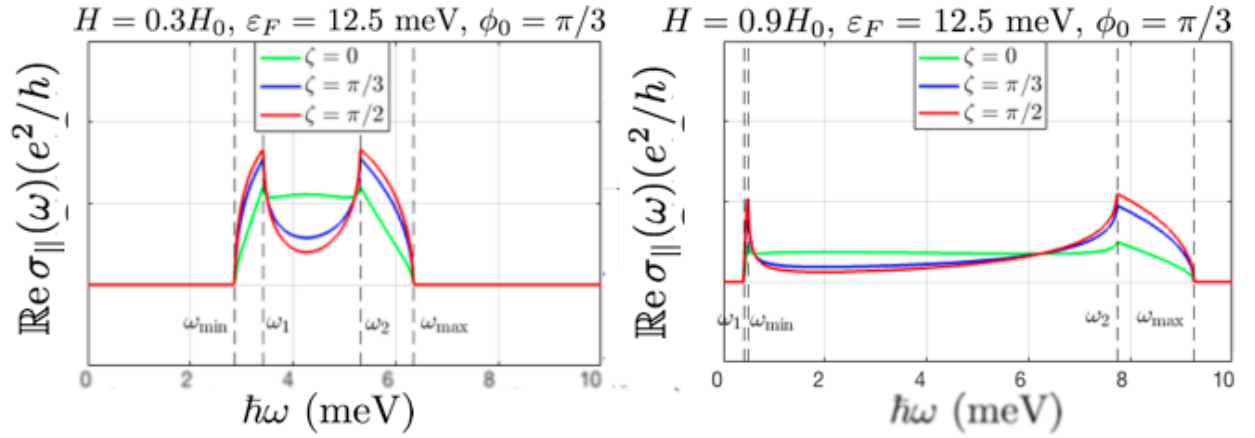


Figura 43: Parte real de la conductividad óptica para luz linealmente polarizada para distintos valores de magnetización, véase como cambia el espectro de absorción a medida que cambian los valores relativos de energía de magnetización H y energía de Fermi ε_F . Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 35.

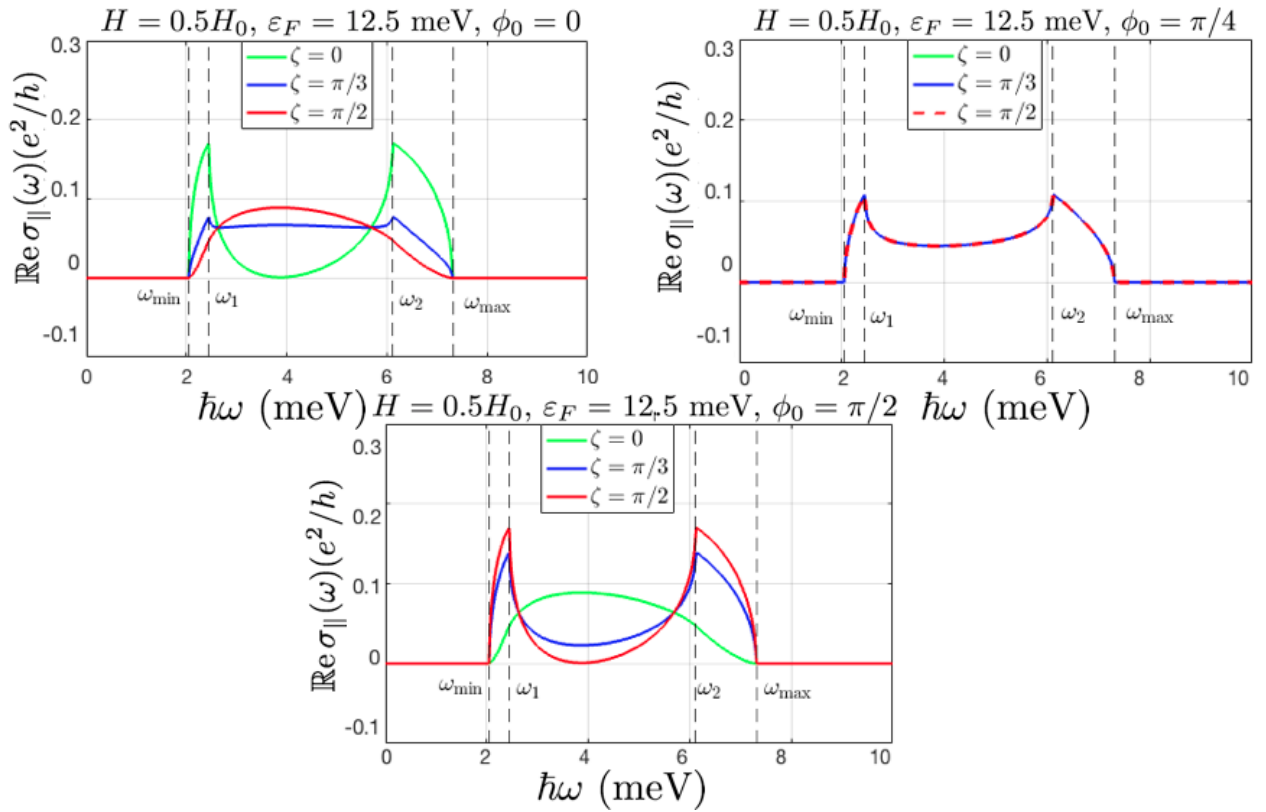


Figura 44: Parte real de la conductividad óptica para luz linealmente polarizada para distintas direcciones de magnetización ϕ_0 y polarización ζ . Nótese como existe una modulación en la absorción para distintas direcciones del campo $\mathbf{E}$, lo cual brinda la posibilidad de manipular la absorción en función de las direcciones relativas de ϕ_0 y ζ . Los parámetros son los mismos que los empleados en la figura 34.

Capítulo 6. Conclusiones

En esta tesis se estudia la respuesta óptica de un gas electrónico 2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba. Típicamente, este sistema se forma en la interfase entre dos materiales en heteroestructuras semiconductoras y como tal, ha sido uno de los modelos más útiles para estudiar la manipulación del espín electrónico en medios no magnéticos. En nuestro caso, se hace la suposición en la cual el gas está próximo a un sustrato ferromagnético, de tal modo que su magnetización se acopla al espín de los electrones. Este "modelo ferromagnético de Rashba" ha sido estudiado previamente para investigar corrientes de carga y espín a frecuencia cero (por ejemplo, el *efecto Hall anómalo*), o la densidad de espín inducidas por un campo eléctrico externo dc.

Revisitamos este sistema poniendo énfasis en el espectro de transiciones interbanda, a través del estudio de la densidad conjunta de estados y sus singularidades de van Hove. El objetivo final ha sido calcular el tensor de conductividad óptica, entender sus características espectrales, y obtener información del espectro de absorción y otras propiedades ópticas relacionadas, en función de los parámetros materiales de sistema y de la dirección del vector de magnetización $\mathbf{H}$. Para ello, hemos empleado la Teoría de Respuesta Lineal de Kubo. Esto requiere primero el cálculo de las propiedades de estado base y con este propósito se obtienen las eigenfunciones y las bandas de energía, así como otras cantidades relacionadas de importancia como por ejemplo los contornos de Fermi (i.e. la "superficie" de Fermi de un sistema 2D) o la orientación del espín en cada banda.

A este respecto, la dirección de $\mathbf{H}$ resulta fundamental pues permite modificar la forma de las superficies de energía (desdobladas según el estado de espín) así como su "topología". Por ejemplo, cuando la magnetización apunta perpendicularmente al plano del gas ($\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$), la estructura de bandas presenta una brecha energética prohibida, mientras que para una magnetización horizontal ($\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$) siempre existe un punto de contacto entre las bandas. En el primer caso, el cociente $H/|\varepsilon_F|$ resulta ser el parámetro de control relevante de la conductividad óptica. En el segundo caso la dirección de $\mathbf{H}$ en el plano del gas, respecto a la dirección del campo eléctrico, introduce el elemento distintivo que determina el espectro de absorción. Aunque las propiedades de estado base se presentan para una dirección arbitraria de magnetización $\mathbf{H}$ (capítulo 3), el tensor de conductividad óptica $\sigma_{ij}(\omega)$ se calcula para esos dos casos "topológicamente" distintos, $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$ y $\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$.

Es importante decir que primero se realizó el ejercicio de aprendizaje consistente en aplicar la fórmula de

Kubo al caso de un modelo genérico de dos bandas del tipo $H(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \mathbf{d}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}$. Esto tiene la ventaja de que las expresiones derivadas para las contribuciones intra e interbanda al tensor de conductividad óptica son aplicables a cualquier sistema descrito por tal modelo, que es el caso de importantes sistemas de investigación en la actualidad tales como el grafeno, aislantes topológicos y diversos materiales de Dirac. En este sentido, tal ejercicio es también una introducción a la respuesta óptica de esta clase de sistemas al dar una interpretación al campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ y al grado de libertad espinorial representado por las matrices de Pauli (espín de sitio, espín de valle, espín electrónico).

A continuación se sintetizan los resultados más importantes:

- La presencia de la contribución $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{H}$ en el hamiltoniano del gas electrónico 2D con interacción de Rashba permite interpolar entre dos situaciones 'topológicamente' distintas, caracterizadas por la presencia o ausencia de una brecha energética prohibida. La magnitud y dirección del vector $\mathbf{H}$ representa así un elemento de control de las propiedades ópticas del medio, de naturaleza diferente a la manipulación representada por la frecuencia del campo eléctrico externo o el parámetro material de Rashba.
- Cuando $\mathbf{H} \parallel \hat{\mathbf{z}}$, la forma de las bandas de energía y su desdoblamiento es diferente si la energía espín-órbita característica ε_F es mayor o menor que la magnitud H de la magnetización. A este respecto se pueden tener dos o tres posibilidades para la posición del nivel de Fermi, lo que significa que el espacio de momento $\mathbf{k}$ disponible para transiciones verticales se modifica sustancialmente en cada caso. Como consecuencia, las componentes disipativas del tensor de conductividad pueden variar significativamente en cuanto a su ancho, posición de frecuencias críticas o simetría. La existencia de una brecha prohibida se manifiesta en el fenómeno de dicroísmo circular, toda vez que el rompimiento de la simetría de inversión temporal da lugar a una componente Hall no nula tal que $\sigma_{yx}(\omega) = -\sigma_{xy}(\omega)$. Este tipo de comportamiento constituye la huella óptica del sistema.
- La situación $\mathbf{H} \perp \hat{\mathbf{z}}$, involucra otro tipo de características en la respuesta óptica al no haber una brecha prohibida absoluta, ya que por el contrario, la magnitud y la dirección en el plano del vector $\mathbf{H}$ causa una deformación asimétrica del desdoblamiento de las bandas de energía, manteniendo la existencia de un punto de contacto entre ellas en determinada dirección. De modo que, la posición de este punto (y el valor de la energía en él) se vuelve importante para determinar el espacio de estados disponibles a un valor del nivel de Fermi dado. Como resultado, se obtiene una anisotropía óptica descrita por $\text{Re} \sigma_{xx}(\omega) \neq \text{Re} \sigma_{yy}(\omega)$ lo que causa que la absorción óptica sea diferente según la orientación del campo eléctrico externo. Así, esta propiedad refleja la reducción

de simetría introducida por la orientación de la magnetización. Debemos decir que, en este caso, tenemos una discrepancia importante respecto a lo reportado por Wang (Wang y Pang, 2009), pues tal anisotropía está ausente en el trabajo de estos autores, sin que hasta el momento hayamos identificado plenamente la causa. A diferencia de ellos, aquí reportamos, analíticamente las raíces de la ecuación de grado cuatro que define al contorno de Fermi en función de los parámetros del material, discusión que no se presenta en el estudio de Wang y Pang. También presentamos los detalles del cálculo de la densidad conjunta de estados.

Por último debemos decir que, aunque no hemos agotado todos los casos posibles permitidos por tantos parámetros en el modelo (ε_R , ε_F , la magnitud y dirección de $\mathbf{H}$), los desarrollos presentados en esta tesis no son *ad hoc* y contienen todo lo necesario para continuar la investigación de este sistema, como podría ser el caso en el cual haya una magnetización con dirección arbitraria, los espectros de Kerr y Faraday, la propagación de modos electromagnéticos de superficie o la presencia adicional de la interacción espín-órbita de Dresselhaus.

Literatura citada

- Armitage, N. P., Mele, E. J., y Vishwanath, A. (2018). Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids. *Review of Modern Physics*, **90**: 015001.
- Ast, C. R., Henk, J., Ernst, A., Moreschini, L., Falub, M. C., Pacilé, D., Bruno, P., Kern, K., y Grioni, M. (2007). Giant Spin Splitting through Surface Alloying. *Physical Review Letters*, **98**: 186807.
- Baibich, M. N., Broto, J. M., Fert, A., Van Dau, F. N., Petroff, F., Etienne, P., Creuzet, G., Friederich, A., y Chazelas, J. (1988). Giant Magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr Magnetic Superlattices. *Physical Review Letters*, **61**: 2472–2475.
- Band, Y. y Avishai, I. (2012). *Quantum Mechanics with Applications to Nanotechnology and Information Science*. Número 1. Academic Press, Elsevier. Kidlington, Oxford, pp. 381–544.
- Bauer, G., Saitoh, E., y Wees, B. (2012). Spin Caloritronics. *Nature materials*, **11**: 391–9.
- Bercioux, D. y Lucignano, P. (2015). Quantum transport in Rashba spin–orbit materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, **78**(10): 106001.
- Bernardi, M., Ataca, C., Palummo, M., y Grossman, J. C. (2017). Optical and Electronic Properties of Two-Dimensional Layered Materials. *Nanophotonics*, **6**(2): 479–493.
- 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 of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, **392**(1802): 45–57.
- Bihlmayer, G., Koroteev, Y., Echenique, P., y Chulkov, E. (2006). The Rashba-effect at metallic surfaces. *Surface Science*, **600**.
- Binasch, G., Grünberg, P., Saurenbach, F., y Zinn, W. (1989). Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. *Physical Review B*, **39**: 4828–4830.
- Castelvecci, D. (2017). IBM's quantum cloud computer goes commercial. *Nature*, **543**: 159–159.
- Castro Neto, A. H., Guinea, F., Peres, N. M. R., Novoselov, K. S., y Geim, A. K. (2009). The electronic properties of graphene. *Review of Modern Physics*, **81**: 109–162.
- Caviglia, A. D., Gabay, M., Gariglio, S., Reyren, N., Cancellieri, C., y Triscone, J.-M. (2010). Tunable Rashba Spin-Orbit Interaction at Oxide Interfaces. *Physical Review Letters*, **104**: 126803.
- Chang, M.-C. (2005). Effect of in-plane magnetic field on the spin Hall effect in a Rashba-Dresselhaus system. *Physical Review B*, **71**: 085315.
- Chappert, C., Fert, A., y Dau, F. (2007). The emergence of spin electronics in data storage. *Nature materials*, **6**: 813–23.
- Cheng, R., Zhu, J., y Xiao, D. (2016). Dynamic Feedback in Ferromagnet-Spin Hall Metal Heterostructures. *Physical Review Letters*, **117** 9: 097202.
- Crassee, I., Levallois, J., Walter, A. L., Ostler, M., Bostwick, A., Rotenberg, E., Seyller, T., van der Marel, D., y Kuzmenko, A. B. (2011). Giant Faraday rotation in single- and multilayer graphene. *Nature Physics*, **7**(1): 48–51.

- Debald, S. y Kramer, B. (2005). Rashba effect and magnetic field in semiconductor quantum wires. *Physical Review B*, **71**.
- Dugaev, V. K., Bruno, P., Taillefumier, M., Canals, B., y Lacroix, C. (2005). Anomalous Hall effect in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction. *Physical Review B*, **71**: 224423.
- Dwivedi, Y. y Zilio, S. (2014). Advances in Rare Earth Spectroscopy and Applications. *Journal of nanoscience and nanotechnology*, **14**: 1578–96.
- Dyrdal, A., Barnaś, J., y Dugaev, V. K. (2017). Current-induced spin polarization of a magnetized two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit interaction. *Physical Review B*, **95**: 245302.
- Eremeev, S. V., Nechaev, I. A., Koroteev, Y. M., Echenique, P. M., y Chulkov, E. V. (2012). Ideal Two-Dimensional Electron Systems with a Giant Rashba-Type Spin Splitting in Real Materials: Surfaces of Bismuth Tellurohalides. *Physical Review Letters*, **108**: 246802.
- Fabian, J., Matos-Abiague, A., Ertler, C., Stano, P., y Zutic, I. (2007). Semiconductor Spintronics. *Acta Physica Slovaca*, **57**.
- Florio, G. (2021). *Applications of Magnetic Materials*. Elsevier.
- Fu, L. y Kane, C. L. (2007). Topological insulators with inversion symmetry. *Physical Review B*, **76**: 045302.
- Galitski, V. y Spielman, I. (2013). Spin-orbit coupling in quantum gases. *Nature*, **494**: 49–54.
- Hasan, M. Z. y Kane, C. L. (2010). Colloquium: Topological insulators. *Reviews of Modern Physics*, **82**(4): 3045–3067.
- Haverkort, M. W., Hollmann, N., Krug, I. P., y Tanaka, A. (2010). Symmetry analysis of magneto-optical effects: The case of x-ray diffraction and x-ray absorption at the transition metal $L_{2,3}$ edge. *Physical Review B*, **82**: 094403.
- Hoesch, M., Muntwiler, M., Petrov, V. N., Hengsberger, M., Patthey, L., Shi, M., Falub, M., Greber, T., y Osterwalder, J. (2004). Spin structure of the Shockley surface state on Au(111). *Physical Review B*, **69**: 241401.
- Hsieh, D., Qian, D., Wray, L., Xia, Y., Hor, Y. S., Cava, R. J., y Hasan, M. Z. (2008). A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase. *Nature*, **452**(7190): 970–974.
- Ishizaka, K., Bahramy, M. S., Murakawa, H., Sakano, M., Shimojima, T., Sonobe, T., Koizumi, K., Shin, S., Miyahara, H., Kimura, A., Miyamoto, K., Okuda, T., Namatame, H., Taniguchi, M., Arita, R., Nagaosa, N., Kobayashi, K., Murakami, Y., Kumai, R., Kaneko, Y., Onose, Y., y Tokura, Y. (2011). Giant Rashba-type spin splitting in bulk BiTeI. *Nature Materials*, **10**(7): 521–526.
- Kane, C. L. y Mele, E. J. (2005). Z_2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect. *Physical Review Letters*, **95**: 146802.
- Kargarian, M., Randeria, M., y Trivedi, N. (2015). Theory of Kerr and Faraday rotations and linear dichroism in Topological Weyl Semimetals. *Scientific Reports*, **5**(1): 12683.
- Karplus, R. y Luttinger, J. M. (1954). Hall Effect in Ferromagnetics. *Physical Review*, **95**: 1154–1160.
- 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.

- LaShell, S., McDougall, B. A., y Jensen, E. (1996). Spin Splitting of an Au(111) Surface State Band Observed with Angle Resolved Photoelectron Spectroscopy. *Physical Review Letters*, **77**: 3419–3422.
- Liu, R.-B., Yao, W., y Sham, L. J. (2010). Quantum computing by optical control of electron spins. *Advances in Physics*, **59**: 703 – 802.
- Markelz, A. G., Asmar, N. G., Brar, B., y Gwinn, E. G. (1996). Interband impact ionization by terahertz illumination of InAs heterostructures. *Applied Physics Letters*, **69**(26): 3975–3977.
- Markelz, A. G., Asmar, N. G., Gwinn, E. G., y Brar, B. (1998). Relaxation times in InAs/AlSb quantum wells. *Applied Physics Letters*, **72**(19): 2439–2441.
- Markus Koenig, Stefen Wiedmann, C. B. (2007). Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, **318**(5851).
- 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.
- Morell, E. S., Chico, L., y Brey, L. (2017). Twisting dirac fermions: circular dichroism in bilayer graphene. *2D Materials*, **4**(3): 035015.
- Nagaosa, N., Sinova, J., Onoda, S., MacDonald, A. H., y Ong, N. P. (2010). Anomalous Hall effect. *Review of Modern Physics*, **82**: 1539–1592.
- Nemilentsau, A., Low, T., y Hanson, G. (2016). Anisotropic 2D Materials for Tunable Hyperbolic Plasmonics. *Physical Review Letters*, **116**(6): 66804.
- Novko, D., Šunjić, M., y Despoja, V. (2016). Optical absorption and conductivity in quasi-two-dimensional crystals from first principles: Application to graphene. *Physical Review B*, **93**: 125413.
- Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S. V., Grigorieva, I. V., y Firsov, A. A. (2004). Electric Field Effect in Atomically Thin Carbon Films. *Science*, **306**(5696): 666–669.
- Pershin, Y. V., Nesteroff, J. A., y Privman, V. (2004). Effect of spin-orbit interaction and in-plane magnetic field on the conductance of a quasi-one-dimensional system. *Physical Review B*, **69**: 121306.
- Podzorov, V., Gershenson, M. E., Kloc, C., Zeis, R., y Bucher, E. (2004). High-mobility field-effect transistors based on transition metal dichalcogenides. *Applied Physics Letters*, **84**(17): 3301–3303.
- Qiu, D. Y., da Jornada, F. H., y Louie, S. G. (2013). Optical Spectrum of MoS₂: Many-Body Effects and Diversity of Exciton States. *Physical Review Letters*, **111**: 216805.
- Saberi-Pouya, S., Vazifehshenas, T., Salavati-fard, T., Farmanbar, M., y Peeters, F. M. (2017). Strong anisotropic optical conductivity in two-dimensional puckered structures: The role of the Rashba effect. *Physical Review B*, **96**: 075411.
- Sablikov, V. A. y Tkach, Y. Y. (2019). Van Hove scenario of anisotropic transport in a two-dimensional spin-orbit coupled electron gas in an in-plane magnetic field. *Physical Review B*, **99**: 035436.
- Sengupta, P. y Bellotti, E. (2016a). Photo-modulation of the spin Hall conductivity of mono-layer transition metal dichalcogenides. *Applied Physics Letters*, **108**(21): 211104.
- Sengupta, P. y Bellotti, E. (2016b). Tunable chirality and circular dichroism of a topological insulator with C_{2v} symmetry as a function of Rashba and Dresselhaus parameters. *Applied Physics Letters*, **108**(3): 031101.

- Sheehy, D. E. y Schmalian, J. (2009). Optical transparency of graphene as determined by the fine-structure constant. *Physical Review B*, **80**: 193411.
- Shen, S.-Q. (2012). *Topological Insulators*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Shen, S.-Q., Shan, W.-Y., y Lu, H.-Z. (2011). Topological insulator and the Dirac equation. *SPIN*, **01**(01): 33–44.
- Shi, J., Zhang, P., Xiao, D., y Niu, Q. (2006). Proper Definition of Spin Current in Spin-Orbit Coupled Systems. *Physical Review Letters*, **96**: 076604.
- Sonowal, K., Singh, A., y Agarwal, A. (2019). Giant optical activity and Kerr effect in type-I and type-II Weyl semimetals. *Physical Review B*, **100**: 085436.
- Streda, P. (1982). Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, **15**(22): L717–L721.
- Tkachov, G. (2015). *Topological Insulators: The Physics of Spin Helicity in Quantum Transport*.
- Vafek, Oskar y Vishwanath, A. (2014). Dirac Fermions in Solids: From High-Tc Cuprates and Graphene to Topological Insulators and Weyl Semimetals. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, **5**(1): 83–112.
- Wang, C. M. y Pang, M. Q. (2010). Optical out-of-plane spin polarization and charge conductivities in spin-orbit-coupled systems in the presence of an in-plane magnetic field. *The European Physical Journal B*, **74**(1): 19–25.
- Wang, Q. H., Kalantar-Zadeh, K., Kis, A., Coleman, J. N., y Strano, M. S. (2012). Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides. *Nature Nanotechnology*, **7**(11): 699–712.
- Winkler, R. (2003). *Spin—Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- Xia, Y., Qian, D., Hsieh, D., Wray, L., Pal, A., Lin, H., Bansil, A., Grauer, D., Hor, Y. S., Cava, R. J., y Hasan, M. Z. (2009). Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, **5**(6): 398–402.
- Xiang, D., Liu, T., Xu, J., Tan, J. Y., Hu, Z., Lei, B., Zheng, Y., Wu, J., Neto, A. H. C., Liu, L., y Chen, W. (2018). Two-dimensional multibit optoelectronic memory with broadband spectrum distinction. *Nature Communications*, **9**(1): 2966.
- Xu, M., Liang, T., Shi, M., y Chen, H. (2013). Graphene-Like Two-Dimensional Materials. *Chemical Reviews*, **113**(5): 3766–3798.
- Yau, J.-B., De Poortere, E. P., y Shayegan, M. (2002). Aharonov-Bohm Oscillations with Spin: Evidence for Berry's Phase. *Physical Review Letters*, **88**: 146801.
- Zhou, Z., Cui, Y., Tan, P.-H., Liu, X., y Wei, Z. (2019). Optical and electrical properties of two-dimensional anisotropic materials. *Journal of Semiconductors*, **40**(6): 061001.
- Žutić, I., Fabian, J., y Das Sarma, S. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of Modern Physics*, **76**: 323–410.

Anexos

1.1. Solución a la ecuación $x^4 + ax^2 + bx + c = 0$ para los valores $k_F^\lambda(\theta; \phi_0)$

En este apartado, se ofrece la solución a la ecuación $x^4 + ax^2 + bx + c = 0$ para encontrar los valores k_F . Desarrollando (55) con la condición $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$ como

$$x^4 + y^4 + 2x^2y^2 - 4(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_R)(x^2 + y^2) + 8[H_yx - H_xy]/\varepsilon_R = 4[H^2 - \varepsilon_F^2]/\varepsilon_R^2, \quad (162)$$

donde se han hecho los cambios de variable $x = k_x/k_\alpha$, $y = k_y/k_\alpha$, $H = \sqrt{H_\parallel^2 + H_z^2}$, $k_\alpha = m\alpha/\hbar^2$ y $\varepsilon_R = \alpha k_\alpha$ se puede notar que esta ecuación representa una curva parabólica que se intersecta por una recta constante a un nivel de Fermi dado. Para encontrar los valores k solución que definen la intersección de la curva con la energía de Fermi, se reacomoda (55) y enseguida se eleva al cuadrado para obtener una ecuación cuártica de la forma:

$$x^4 + ax^2 + bx + c = 0, \quad (163)$$

donde se ha realizado el cambio de variable $x = \alpha k$ con $a = -4\varepsilon_R^2(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$. Usualmente, para resolver ecuaciones de este tipo, se emplea un procedimiento que emplearemos a continuación, el cual se conoce como método de Ferrari, este método nos dará las soluciones válidas a (163), las cuales se distinguen entre sí dependiendo del signo (y valor) del nivel de Fermi, por ejemplo, si $\varepsilon_F/\varepsilon_R < -1$ ($\varepsilon_F/\varepsilon_R \geq 0$), entonces $a > 0$ ($a < 0$), lo cual entrega un tipo de solución distinta dependiendo si $\varepsilon_F > H$ ($c > 0$) o $\varepsilon_F < H$ ($c < 0$).

Expresando ec.(163) como

$$\left(x^2 + \frac{a}{2}\right)^2 + bx + \left(c - \frac{a^2}{4}\right)^2 = 0, \quad (164)$$

e introduciendo una cantidad D , la cual representa un número arbitrario que es solución al polinomio de segundo grado en los corchetes, es posible reescribir la ecuación anterior como

$$\left(x^2 + \frac{a}{2} + D\right)^2 - \left[2D\left(x^2 + \frac{a}{2}\right) + D^2 - bx + \frac{a^2}{4} - c\right] = 0, \quad (165)$$

así (165) se expresa como una diferencia de cuadrados

$$\left(x^2 + \frac{a}{2} + D^*\right)^2 - \left(\sqrt{2D^*}\left(x - \frac{b}{4D^*}\right)\right)^2 = 0. \quad (166)$$

donde se ha redefinido D^* como solución al discriminante ⁴ del lado derecho de ec(165). De esta forma se llega a la ecuación de tercer grado

$$D^{*3} + aD^{*2} + \tilde{b}D^* + \tilde{c} = 0, \quad (167)$$

la cual después de hacer la sustitución $D^* = y - \frac{a}{3}$ tiene la forma reducida

$$y^3 + py + q = 0, \quad (168)$$

siendo $p = -\frac{a^2}{12} - c$ y $q = -\frac{a^3}{108} - \frac{b^2}{8} + \frac{ac}{3}$.

Las soluciones serán $y = A + B$, las cuales se obtienen a la ecuación de segundo grado resolvente después de utilizar las relaciones de Cardano-Vieta ⁵, las cuales cumplen las relaciones $A^3 + B^3 = -q$, $AB = -\frac{p}{3}$, donde $A = \sqrt[3]{\frac{-q + \sqrt{\Delta}}{2}}$ y $B = \sqrt[3]{\frac{-q - \sqrt{\Delta}}{2}}$, donde

$$\Delta = q^2 + \frac{4p^3}{27}, \quad (169)$$

se define como el discriminante de la ecuación (168) y define las soluciones obtenidas del discriminante del lado derecho de ec. (165)

$$\begin{aligned} D^* &= y - \frac{a}{3} \\ &= A + B - \frac{a}{3}, \end{aligned} \quad (170)$$

las cuales son los valores D^* solución a ec.(166),

$$\left(x^2 + \sqrt{2D^*}x + \frac{a}{2} + D^* - \frac{b\sqrt{2D^*}}{4D^*}\right) \left(x^2 - \sqrt{2D^*}x + \frac{a}{2} + D^* + \frac{b\sqrt{2D^*}}{4D^*}\right) = 0, \quad (171)$$

⁴ $b^2 - 8D \left(D^2 + aD + \frac{a^2}{4} - c\right) = 0$

⁵Las relaciones de Cardano-Vieta permiten expresar coeficientes de un polinomio $P(z) = a_0 + a_1z + a_2z^2 + \dots + a_kz^k$ con coeficientes reales o complejos, en función de sus raíces a través de las operaciones elementales de la aritmética:

$$\begin{aligned} a_{n-1} &= -a_n(r_1 + r_2 + \dots + r_n) \\ a_{n-2} &= a_n(r_1r_2 + r_1r_3 + \dots + r_{n-1}r_n) \\ &\dots \\ a_1 &= (-1)^{n-1}a_n(r_1r_2\dots r_{n-2}r_{n-1} + \dots + r_2\dots r_{n-1}r_n) \\ a_0 &= (-1)^na_nr_1r_2\dots r_{n-1}r_n \end{aligned}$$

de este modo, las soluciones para ec.(166) se expresan como (al hacer el cambio de variable, $k = x/\alpha$):

$$\begin{aligned} k_{F,1}^\lambda &= -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \\ k_{F,2}^\lambda &= -\frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \\ k_{F,3}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \\ k_{F,4}^\lambda &= \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right). \end{aligned} \quad (172)$$

Los términos $k_{F,1}^\lambda$, $k_{F,2}^\lambda$, $k_{F,3}^\lambda$ y $k_{F,4}^\lambda$ representan las 4 soluciones para la banda ε_λ y como ya se mencionó anteriormente, su validez e interpretación física dependerá de los valores que tengan los parámetros involucrados en la forma de las bandas ε_λ . Más concretamente, la validez de los valores $k_{F,i}^\lambda$ solución está determinado por el signo resultante de evaluar $\Delta \equiv q^2 + \frac{4p^3}{27}$, para los cuales se resume a continuación los posibles casos:

■ $\Delta > 0$

Cuando el valor del discriminante es mayor a 0, solo existe una solución real a ec.(170), la cual es de la forma $y = A + B$, siendo $A = \sqrt[3]{\frac{-q + \sqrt{\Delta}}{2}}$ y $B = \sqrt[3]{\frac{-q - \sqrt{\Delta}}{2}}$. Con esto, el valor D^* solución para $k_{F,i}^\lambda$ es:

$$D^* = y - \frac{a}{3} = A + B - \frac{a}{3} = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{\frac{q^2}{4} + \frac{p^3}{27}}} - \frac{a}{3}. \quad (173)$$

■ $\Delta = 0$

Cuando el valor del discriminante es igual a 0, existen dos soluciones reales distintas a ec. (170), una de las cuales presenta multiplicidad 2. Para la primera solución, tenemos :

$$y_1 = \frac{3q}{p}, \quad (174)$$

para las otras dos soluciones

$$y_2 = y_3 = -\frac{3q}{2p}, \quad (175)$$

con lo cual los valores D^* que satisfacen son

$$D_1^* = \frac{3q}{p} - \frac{a}{3}, \quad (176)$$

$$D_2^* = D_3^* = -\frac{3q}{2p} - \frac{a}{3}, \quad (177)$$

siendo (176) la solución válida para $k_{F,i}^\lambda$.

■ $\Delta < 0$

Cuando el valor del discriminante es menor a 0, existen 3 soluciones reales a ec.(170), las cuales se obtienen a partir de la fórmula de De Moivre y tienen la forma general:

$$y_i = A + B = \sqrt{\frac{-p}{2}} \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) + \sqrt{\frac{-p}{2}} \cos\left(\frac{\gamma}{2}\right) = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma + 2j\pi}{3}\right), \quad (j = 0, 1, 2). \quad (178)$$

Con esto, es posible definir las soluciones como la terna

$$D_1^* = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma}{3}\right) - \frac{a}{3}, \quad (179)$$

$$D_2^* = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma + 2\pi}{3}\right) - \frac{a}{3}, \quad (180)$$

$$D_3^* = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{\gamma + 4\pi}{3}\right) - \frac{a}{3}, \quad (181)$$

siendo ec.(179) la solución válida para $k_{F,i}^\lambda$, donde el ángulo $\gamma = \cos^{-1}\left(\frac{3q}{2p}\sqrt{\frac{-3}{p}}\right)$.

Dependiendo de la naturaleza de las bandas, se dará algún tipo u otro de transición electrónica, las cuales en nuestro caso estarán restringidas al número de ocupación entre las bandas, la magnitud del acoplamiento Rashba y la energía a la cual se ubique el nivel de Fermi, siendo las tres posibilidades que se exponen a continuación.

1.1.1. Caso $\varepsilon_F > H$

Para el caso en el cual la energía de Fermi se ubica arriba del gap H de energía, las bandas $\varepsilon_+(\mathbf{k})$, $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ se intersectan al nivel de la energía de Fermi, por lo tanto los valores k solución son:

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (182)$$

$$k_F^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (183)$$

donde k_F^- , k_F^+ representan los vectores de Fermi para la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $a = -4\varepsilon_R^2(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$.

1.1.2. Caso $|\varepsilon_F| < H$

Cuando la energía de Fermi se encuentra ubicada entre el gap H de energía, se intersecta únicamente la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, así la única solución es,

$$k_F^- = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (184)$$

donde $x = \alpha k$ con $a = -4\varepsilon_R^2(1 + |\varepsilon_F|/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$.

1.1.3. Caso $\varepsilon_-(k_{\min}) < \varepsilon_F < -|H|$

Aquí, la energía de Fermi intersecta la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ 4 veces, para lo cual después de tomar la consideración con la cual aseguremos que el valor de k esta definido a tomar un valor positivo ($k_{F,i}^- > 0$), se tienen las soluciones,

$$k_{F,1}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} - \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (185)$$

$$k_{F,2}^- = \frac{1}{\sqrt{2}\alpha} \left(\sqrt{D^*} + \sqrt{-D^* - a - \frac{b}{\sqrt{2D^*}}} \right), \quad (186)$$

donde $x = \alpha k$ con $a = -4\varepsilon_R^2(1 - |\varepsilon_F|/\varepsilon_R)$, $b = -8\varepsilon_R^2 H \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)$ y $c = 4\varepsilon_R^2(\varepsilon_F^2 - H^2)$ y las soluciones $k_{F,1}^-$, $k_{F,2}^-$ corresponden a los valores k de la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ de la intersección con el nivel de Fermi ($k_{F,1}^- < k_{F,2}^-$).

1.2. Frecuencias críticas para el caso $\varepsilon_F > H$

1.2.1. Frecuencia máxima y frecuencia mínima de transición

Para conocer las frecuencias en las cuales ocurren las transiciones ópticas, partimos de los casos límite en el cual la relación $\hbar\omega_\lambda(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2d(k_F^\lambda(\theta; \theta_0, \phi_0))$ toma un valor mínimo y máximo para k 's correspondientes a ambas bandas de energía al nivel de Fermi. Definimos la relación $\hbar\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0) = \min[\hbar\omega_+(\theta; \theta_0, \phi_0)]$, y

$$\begin{aligned}\hbar\omega_+(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \varepsilon_+(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) - \varepsilon_-(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) \\ &= 2d(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0),\end{aligned}\tag{187}$$

donde $\theta = \phi_0 + 3\pi/2$ y $\theta_0 = \pi/2$ es el valor de los ángulos que satisfacen esta condición, mientras que las eigen-energías para un electrón con vector de onda $k_F^+(\theta; \theta_0, \phi_0)$ es ⁶

$$\varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) = \frac{\hbar^2 k_F^{+2}(\theta; \theta_0, \phi_0)}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{+2}(\theta; \theta_0, \phi_0) - 2\alpha H k_F^+(\theta; \theta_0, \phi_0)}.\tag{188}$$

Inmediatamente se puede notar el valor mínimo del término dentro de la raíz cuadrada tiene dos posibilidades:

$$\begin{aligned}\blacksquare d(k_F^+(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2})) &= |\alpha k_F^+ - H| & \left(H_0 \equiv \alpha \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} = \alpha k_F > H \right), \\ \blacksquare d(k_F^+(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2})) &= |H - \alpha k_F^+| & \left(H_0 \equiv \alpha \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} = \alpha k_F < H \right).\end{aligned}$$

Para el primer caso, partimos de la relación

$$\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), \theta, \theta_0, \phi_0)\tag{189}$$

al encontrarnos en la banda ε_+ , tenemos

$$\begin{aligned}\varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + \alpha k_F^+ - H \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H) &= \left(k_F^+ + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2\end{aligned}\tag{190}$$

ecuación que entrega las soluciones

$$k_{F\pm}^+ = -\frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H)},\tag{191}$$

⁶ $\varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta)) = \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{+2} + 2\alpha H k_F^+ \sin \theta_0 \sin(\theta - \phi_0)}$

introduciendo la solución positiva en (187), tenemos para $\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\begin{aligned}\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (\alpha k_F^+ - H) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[\alpha \left(-\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H)} \right) - H \right] \\ &= 2 \left[-\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\alpha^2 + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right].\end{aligned}\quad (192)$$

Para encontrar $\omega_+(\theta; \theta_0, \phi_0)$ para el caso en el cual $H > H_0$, partimos de la relación

$$\begin{aligned}\varepsilon_\lambda(k_F^+) &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{+2} - 2\alpha H k_F^+} \\ &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + \lambda(H - \alpha k_F^+),\end{aligned}\quad (193)$$

que cumple la relación $d(k_F^+(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2})) = |H - \alpha k_F^+|$ dado $H_0 < H$.

Nuevamente, usando la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), \theta, \theta_0, \phi_0)$ para la banda ε_- , tenemos

$$\begin{aligned}\varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} - H + \alpha k_F^+ \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H) &= \left(k_F^+ + \frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2,\end{aligned}\quad (194)$$

ecuación que entrega las soluciones

$$k_{F\pm}^+ = -\frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H)}.\quad (195)$$

Introduciendo la solución positiva en (192), tenemos para $\omega_{\min}$

$$\begin{aligned}\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (H - \alpha k_F^+) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[H - \alpha \left(-\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F + H)} \right) \right] \\ &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} - \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\alpha^2 + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right].\end{aligned}\quad (196)$$

Siguiendo el mismo canal, para encontrar la frecuencia de transición máxima, se parte de $\hbar\omega_{\max} = \max[\hbar\omega_-(\theta; \theta_0, \phi_0)]$, donde

$$\begin{aligned}\hbar\omega_-(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \varepsilon_+(k_F^-(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) - \varepsilon_-(k_F^-(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) \\ &= 2d(k_F^-(\theta)),\end{aligned}\quad (197)$$

siendo en esta caso $\theta_0 = \pi/2$, $\theta - \phi_0 = \pi/2$ los ángulos que reflejan esta condición. Las eigen-energías evaluadas para un vector de onda con valor $k_F^-(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\varepsilon_\lambda(k_F^-) = \frac{\hbar^2 k_F^{-2}}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{-2} + 2\alpha H k_F^-}, \quad (198)$$

ya que $d(k_F^-(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{\pi}{2})) = \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{-2} + 2\alpha H k_F^-}$ se obtiene:

$$d(k_F^-(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{\pi}{2})) = \left| H + \alpha k_F^-(\frac{\pi}{2}) \right| = \left| \alpha k_F^-(\frac{\pi}{2}) + H \right|. \quad (199)$$

Nuevamente, con la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^-(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0)$ se tiene la ecuación

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{-2}}{2m} - \alpha k_F^- - H \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F + H) &= \left(k_F^- - \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2, \end{aligned} \quad (200)$$

que entrega las soluciones

$$k_{F\pm}^- = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F + H)}, \quad (201)$$

e introduciendo la solución positiva en (197), se tiene para $\omega_{\text{máx}}(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\begin{aligned} \omega_{\text{máx}}(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (\alpha k_F^- + H) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[\alpha \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F + H)} \right) + H \right] \\ &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m} (\varepsilon_F + H)} \right]. \end{aligned} \quad (202)$$

1.2.2. Frecuencias ω_1 y ω_2

Cuando $H < H_0$ se puede partir de la relación $\hbar\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0) = \min[\hbar\omega_-(\theta; \theta_0, \phi_0)]$, donde

$$\begin{aligned} \hbar\omega_-(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \varepsilon_+(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) - \varepsilon_-(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) \\ &= 2d(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0), \end{aligned} \quad (203)$$

siendo $\theta_0 = \pi/2$, $\theta = \phi_0 + \pi/2$ el valor de los ángulos que cumplen esta condición. De esta forma, las

eigen-energías para el electrón cuyo vector de onda $k_F(\theta; \theta_0, \phi_0)$ de la banda $\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})$

$$\varepsilon_\lambda \left(k_F^\lambda(\theta), (\theta; \theta_0, \phi_0) \right) = \frac{\hbar^2 k_F^{\lambda^2}(\theta; \theta_0, \phi_0)}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{\lambda^2}(\theta; \theta_0, \phi_0) - 2\alpha H k_F^\lambda(\theta; \theta_0, \phi_0)}, \quad (204)$$

donde se define

$$d \left(k_F^\lambda \left(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2} \right) \right) = \left| \alpha k_F^\lambda - H \right| \quad \left(H_0 \equiv \alpha \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} = \alpha k_F > H \right). \quad (205)$$

Partiendo de la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^-(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0)$ para la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{-2}}{2m} + H - \alpha k_F^- \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F - H) &= \left(k_F^- - \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2, \end{aligned} \quad (206)$$

ecuación que entrega las soluciones

$$k_{F\pm}^- = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F - H)}, \quad (207)$$

introduciendo la solución positiva en (203), se tiene $\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\begin{aligned} \omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (\alpha k_F^- - H) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[\alpha \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F - H)} \right) - H \right] \\ &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\alpha^2 + \frac{2}{m} (\varepsilon_F - H)} - H \right] \quad (H < H_0). \end{aligned} \quad (208)$$

Para encontrar $\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0)$ cuando $H > H_0$, se parte de la definición $d(k_F^-(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2})) = |H - \alpha k_F^-|$ $\left(H_0 \equiv \alpha \frac{\sqrt{2m\varepsilon_F}}{\hbar} = \alpha k_F < H \right)$, con la cual (204) se expresa

$$\varepsilon_\lambda \left(k_F^\lambda \right) = \frac{\hbar^2 k_F^{\lambda^2}}{2m} + \lambda(H - \alpha k_F^\lambda), \quad (209)$$

Por medio de la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0)$ en la banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ se tiene

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + H - \alpha k_F^+ \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (\varepsilon_F - H) &= \left(k_F^+ - \frac{m\alpha}{\hbar^2} \right)^2, \end{aligned} \quad (210)$$

que entrega las siguientes soluciones:

$$k_{F\pm}^+ = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F - H)}. \quad (211)$$

Introduciendo la solución positiva en (203), tenemos para $\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\begin{aligned} \omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (\alpha k_F^+ - H) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[\alpha \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F - H)} - H \right) \right] \\ &= 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right] \quad (H > H_0). \end{aligned} \quad (212)$$

Para obtener la frecuencia $\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0)$, se parte de la relación $\hbar\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0) = \max[\hbar\omega_+(\theta; \theta_0, \phi_0)]$, donde

$$\begin{aligned} \hbar\omega_+(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \varepsilon_+(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) - \varepsilon_-(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) \\ &= 2d(k_F^\lambda(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0), \end{aligned} \quad (213)$$

siendo $\theta_0 = \pi/2$, $\theta = \phi_0 + 3\pi/2$ el valor de los ángulos que satisfacen esta condición. De esta forma, al evaluar las eigen-energías evaluadas para un vector de onda con valor $k_F^+(\theta; \theta_0, \phi_0)$ se tiene

$$\varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), \theta; \theta_0, \phi_0) = \frac{\hbar^2 k_F^{+2}(\theta; \theta_0, \phi_0)}{2m} + \lambda \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{+2}(\theta; \theta_0, \phi_0) + 2\alpha H k_F^+(\theta; \theta_0, \phi_0)}, \quad (214)$$

ya que $d(k_F^+(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{3\pi}{2})) = \sqrt{H^2 + \alpha^2 k_F^{+2} + 2\alpha H k_F^+}$

$$d\left(k_F^+\left(\theta_0 = \frac{\pi}{2}, \theta - \phi_0 = \frac{\pi}{2}\right)\right) = \left|H + \alpha k_F^+\left(\frac{\pi}{2}\right)\right| = \left|\alpha k_F^+\left(\frac{\pi}{2}\right) + H\right|. \quad (215)$$

Con la relación $\varepsilon_F = \varepsilon_\lambda(k_F^+(\theta), (\theta; \theta_0, \phi_0))$

$$\begin{aligned} \varepsilon_F &= \frac{\hbar^2 k_F^{+2}}{2m} + \alpha k_F^+ + H \\ \left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F - H) &= \left(k_F^+ + \frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2, \end{aligned} \quad (216)$$

se tienen las soluciones

$$k_{F\pm}^+ = -\frac{m\alpha}{\hbar^2} \pm \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F - H)}, \quad (217)$$

al introducir la solución positiva en (213), se tiene para $\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0)$

$$\begin{aligned}\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0) &= \frac{2}{\hbar} (\alpha k_F^+ + H) \\ &= \frac{2}{\hbar} \left[\alpha \left(-\frac{m\alpha}{\hbar^2} + \sqrt{\left(\frac{m\alpha}{\hbar^2}\right)^2 + \frac{2m}{\hbar^2}(\varepsilon_F - H)} \right) + H \right] \\ &= 2 \left[-\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right].\end{aligned}\quad (218)$$

De esta forma, las transiciones electrónicas entre las bandas $\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0)$, $\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0)$, $\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0)$ y $\omega_{\max}(\theta; \theta_0, \phi_0)$ son:

$$\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2 \left[-\nu \frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], \quad (219)$$

la cual nos da la frecuencia mínima en la cual puede ocurrir una transición de la banda $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a la banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ en la dirección $\theta = \phi_0 + 3\pi/2$, mientras que

$$\omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2 \left[\nu \frac{m\alpha^2}{\hbar^3} - \nu \frac{H}{\hbar} + \nu \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], \quad (220)$$

entrega la frecuencia máxima en la cual se da la transición en la dirección $\theta = \phi_0 + 3\pi/2$, las cuales obedecen $\nu = -1$ cuando $H > H_0$ y $\nu = 1$ en caso contrario. Por otra parte,

$$\omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2 \left[-\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F - H)} \right], \quad (221)$$

entrega la frecuencia mínima a la cual se da la transición en la dirección $\theta = \phi_0 + \frac{\pi}{2}$ y por último

$$\omega_{\max}(\theta; \theta_0, \phi_0) = 2 \left[\frac{m\alpha^2}{\hbar^3} + \frac{H}{\hbar} + \frac{m\alpha}{\hbar^2} \sqrt{\frac{\alpha^2}{\hbar^2} + \frac{2}{m}(\varepsilon_F + H)} \right], \quad (222)$$

define la frecuencia máxima a la cual se da la transición de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ a la banda $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ en la dirección $\theta = \phi_0 + \frac{\pi}{2}$, siguiendo $\omega_{\min}(\theta; \theta_0, \phi_0) < \omega_1(\theta; \theta_0, \phi_0) < \omega_2(\theta; \theta_0, \phi_0) < \omega_{\max}(\theta; \theta_0, \phi_0)$, siendo

$$\Delta\varepsilon = 2[d(k_{F_{\max}}^-(\theta; \theta_0, \phi_0)) - d(k_{F_{\min}}^+(\theta; \theta_0, \phi_0))], \quad (223)$$

el intervalo de energías en el cual se darán las transiciones entre bandas.