

La investigación reportada en esta tesis es parte de los programas de investigación del CICESE (Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California).

La investigación fue financiada por el CONAHCYT (Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías).

Todo el material contenido en esta tesis está protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México). El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo o titular de los Derechos de Autor.

CICESE © 2024, Todos los Derechos Reservados, CICESE

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



Doctorado en Ciencias en Nanociencias

Respuesta óptica no lineal de sistemas con acoplamiento espín-órbita

Tesis

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

Presenta:

Daniel Albino Muñoz Santana

Ensenada, Baja California, México

2024

Tesis defendida por

Daniel Albino Muñoz Santana

y aprobada por el siguiente Comité

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova
Director de tesis

Dra. Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez

Dr. Fernando Rojas Íñiguez

Dr. Israel Rocha Mendoza



Dra. Catalina López Bastidas
Coordinadora del Posgrado en Nanociencias

Dra. Ana Denise Re Araujo
Directora de Estudios de Posgrado

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

Respuesta óptica no lineal de sistemas con acoplamiento espín-órbita

Resumen aprobado por:

Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova

Director de tesis

Se calcula la respuesta lineal y de segundo armónico de la corriente eléctrica y de espín de dos sistemas anisotrópicos con interacción espín-órbita. Primero se derivan expresiones generales de estas funciones respuesta para un Hamiltoniano genérico de dos bandas, las cuales tienen un gran rango de aplicación. El primer sistema es un gas de electrones bidimensional en presencia de acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus lineal en k . Los cálculos muestran cuál es la forma general y el tamaño del espectro, lo estrecha o ancha que puede ser la ventana de absorción, así como su desplazamiento en la frecuencia, todo dependiendo de la orientación cristalográfica que se elija. El conocimiento cuantitativo de esto hace posible un estudio comparativo para varias direcciones de crecimiento, lo que permitiría seleccionar un espectro con características particulares. Se encuentra que no hay segundo armónico de la conductividad eléctrica debido a simetría de inversión temporal. El resto de los tensores se anulan bajo condiciones de simetría $SU(2)$ debido a la colinealidad del campo vectorial espín-órbita. Es posible, bajo otras condiciones, que componentes específicas de los tensores de conductividad de espín se anulen sin necesidad de un campo colineal. De esta manera, una elección adecuada de la dirección de crecimiento y de los parámetros espín-órbita permite seleccionar la polarización de las corrientes de espín lineal y de segundo armónico según la dirección de flujo. El segundo sistema es un gas de electrones libres bidimensional anisotrópico con interacción Rashba también anisotrópica. La presencia de anisotropía de masa y una brecha energética abren distintos escenarios para las transiciones ópticas interbanda permitidas, lo que se manifiesta en las distintas funciones respuesta. La anisotropía del sistema se manifiesta a través de dicroísmo lineal, mientras el rompimiento de simetría de inversión temporal debido a la presencia de una brecha de energía da lugar a fenómenos magneto-ópticos de primer orden, sin embargo, este no es suficiente para evitar la anulación de la respuesta de segundo armónico correspondiente a una corriente de carga. La respuesta lineal revela únicamente corrientes de espín polarizadas fuera del plano, en contraste, las corrientes de segundo armónico fluyen con orientación de espín estrictamente paralela al plano del sistema.

Palabras clave: espín-órbita, no-lineal, anisotropía, espintrónica

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

Nonlinear optical response of spin-orbit coupled systems

Abstract approved by:

PhD Jesús Alberto Maytorena Córdova

Thesis Director

We calculate the linear and second harmonic charge and spin current of two anisotropic systems with spin-orbit interaction. General expressions of wide applicability for these response functions are first derived for a generic two-band model Hamiltonian. The first system is a two-dimensional electron gas in the presence of Rashba and \mathbf{k} -linear Dresselhaus SO couplings. The calculations show how narrow or wide the response spectra can be, what is their overall shape and size, and frequency shiftings, depending on which crystal orientation is selected. The quantitative knowing of this makes possible a comparative study for several orientations, which would allow to select a spectrum with particular characteristics. We find that there is no second harmonic charge conductivity due to time reversal symmetry. The remaining tensors vanish under $SU(2)$ symmetry conditions, characterized by a collinear spin-orbit vector field. Additional conditions under which specific spin conductivity tensor components vanish are possible without having such collinearity. Thus, a proper choice of the growth direction and SO strengths allows to select the polarization of the linear and SH spin currents according to the direction of flowing. The second system is an anisotropic 2D free electron gas with anisotropic Rashba interaction. The presence of mass anisotropy and an energy gap open several distinct scenarios for the allowed optical interband transitions, which manifest in the linear and SH responses contrastingly. The anisotropy of the system manifests itself through linear dichroism, while time reversal symmetry breaking due to the presence of an energy gap gives rise to first order magneto-optical phenomena, however, this is not sufficient to avoid the vanishing second harmonic response corresponding to a charge current. The linear response displays only out-of-plane spin polarized currents, while the SH spin currents flow with spin orientation lying parallel to the plane of the system strictly.

Keywords: spin-orbit, nonlinear, anisotropy, spintronics

Dedicatoria

A mis padres y hermana.

Agradecimientos

Agradezco sinceramente a todo el personal del Centro de Nanociencias y Nanotecnología (CNyN) de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) y del Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada, Baja California (CICESE) por las facilidades brindadas durante el desarrollo de esta investigación. El acceso a sus instalaciones y recursos fue fundamental para el éxito de este trabajo.

Al Consejo Nacional de Humanidades, Ciencias y Tecnologías (CONAHCyT) por el apoyo financiero brindado para la realización de esta investigación.

Quiero expresar mi profundo agradecimiento al Dr. Jesús Alberto Maytorena Córdova por su invaluable orientación, apoyo y dedicación como asesor de esta tesis. Sus conocimientos y experiencia fueron fundamentales para el desarrollo de este trabajo.

También deseo agradecer a mis sinodales, Dra. Priscilla Elizabeth Iglesias Vázquez, Dr. Fernando Rojas Íñiguez y Dr. Israel Rocha Mendoza, por su tiempo, revisión crítica y sugerencias que contribuyeron significativamente a mejorar este trabajo.

A mis compañeros, a mis nuevos amigos, a mis viejos amigos y a mi familia les agradezco de todo corazón su inquebrantable apoyo, comprensión y ánimo. Sus palabras de aliento y su presencia han sido un soporte fundamental, sin el cual este proceso se habría derrumbado.

Tabla de contenido

	Página
Resumen en español	ii
Resumen en inglés	iii
Dedicatoria	iv
Agradecimientos	v
Lista de figuras	viii
Capítulo 1. Introducción	
1.1. Antecedentes	4
1.2. Hipótesis	7
1.3. Objetivos	8
1.3.1. Objetivo general	8
1.3.2. Objetivos específicos	9
Capítulo 2. Corrientes de carga y de espín: fórmulas de Kubo	
2.1. Fórmula general de Kubo	11
2.2. Hamiltoniano de Interacción	13
2.3. Conductividad eléctrica	15
2.4. Conductividad de espín	19
Capítulo 3. Hamiltoniano genérico de baja energía: modelo de dos bandas	
3.1. Densidad conjunta de estados	23
3.2. Conductividad de carga	24
3.2.1. Conductividad de carga de primer orden	24
3.2.2. Segundo armónico de la conductividad de carga	26
3.3. Conductividad de espín	27
3.3.1. Conductividad de espín de primer orden	27
3.3.2. Segundo armónico de la conductividad de espín	28
Capítulo 4. GE2D con IEO Rashba y Dresselhaus[hkl]	
4.1. Interacción espín-órbita tipo Rashba	30
4.2. Interacción espín-órbita tipo Dresselhaus	32
4.3. Hamiltoniano de GE2D con IEO Rashba y Dresselhaus[hkl]	36
4.4. Densidad conjunta de estados	39
4.5. Conductividad de carga a primer orden	43
4.6. Conductividad eléctrica de segundo armónico	47
4.7. Conductividad de espín a primer orden	48
4.8. Segundo armónico de la conductividad de espín	50

Capítulo 5. Modelo anisotrópico de Rashba

5.1.	Conductividad eléctrica de primer orden	59
5.1.1.	Propiedades ópticas lineales	63
5.1.2.	Dicroísmo lineal	63
5.1.3.	Dicroísmo circular	65
5.1.4.	Reflectividad diferencial	65
5.1.5.	Rotación de Kerr/Faraday	67
5.2.	Conductividad eléctrica en el segundo armónico	69
5.3.	Conductividad de espín a primer orden	69
5.4.	Segundo armónico de la conductividad de espín	71

Capítulo 6. Conclusiones

Literatura citada	76
Anexo	81

Lista de figuras

Figura	Página
1. Parte real del tensor de conductividad óptica como función de la frecuencia ω (a) para toda θ , (b) para $\theta = 0$ y para $\theta = \pi/2$. Los parámetros utilizados son una densidad electrónica $n = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, parámetro espín-órbita de Rashba $\alpha = 10 \text{ meV \AA}$ y masas efectivas $m_x = m_0$ y $m_y = 4m_0$. Figura extraída de Saberi-Pouya et al. (2017).	6
2. Dirección de polarización del espín en una corriente de espín presente en un sistema con interacción espín-órbita Rashba y Dresselhaus. Las curvas azules muestran la magnitud de la corriente de espín y los vectores la dirección de polarización. El eje horizontal es la relación entre los parámetros de Rashba y Dresselhaus, mientras que el eje vertical muestra la dirección del campo eléctrico. Figura extraída de Hamamoto et al. (2017).	8
3. Representación de distintos sistemas de dos bandas: (a) sistema espín-órbita, (b) material de Dirac, (c) aislante topológico. Figura modificada de Manchon et al. (2015).	22
4. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $ \lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y dirección de crecimiento arbitraria. Se han omitido las tildes en el vector de onda por simplicidad.	31
5. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $ \lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus y dirección de crecimiento [001].	36
6. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $ \lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus[001]. La relación entre los parámetros espín-órbita es (a) $\gamma k_n^2 = 2\alpha$ y (b) $\gamma k_n^2 = \alpha$	38
7. (a) Esquema de posibles transiciones verticales de energía a temperatura $T=0$; se dan para aquellos valores de k y ω que satisfacen $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ y $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_-$. (b) Contornos de Fermi y curvas de resonancia para las cuatro frecuencias características $\omega^+, \omega_a, \omega_b$ y ω^- de un GE2D crecido en dirección [123]. La zona sombreada en ambas figuras indica los valores de k que pueden contribuir a las transiciones.	40
8. Espectro de la densidad conjunta de estados para varias orientaciones cristalográficas. Los parámetros utilizados son $\alpha = 160 \text{ meV \AA}$, $\gamma k_n^2 = 0.5\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m = 0.05m_0$	42
9. (a) Curvas de resonancia $C_r(\omega^+)$, $C_r(\omega_a)$, $C_r(\omega_b)$, $C_r(\omega^-)$ y contornos de Fermi $k_F^\pm(\theta)$ para las orientaciones cristalográficas [123] y [456]. (b) Se muestran también los correspondientes espectros de la densidad conjunta de estados $J_{+-}(\omega)$, (c) así como la región angular disponible en el espacio de momentos para transiciones verticales. Los parámetros espín-órbita considerados en ambos casos son $\alpha = 1.6 \times 10^{-9} \text{ eV cm}$ y $\gamma k_n^2 = 2\alpha$, la densidad electrónica es $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y la masa efectiva $m = 0.05m_0$	44
10. Componentes (a) longitudinal y (b) transversal del tensor de conductividad lineal $\sigma_{ij}^{inter}(\omega)$ para un GE2D con IEO Rashba-Dresselhaus crecido en la dirección [123]. Las líneas de puntos verticales indican las posiciones de las frecuencias críticas. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Fig. 8.	46
11. (a) Componentes longitudinales y (b) transversales del tensor de conductividad de espín $\sigma_{ij}^z(\omega)$ para un GE2D crecido a lo largo de la dirección [123]. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 8.	50

12. (a) Componentes longitudinales y (b) transversales Hall del tensor de conductividad de espín de segundo armónico con polarización de espín fuera del plano para un GE2D crecido a lo largo de la dirección [123]. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 8. 52
13. Forma de los niveles Rashba según la relación entre Δ y ε_A : (a) $\Delta = 0$, (b) $\Delta < \varepsilon_A$ y (c) $\Delta > \varepsilon_A$ 57
14. Bandas de energía $\varepsilon_{\pm}(k, \theta)$ del modelo de Rashba anisotrópico con $\varepsilon_A > \Delta > 0$. Las zonas sombreadas indican la región k permitida para transiciones ópticas según la posición del nivel de Fermi: (a) $\varepsilon_F > \Delta$, (b) $|\varepsilon_F| < \Delta$, (c) $\varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta$. Los recuadros muestran los contornos de Fermi correspondientes. 58
15. Densidad conjunta de estados $8\pi\alpha^2 J_{+-}(\omega; \varepsilon_F)$ y bordes de absorción $\hbar\omega_{\pm}(\varepsilon_F)$ del modelo anisotrópico de Rashba para el caso $\varepsilon_A > \Delta$. Los parámetros utilizados son $\Delta = 0.3\varepsilon_A$, $\alpha = 10\text{meV}\text{\AA}$, $n = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y $m_x = m_0$, $m_y = 4m_0$ para las masas efectivas. 59
16. (a) Componentes longitudinales y transversales del tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ para un modelo de Rashba anisotrópico con brecha de energía cuando (a) $\varepsilon_F > \Delta$ (b) $|\varepsilon_F| < \Delta$ y $\varepsilon_F < -\Delta$. Los parámetros utilizados son $\Delta = 0.3\varepsilon_R$, $n = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$, $m_x = m_0$, $m_y = 4m_0$, $\alpha = 10\text{meV}\text{\AA}$ 63
17. Conductividad longitudinal del modelo anisotrópico de Rashba en función de la frecuencia y la dirección del campo eléctrico externo. Aquí, $\Delta = 1\text{meV}$ y $\varepsilon_F = 2\Delta$, mientras el resto de los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 16. 64
18. $\Delta R/R$ para un modelo anisotrópico de Rashba, donde $m_x = m_0$ y m_y toma distintos valores. Las constantes dieléctricas utilizadas son $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, $\Delta = 1\text{meV}$, $\varepsilon_F = 2\Delta$ y el resto de los parámetros son los mismos que en la figura 16. 67
19. Ángulo de rotación Kerr en el modelo anisotrópico de Rashba con brecha energética. $\Delta = 0.3\varepsilon_A$, las constantes dieléctricas utilizadas son $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la figura 17. 68
20. Componentes (a) longitudinales y (b) transversales del tensor de conductividad de espín $\sigma_{ij}^z(\omega)$ para el modelo anisotrópico de Rashba con brecha energética. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 17. 71
21. Tensor de la conductividad de espín de segundo armónico $\sigma_{ijl}^{\ell, (2\omega)}(\omega)$ para el modelo anisotrópico de Rashba con brecha de energía, que determina una corriente de espín con flujo en dirección i y espín polarizado en a lo largo de ℓ , inducida por las componentes j y l del campo eléctrico externo. (a) Componentes longitudinales con $i = j = l = \ell$. (b) Componentes longitudinales con $i = j = l \neq \ell$. (c) Componentes Hall con $i \neq j = l = \ell$. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 17. 73

Capítulo 1. Introducción

La dimensión, uno de los parámetros más fundamentales de un material, puede modificar distintas propiedades del mismo; incluso una característica tan familiar como lo es el color de un objeto está sujeta al cambio cuando el tamaño de este se ve reducido de manera significativa y fenómenos cuánticos comienzan a manifestarse notoriamente. Este surgimiento de nuevas características es el principal impulso detrás del estudio de los llamados nanomateriales, materiales que pueden clasificarse de la siguiente manera: como cero-dimensionales (0D) cuando su extensión en las tres direcciones cartesianas es menor a 100 nanómetros, como unidimensionales (1D) cuando su escala está restringida en dos de estas direcciones o como bidimensionales (2D) en caso de que el tamaño del material esté limitado solamente en una dirección (Mas-Ballesté et al., 2011; Gupta et al., 2015).

El sistema 2D por excelencia es el grafeno, una lámina con grosor de un sólo átomo compuesta únicamente de carbono, sin embargo, no es el único; sus logros y potenciales aplicaciones, así como sus limitaciones, han motivado, desde que fue posible aislar una de estas hojas de carbono por primera vez (Novoselov et al., 2004), el descubrimiento de otros sistemas. Lo que es más, incluso antes de la síntesis del grafeno ya se estudiaban otras estructuras en las que se forma un sistema donde electrones (o huecos) son confinados a un plano; este sistema es conocido como gas electrónico bidimensional (GE2D) y es tradicionalmente construido en heteroestructuras semiconductoras donde la formación de pozos de potencial puede restringir el movimiento de las partículas conductoras a dos dimensiones cuando estos son lo suficientemente angostos (Winkler, 2003).

La presencia del fenómeno relativista conocido como interacción espín-órbita (IEO) en estas heteroestructuras semiconductoras es uno de los principales motivos por los que el GE2D ha sido y sigue siendo estudiado. Es posible ilustrar el origen de esta interacción de la siguiente manera: el marco de referencia más común en física del estado sólido es el que considera núcleos atómicos estáticos y electrones cinéticos, sin embargo, si se invierten los papeles y se considera el marco referencial electrónico, el movimiento de la carga positiva nuclear genera un campo magnético orbital efectivo que se ve acoplado con el espín del electrón; a esto se le conoce como acoplamiento espín-órbita (Manchon et al., 2015). Este vínculo entre el momento angular intrínseco y el movimiento espacial en un potencial permite manipular el espín del electrón mediante campos eléctricos externos al gas, lo cual ofrece una alternativa a los medios magnéticos tradicionalmente utilizados para este fin. Esta posibilidad ha dado origen a la rama de la espintrónica conocida como espín-orbitrónica (Bihlmayer et al., 2022; Bercieux y Lucignano, 2015).

Para lograr el desarrollo de dispositivos espintrónicos, es decir, dispositivos que aprovechen el espín del electrón para almacenar o transferir información, es necesario inducir una polarización o generar una corriente de espín, así como lograr su manipulación y un tiempo de vida con duración suficiente para ser detectado; como su nombre lo indica, la espín-orbitronica utiliza la IEO para llevar a cabo estas tareas. Algunas de las ventajas de este control eléctrico del espín son su escalabilidad, su menor consumo de energía, así como una mejor manipulación local en comparación a su contraparte magnética (Manchon et al., 2015). Algunos ejemplos notables de fenómenos y aplicaciones que proporcionan y manifiestan un acceso al espín electrónico por medio de la IEO en los GE2Ds son el efecto Hall de espín (Kato et al., 2004; Sinova et al., 2015), la polarización de espín inducida por una corriente eléctrica (Sih et al., 2005), la formación de una textura de espín helicoidal (Koralek et al., 2009) y la posibilidad de fabricar un transistor de espín no balístico (Schliemann et al., 2003; Koo et al., 2009).

Para que el término que describe a la IEO sobreviva en un sistema periódico es necesario romper la simetría de inversión espacial. Esta necesidad es consecuencia de la acción simultanea de otro tipo de simetría, la simetría de inversión temporal. El Hamiltoniano que describe la interacción de un electrón con el campo magnético efectivo, o campo espín-órbita, generado por su movimiento en un potencial eléctrico es

$$H_{SO} = \frac{\hbar}{2m^2c^2} (\nabla V \times \mathbf{k}) \cdot \mathbf{S}, \quad (1)$$

donde m es la masa del electrón en reposo, $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ su momento, $\hbar = h/2\pi$, h la constante de Planck, c la velocidad de la luz en el vacío, $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$ es el operador de espín y $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli. Este Hamiltoniano conserva simetría de inversión temporal, es decir, sus energías cumplen con $\varepsilon_{\lambda}(-\mathbf{k}) = \varepsilon_{-\lambda}(\mathbf{k})$, donde $\lambda = \pm$ representa los dos estados de espín, y se hace necesario que el campo espín-órbita $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = \hbar(\nabla V \times \mathbf{k})/2m^2c^2$ sea impar en el vector de onda \mathbf{k} , esto es $\boldsymbol{\Omega}(\mathbf{k}) = -\boldsymbol{\Omega}(-\mathbf{k})$. Este campo impar en \mathbf{k} se anula en sistemas centrosimétricos y sobrevive únicamente en aquellos sin centro de inversión espacial (Chen et al., 2021).

En semiconductores como el silicio (Si) o germanio (Ge), la conservación de una simetría de inversión espacial, inherente a una estructura cristalográfica tipo diamante, da lugar a una doble degeneración de los estados de espín electrónicos, es decir $\varepsilon_{+}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{-}(\mathbf{k})$; en cambio, en semiconductores como el arseniuro de galio (GaAs) o el antimoniuro de indio (InSb), donde se cuenta con una estructura cristalina tipo zincblenda, se carece de un centro de inversión espacial en el bulto, lo cual provoca el rompimiento de esta degeneración a través de la contribución espín-órbita tipo Dresselhaus. Este desdoblamiento de los estados de espín puede ocurrir por medio de otro tipo de IEO, la cual resulta de romper la simetría

de inversión espacial a través de la estructuración del sistema. Esta otra contribución es conocida como tipo Rashba y en heteroestructuras semiconductoras se manifiesta gracias al potencial de confinamiento asimétrico que se genera en la interfaz de los distintos materiales (Winkler, 2003).

En primer lugar tenemos entonces a la IEO tipo Rashba (Bychkov y Rashba, 1984), mecanismo de importancia fundamental para la espín-orbitronica debido a la posibilidad de ser modulada mediante un voltaje de compuerta externo. En segundo, a la contribución tipo Dresselhaus (Dresselhaus, 1955) que, dado su origen de bulto, depende de la orientación cristalográfica en que es crecida la heteroestructura semiconductor. Estas características brindan medios de control, ya sea previo al ensamble de la heteroestructura, al elegir una dirección de crecimiento, o ajustando una polarización, corriente o textura de espín una vez que estas sean generadas. Además, algunos efectos causados por la conjugación de ambas contribuciones son: una anisotropía en el desdoblamiento de los estados de espín responsable, por ejemplo, de una particular dependencia en la frecuencia de las conductividades Hall de carga y espín (Maytorena et al., 2006) o de una anisotropía en la dinámica de plasmones (Badalyan et al., 2009); otra consecuencia es la posibilidad de simetrías del Hamiltoniano en que se conserva el espín y los fenómenos asociados a estas, como lo son un campo espín-órbita colineal y, por lo tanto, independencia del espín electrónico en el momento, un tiempo de vida de espín infinito debido al eje de precesión de espín fijo (Schliemann, 2017), la represión de batimientos de espín en oscilaciones de la magnetoresistividad (Averkiev et al., 2005), la desaparición del *Zitterbewegung* (del alemán, *Bewegung*, 'movimiento' y *zitter* 'tremuloso, tembloroso') (Schliemann et al., 2006; Biswas y Ghosh, 2012), la anulación de la contribución interbanda a la absorción óptica y la conductividad Hall de espín (Li et al., 2013), o la presencia de texturas de espín helicoidales (Koralek et al., 2009). El impacto de esta simetría con conservación de espín ha sido tal que llevó a Schliemann, Egues y Loss a proponer en 2003 un transistor de efecto de campo de espín no balístico en un GE2D con orientación cristalográfica [001]. Sin embargo, a pesar del estudio exhaustivo de estos fenómenos, la investigación se ha restringido principalmente a los pozos de potencial crecidos en las direcciones cristalográficas de alta simetría [001], [110] y [111]. No es hasta recientemente que una orientación arbitraria ha llamado la atención (Kammermeier et al., 2016; Kozulin et al., 2017; Kozulin y Malyshev, 2019).

Además del GE2D formado en heteroestructuras semiconductoras, existen sistemas con un comportamiento similar al de un gas de electrones libres, los cuales presentan un tipo de anisotropía diferente al generado por la acción simultánea de la IEO tipo Rashba y tipo Dresselhaus. Este comportamiento es característico del fosforeno, una monocapa de fosforo negro de red ortorrómbica y estructura corrugada que se traduce a bandas anisotrópicas y dan lugar a novedosos fenómenos físicos (Carvalho et al., 2016).

También existen materiales 2D análogos, como los monocalcogenuros metálicos del grupo IV GeS, GeSe, SnS, y SnSe, que comparten la forma ondulada del fosforeno y se comportan de manera similar (Sarkar y Stratakis, 2020). El estudio de estos materiales se ha visto incrementado considerablemente en los últimos años debido a la gran variedad de posibles aplicaciones; el fosforo negro 2D como alternativa al grafeno debido a la alta movilidad de los portadores de carga y a la presencia de una brecha energética modulable por medio del grosor que va desde los 2 eV del fosforeno a los 0.3 eV del material de bulto; monocalcogenuros metálicos utilizados para la fabricación de transistores de efecto de campo, celdas fotovoltaicas no lineales y dispositivos valletrónicos (Sarkar y Stratakis, 2020; Gomes y Carvalho, 2015; Akhtar et al., 2017). Además, recientemente se ha introducido una forma de acoplamiento espín-órbita tipo Rashba en materiales de este tipo, la cual presenta un desdoblamiento anisotrópico (Popović et al., 2015); esto da lugar a incluso más aplicaciones, como la ya mencionada manipulación eléctrica del espín.

Una gran parte de los fenómenos estudiados (y aplicaciones propuestas) relacionados con los sistemas mencionados hasta el momento tienen su fundamento en la teoría de respuesta lineal, específicamente en la respuesta que manifiestan estos sistemas cuando se les aplica una perturbación eléctrica. Sin embargo, recientemente ha habido un creciente interés por fenómenos no lineales debido principalmente a su alta sensibilidad a cambios en la simetría del sistema; un ejemplo de esta dependencia es la anulación de la corriente de carga eléctrica de segundo orden en sistemas centrosimétricos. Además, el surgimiento de nuevos integrantes de la familia de efectos Hall, como los efectos Hall y Hall de espín no lineales, no han hecho más que incrementar la investigación al respecto (Du et al., 2021). Estas características le dan a la respuesta no lineal un gran valor tecnológico no solamente en relación a posibles dispositivos ópticos, sino también como una poderosa herramienta para el estudio de fenómenos relacionados con la simetría (Sun et al., 2019; Wei et al., 2021).

1.1. Antecedentes

Como ya se mencionó, al estudiar GE2Ds crecidos en heteroestructuras semiconductoras que presentan tanto acoplamiento espín-órbita tipo Rashba como tipo Dresselhaus lineal en k , cabe la posibilidad de obtener un Hamiltoniano cuya simetría permite la conservación del espín. Esta simetría corresponde al grupo unitario especial SU(2) y va acompañada de un campo espín-órbita colineal en el espacio de momentos. En el sistema crecido a lo largo de la dirección [001], esta configuración se obtiene al considerar contribuciones espín-órbita de igual magnitud, esto es, $|\alpha| = |\beta_{[001]}|$, donde α es el parámetro

de Rashba y $\beta_{[001]}$ el parámetro de Dresselhaus para dicha orientación cristalina; experimentalmente, esta situación se logra a través de la modulación de α utilizando un voltaje de compuerta (Nitta et al., 1997). Otros casos en que la obtención de la simetría SU(2) está consolidada son los de gases crecidos a lo largo de las direcciones [110] y [111], sin embargo, la condición necesaria para que esta se presente es una relación diferente entre los parámetros de interacción espín-órbita de Rashba y Dresselhaus. Para el caso de la dirección [110] es posible obtenerla cuando $\alpha = 0$, mientras que la dirección [111] adopta dicha simetría cuando $\alpha + \beta_{[111]} = 0$ (Schliemann, 2017; Žutić et al., 2004). Esta no es la única diferencia entre las orientaciones del gas con alta simetría; por ejemplo, la dirección [110] es la única de las tres en que el campo espín-órbita tiene una componente perpendicular al plano del gas electrónico; la orientación [111] por su parte tiene la característica de que el término del Hamiltoniano de la contribución Dresselhaus tiene la misma forma que la de Rashba y por lo tanto puede tratarse matemáticamente igual que a un sistema en el que únicamente está presente el acoplamiento tipo Rashba. Estas diferencias llevan a preguntarse qué características tendrían otras orientaciones cristalinas del GE2D, no solamente la [001], [110] y [111], y si la dirección de crecimiento de la heteroestructura podría funcionar como un elemento de control sobre diferentes funciones respuestas. Por ejemplo, aun cuando estas orientaciones cristalográficas, por ser de alta simetría, son las más estudiadas, no son las únicas en que un Hamiltoniano SU(2) es accesible. En una investigación publicada en 2016 por Kammermeier et al. se tomó en cuenta un gas electrónico cuyo plano estaba definido por un vector arbitrario \hat{n} normal a su superficie, permitiendo así el análisis de cualquier dirección de crecimiento cristalográfico. En este trabajo se encontró que es posible obtener un operador de conservación de espín siempre y cuando la dirección de crecimiento consista de al menos dos índices de Miller que coincidan en módulo: para cada una de esas orientaciones existe una relación entre los parámetros espín-órbita que causa un campo espín-órbita colineal. También se demostró que, incluso tomando en cuenta términos cúbicos del vector de onda para la contribución de Dresselhaus, los sistemas con direcciones de crecimiento [110] y [111] pueden presentar un campo espín-órbita colineal.

El otro tipo de sistema anisotrópico mencionado anteriormente consiste en un término cinético similar al de un GE2D, sin embargo, presenta una masa distinta dependiendo de si el electrón se mueve en la dirección x o si se mueve en la dirección y . Este tipo de comportamiento se da en materiales con un sistema cristalino ortorrómbico y una estructura corrugada, características del fosforeno y algunos análogos como los monocalcogenuros metálicos del grupo IV. En un estudio de Saberi-Pouya et al. (2017) se calculó la conductividad óptica de un Hamiltoniano como este al cual, además, se le agregó un término espín-órbita con un desdoblamiento anisotrópico tipo Rashba (Popović et al., 2015). Se encontró que tanto el ancho de la ventana de absorción como la intensidad de esta son muy sensibles a la anisotropía de las masas (ver figura 1), la cual puede ser utilizada como un grado de libertad más

al momento de diseñar dispositivos espintrónicos. Todavía más recientemente, en un trabajo por Ahn y Das Sarma (2021), se estudian las propiedades plasmónicas del gas de electrones con anisotropía de masas, tanto para el modelo 2D como para el 3D, problema que hasta entonces únicamente había sido abordado a través de una aproximación del sistema isotrópico (Stern, 1967).

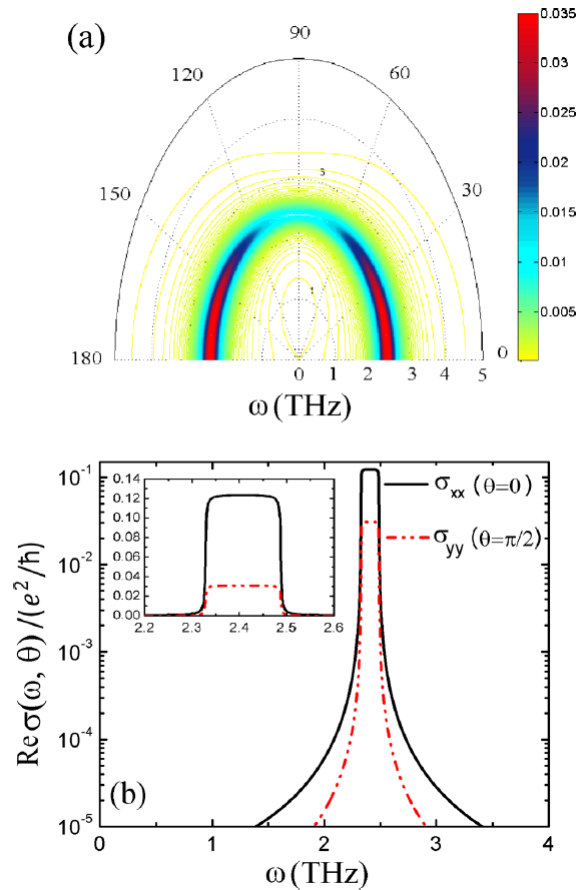


Figura 1. Parte real del tensor de conductividad óptica como función de la frecuencia ω (a) para toda θ , (b) para $\theta = 0$ y para $\theta = \pi/2$. Los parámetros utilizados son una densidad electrónica $n = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, parámetro espín-órbita de Rashba $\alpha = 10 \text{ meV\AA}$ y masas efectivas $m_x = m_0$ y $m_y = 4m_0$. Figura extraída de Saberi-Pouya et al. (2017).

Tradicionalmente, para que un sistema presente efecto Hall, es necesario el rompimiento de simetría de inversión temporal, sin embargo, se han encontrado formas de obtener efectos Hall en presencia de esta simetría. Las dos vías principales son, por un lado, la respuesta no lineal del sistema en cuestión, y por otro, la generalización del fenómeno a los grados de libertad de espín o de valle (Du et al., 2021). En 2015, Sodemann y Fu, basándose en trabajos teóricos anteriores (Moore y Orenstein, 2010; Deyo et al., 2009), demostraron que una corriente Hall puede ocurrir como respuesta de segundo orden a un campo eléctrico externo en una gran variedad de sistemas sin centro de inversión espacial (requisito para obtener una corriente de carga de orden cuadrático) y, además, que esta corriente tiene su origen

cuántico en la velocidad anómala de los electrones de Bloch generada por la curvatura de Berry en el espacio de momentos (Sundaram y Niu, 1999). Este fenómeno se ha confirmado de forma experimental recientemente (Ma et al., 2018).

Por otra parte, el efecto Hall de espín, propuesto hace ya más de medio siglo (Dyakonov y Perel, 1971) ha ganado particular importancia en el área de la espintrónica desde sus primeras observaciones hace casi dos décadas (Kato et al., 2004; Wunderlich et al., 2005). Este resurgimiento del fenómeno ha llevado a un reciente interés no solamente en su inducción a primer orden sino también en la generación de corriente de espín proporcional al cuadrado del campo eléctrico. A este respecto, existen algunas investigaciones como la de Ivanov et al. en 2011 donde se observa la posibilidad de inducir un efecto Hall de espín en un GE2D a partir de términos proporcionales al cuadrado de la amplitud de un campo eléctrico con frecuencia ω ; en este trabajo se consideró específicamente la dirección de crecimiento del gas con índices de Miller [110]. Además, en un estudio más reciente, realizado por Hamamoto et al. en 2017, se investiga la generación no lineal de una corriente de espín DC en un GE2D Rashba-Dresselhaus, esta vez crecido en la dirección [001]. El cálculo que se llevó a cabo fue el de respuesta de rectificación óptica utilizando la ecuación de Boltzmann en la aproximación del tiempo de relajación. Se mostró, además, como la dependencia angular de la corriente de espín puede ser manipulada mediante la dirección del campo eléctrico, así como por la relación entre los parámetros espín-órbita (ver figura 2). En un trabajo posterior, Pan y Marinescu (2019) reformulan el cálculo para tomar en cuenta el cambio local que sufre la función de distribución en equilibrio debido a los campos externos, lo cual deriva en corrientes de menor magnitud. Otro estudio relacionado es el de Kapri et al. (2021), donde se estudia el papel que desempeña la curvatura de Berry en la generación de corrientes de espín lineales y no lineales en un modelo de Rashba 2D con brecha de energía y en un sistema 3D no centrosimétrico.

1.2. Hipótesis

El conocimiento de la conductividad óptica de carga y de espín, lineal y de segundo orden, podría sugerir formas de control de las corrientes correspondientes mediante diversos parámetros como la relación entre las distintas contribuciones de interacción espín-órbita, la orientación de la muestra, la frecuencia del campo eléctrico externo y las simetrías del sistema, entre otros.

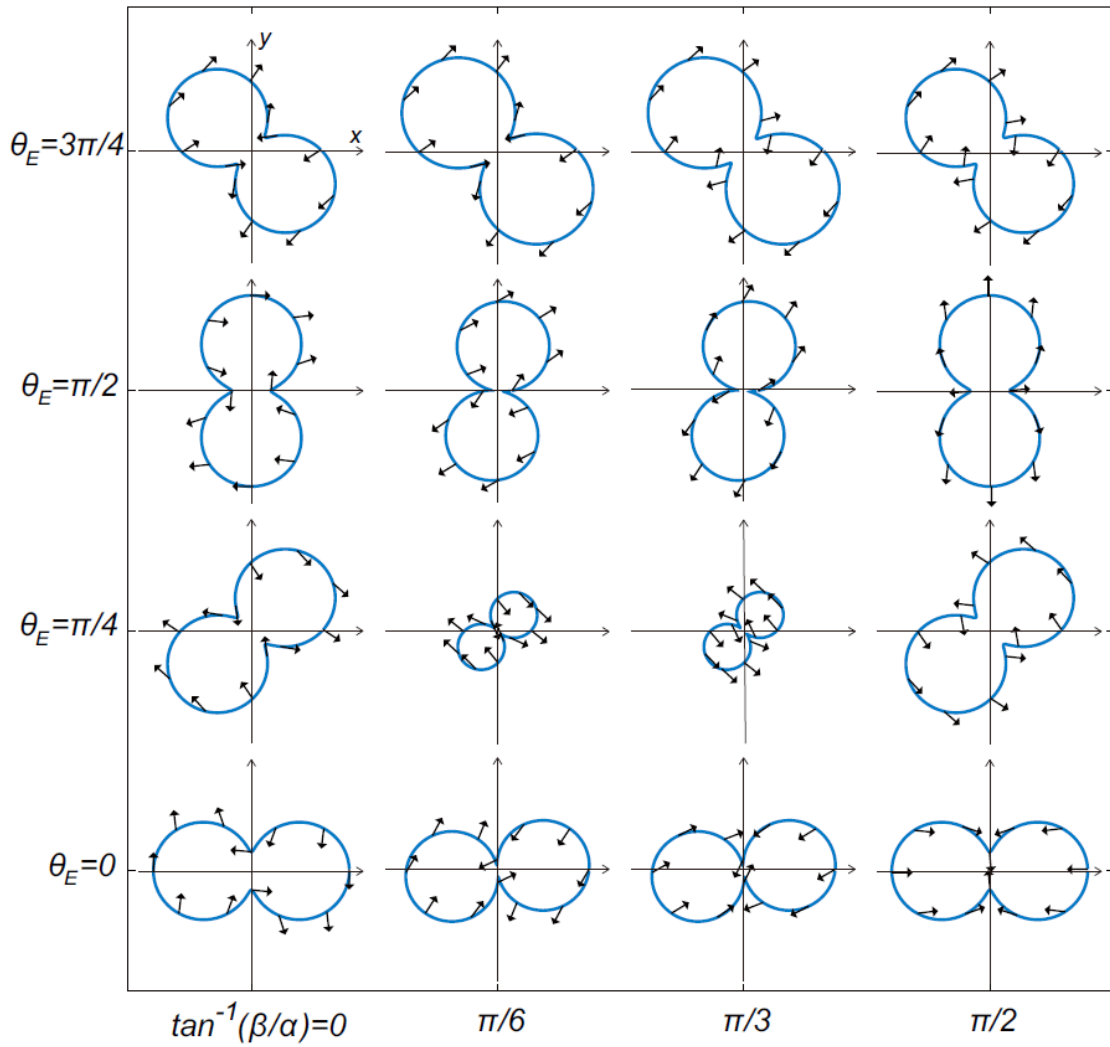


Figura 2. Dirección de polarización del espín en una corriente de espín presente en un sistema con interacción espín-órbita Rashba y Dresselhaus. Las curvas azules muestran la magnitud de la corriente de espín y los vectores la dirección de polarización. El eje horizontal es la relación entre los parámetros de Rashba y Dresselhaus, mientras que el eje vertical muestra la dirección del campo eléctrico. Figura extraída de Hamamoto et al. (2017).

1.3. Objetivos

1.3.1. Objetivo general

Estudiar las corrientes de carga y de espín, lineales y de segundo armónico, en dos sistemas anisotrópicos bidimensionales con interacción espín-órbita, inducidas como respuesta a una perturbación eléctrica.

1.3.2. Objetivos específicos

- Dentro del formalismo de la teoría de respuesta lineal y no lineal, obtener las fórmulas de Kubo para los tensores de conductividad de carga y espín de primer y de segundo orden, de un modelo genérico de dos bandas de baja energía.
- Aplicar estas fórmulas de Kubo al caso de dos sistemas anisotrópicos bidimensionales de interés:
 - Gas electrónico bidimensional con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus con dirección cristalográfica arbitraria.
 - Modelo de Rashba anisotrópico en presencia de una brecha energética.
- Estudio sistemático de las expresiones y espectros, tanto de la densidad conjunta de estados como de las funciones respuesta de ambos sistemas.

Capítulo 2. Corrientes de carga y de espín: fórmulas de Kubo

La convergencia entre la física del estado sólido y la óptica se manifiesta al explorar la interacción entre un campo electromagnético y un medio material. En el núcleo de esta convergencia yace una pregunta fundamental: ¿cómo reacciona un medio material cuando se ve afectado por un campo electromagnético? Para abordar esta cuestión, se recurre a las denominadas funciones respuesta, que incluyen a las susceptibilidades eléctricas y magnéticas, así como a la conductividad, entre otras.

Estas funciones actúan como constantes de proporcionalidad entre el campo perturbativo y cantidades físicas como la polarización eléctrica, la magnetización o la corriente. Las funciones respuesta, a su vez, pueden expresarse en términos de funciones de correlación mediante fórmulas tipo Kubo. Estas fórmulas revelan de manera explícita la conexión entre la respuesta del medio y el espectro de excitación (Il'inskii y Keldysh, 1994).

Anteriormente, la óptica estaba limitada a los términos lineales de la interacción luz-materia, sin embargo, con la llegada del láser, se descubrieron numerosos fenómenos no lineales que solo pueden describirse teniendo en cuenta términos de orden superior en la expansión de las cantidades físicas en potencias del campo electromagnético. Por ejemplo, el comienzo del área de óptica no lineal usualmente se considera el descubrimiento de la generación de segundo armónico, el cual consiste en la producción de luz con una frecuencia igual al doble de la correspondiente al haz incidente. Este fenómeno es utilizado en diversas aplicaciones, como en fuentes de luz coherente de alta frecuencia, espectroscopía no lineal, detección de superficies e interfaces, etc. Otros fenómenos no lineales incluyen la rectificación óptica, que resulta en la creación de un campo estático a lo largo del material, y la generación de suma y diferencia de frecuencias, donde la luz incidente da origen a frecuencias adicionales mediante combinaciones aritméticas de las originales, solo por mencionar fenómenos de segundo orden (Boyd, 2020).

En la primera sección de este capítulo se introduce el formalismo general de Kubo que se utiliza en las secciones 2.3 y 2.4 para obtener las fórmulas de los tensores de conductividad de carga y de espín, tanto de respuesta lineal como de respuesta cuadrática al campo eléctrico perturbativo. El Hamiltoniano de interacción correspondiente a tal perturbación se expone en la sección 2.2.

2.1. Fórmula general de Kubo

El método desarrollado por Kubo se encarga de expresar, utilizando teoría de perturbaciones, el valor esperado de una cantidad física. Para llevarlo a cabo, hace uso de la matriz densidad, matriz que resulta de gran utilidad para caracterizar sistemas que no pueden ser descritos mediante un solo vector de estado sino mediante un conjunto de ellos, cada uno con su correspondiente peso probabilístico. Explícitamente, la matriz densidad de un sistema con probabilidad w_n de encontrarse en el estado $|n\rangle$ está definida como (Il'inskii y Keldysh, 1994; Blum, 2012)

$$\hat{\rho} = \sum_n w_n |n\rangle \langle n|, \quad (2)$$

y permite calcular el valor esperado de un operador \hat{O} mediante la traza

$$\langle \hat{O} \rangle = \text{Tr} [\hat{O} \hat{\rho}]. \quad (3)$$

El principal requisito para utilizar la fórmula de Kubo es un sistema en equilibrio, invariante en el tiempo descrito por un Hamiltoniano H_0 al cual se le aplica una perturbación externa $H'(t)$. El Hamiltoniano total es entonces

$$H(t) = H_0 + H'(t). \quad (4)$$

Este tipo de Hamiltoniano permite utilizar la representación de interacción, donde tanto la función de estado como los operadores dependen del tiempo y están dados, respectivamente, por (Blum, 2012)

$$|\psi(t)_I\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle, \quad (5)$$

$$\hat{O}(t)_I = e^{iH_0 t/\hbar} \hat{O} e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (6)$$

Por lo tanto, el operador de la matriz densidad en esta representación es

$$\hat{\rho}(t)_I = e^{iH_0 t/\hbar} \hat{\rho} e^{-iH_0 t/\hbar}, \quad (7)$$

y su evolución temporal, descrita por el teorema de Liouville, será

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{\rho}(t)_I = \frac{1}{i\hbar} [H'(t)_I, \hat{\rho}(t)_I]. \quad (8)$$

Al integrar ambos lados de la ecuación (8) se obtiene

$$\hat{\rho}(t)_I = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [H'(t')_I, \hat{\rho}(t')_I], \quad (9)$$

donde $\hat{\rho}_0$ es la matriz densidad en equilibrio dada por (2) y t_0 es el momento en que la perturbacion externa comienza a actuar sobre el sistema. Ahora, sustituyendo esta expresi3n en el conmutador de la misma, iterando, y tomando 3nicamente los tres primeros t3rminos, la evoluci3n temporal de la matriz densidad hasta segundo orden puede escribirse de la forma

$$\hat{\rho}(t)_I = \hat{\rho}_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' [H'(t')_I, \hat{\rho}_0] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' [H'(t')_I, [H'(t'')_I, \hat{\rho}_0]]. \quad (10)$$

Entonces, de acuerdo a (3), el valor esperado de un operador \hat{O} a orden cuadr3tico en $H'(t)_I$ evoluciona como

$$\begin{aligned} \langle \hat{O}(t) \rangle = \text{Tr} \{ \hat{O}(t)_I \hat{\rho}_0 \} &- \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \{ [\hat{O}(t)_I, H'(t')_I] \hat{\rho}_0 \} \\ &- \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \text{Tr} \{ [[\hat{O}(t)_I, H'(t')_I], H'(t'')_I] \hat{\rho}_0 \}, \end{aligned} \quad (11)$$

donde se ha hecho uso de las propiedades c3clicas de la traza. Si tomamos el primer t3rmino de la 3ltima expresi3n, sustituimos $\hat{\rho}_0$ con (2) y desarrollamos, tenemos que

$$\begin{aligned} \text{Tr} \{ \hat{O}(t)_I \hat{\rho}_0 \} &= \text{Tr} \left\{ \hat{O}(t)_I \left(\sum_n w_n |n\rangle \langle n| \right) \right\} \\ &= \sum_i \langle i | \hat{O}(t)_I \sum_n w_n |n\rangle \langle n | i \rangle \\ &= \sum_{i,n} w_n \langle n | i \rangle \langle i | \hat{O}(t)_I |n\rangle \\ &= \sum_n w_n \langle n | \hat{O}(t)_I |n\rangle. \end{aligned} \quad (12)$$

De manera similar pueden manipularse el segundo y el tercer t3rmino, de modo que la expresi3n (11), implementado la notaci3n $\langle \dots \rangle_0 = \sum_n w_n \langle n | \dots |n\rangle$, adquiere la forma

$$\langle \hat{O}(t) \rangle = \langle \hat{O}(t)_I \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \langle [\hat{O}(t)_I, H'(t')_I] \rangle_0 - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \langle [[\hat{O}(t)_I, H'(t')_I], H'(t'')_I] \rangle_0, \quad (13)$$

donde $|n\rangle$ es el eigenestado de H_0 . La ecuaci3n (13), conocida como f3rmula de Kubo (Kubo, 1957), en este caso hasta segundo orden en la perturbaci3n $H'(t)$, revela caracter3sticas fuera de equilibrio de la

cantidad física \hat{O} utilizando promedios sobre los estados en equilibrio del sistema indicados por $\langle \dots \rangle_0$. A partir del segundo y del tercer término de esta fórmula se deducirán expresiones generales, de respuesta lineal y de segundo orden, respectivamente, para las conductividades de carga y de espín. Antes de eso, sin embargo, se introducirá rápidamente el tipo de perturbación que se requiere para calcular dichas funciones respuesta. Por otro lado, en esta sección, se ha empleado el acento circunflejo para denotar el operador de una cantidad física. No obstante, a partir de ahora simplificaremos la notación eliminando dicho acento, buscando mejorar la claridad y concisión de las expresiones.

2.2. Hamiltoniano de Interacción

El Hamiltoniano que describe la interacción de un electrón con un campo electromagnético está dado por

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 - e\varphi, \quad (14)$$

donde e es la magnitud de la carga del electrón ($e > 0$), mientras que φ y \mathbf{A} son los potenciales escalar y vectorial, respectivamente. Utilizando una combinación de las transformaciones de norma de Lorenz y de Coulomb, este Hamiltoniano puede escribirse como

$$H = \frac{1}{2m} \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2. \quad (15)$$

Esto es posible gracias a que la norma de Lorenz, definida como

$$\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0, \quad (16)$$

es únicamente una selección parcial de norma, de manera que todavía se tiene la libertad de realizar una transformación del tipo $\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \lambda}{\partial t}$, siempre y cuando se satisfaga la ecuación de onda $\partial^2 \lambda / \partial t^2 = c^2 \nabla^2 \lambda$ (Mahan, 2000). Si esta transformación se lleva a cabo por medio de una función λ tal que $\partial \lambda / c \partial t = \varphi$, entonces $\varphi' = 0$ y (16) se convierte en la definición de la norma de Coulomb

$$\nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (17)$$

Además, si se considera un campo pequeño, es posible, al desarrollar el cuadrado de la expresión (15), descartar el término proporcional a A^2 y quedarse únicamente con términos lineales en \mathbf{A} ; utilizando la

definición del operador de momento $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ junto con (17), se tiene que el conmutador $[\mathbf{p}, \mathbf{A}] = 0$, y el Hamiltoniano se reduce a

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A}, \quad (18)$$

con la forma $H = H_0 + H'(t)$, donde

$$H'(t) = \frac{e}{mc}\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} \quad (19)$$

es el *Hamiltoniano de interacción*, dependiente del tiempo, que describe a la perturbación electromagnética.

En el marco de la teoría de perturbaciones es común llevar a cabo una expansión del potencial vectorial en serie de potencias de r . Esta, para el caso de una onda plana con frecuencia angular ω

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0 e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} + c.c., \quad (20)$$

puede realizarse expandiendo el exponencial en una serie de Taylor en $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ como

$$e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} = \left(1 + \mathcal{O}\left(\frac{|\mathbf{r}|}{\lambda}\right)\right) e^{-i\omega t}. \quad (21)$$

Por lo tanto, si se toma en cuenta que los campos perturbativos a considerar presentan una longitud de onda mucho más grande que las distancias interatómicas, de esta expansión se pueden descartar todos los términos de orden superior y quedarse únicamente, en buena aproximación, con el independiente de \mathbf{r} ; es decir, se considera un campo espacialmente uniforme. A esto es a lo que se le conoce como aproximación del dipolo eléctrico y en caso de haber considerado más términos de la expansión, estos serían los correspondientes al dipolo magnético, cuadrupolo eléctrico, etc (Shen, 1984). Volviendo al Hamiltoniano de interacción, el vector \mathbf{p} en (19) está dado a partir del Hamiltoniano independiente del tiempo H_0 y puede ser sustituido por la densidad de corriente $\mathbf{j} = -e\mathbf{v}$ usando la relación $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, donde \mathbf{v} es la velocidad definida como

$$v_i = \frac{\partial H_0}{\partial p_i}, \quad (22)$$

de modo que

$$H'(t) = -\frac{1}{c}\mathbf{j} \cdot \mathbf{A}(t). \quad (23)$$

Ahora, utilizando la definición $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ y la ecuación de Maxwell $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial\mathbf{B}/c\partial t$, podemos observar la relación entre el campo eléctrico y el potencial vectorial dada por $\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/c\partial t$; si el campo

y el potencial están dados por $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}$ y $\mathbf{A}(t) = \mathbf{A}_0 e^{-i\omega t}$, se tiene que

$$\mathbf{A}(t) = -\frac{ic}{\omega} \mathbf{E}(t), \quad (24)$$

y el Hamiltoniano de interacción que se busca es

$$H'(t) = \frac{i}{\omega} \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}(t). \quad (25)$$

2.3. Conductividad eléctrica

Para obtener el tensor de conductividad es necesario relacionar la densidad de corriente eléctrica \mathbf{j} con el campo eléctrico \mathbf{E} . Esto es posible mediante la sustitución del operador de corriente

$$j_i = -ev_i \quad (26)$$

y de la perturbación (25) en la fórmula (13); aquí e es la carga del electrón ($e > 0$) y \mathbf{v} es el operador de velocidad. La función respuesta lineal o de primer orden se obtendrá del segundo término de la fórmula de Kubo, mientras que la respuesta de orden cuadrático del tercero.

Conductividad eléctrica a primer orden

Llevando a cabo la sustitución mencionada, la corriente de carga lineal en el campo está dada por

$$\langle j_i(t) \rangle^{(1)} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_{-\infty}^t dt' \langle [j_i(t), j_j(t')] \rangle_0 E_j(t'), \quad (27)$$

donde se ha omitido el subíndice I de la representación de interacción por brevedad y como debido al principio de causalidad la densidad de corriente solo depende de los valores del campo anteriores en el tiempo, se ha tomado el límite inferior de la integral como $t = -\infty$ (bajo la suposición de que no había un campo perturbativo en el pasado lejano) (Il'inskii y Keldysh, 1994). Mientras que la ecuación (27) proporciona una descripción completa de la corriente eléctrica inducida por un campo externo

$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}(\omega)e^{-i\omega t} + c.c.$, es la respuesta en función de la frecuencia ω la que nos interesa en este caso. Para obtener esta descripción primero se realiza el cambio de variable $t - t' \rightarrow \tau$, de manera que se obtiene

$$\langle j_i(t) \rangle^{(1)} = \frac{1}{\hbar\omega} \int_0^\infty d\tau \langle [j_i(t), j_j(t - \tau)] \rangle_0 E_j(t - \tau). \quad (28)$$

Ahora, sustituyendo el campo y puesto que, debido al principio de invarianza temporal, la elección del origen $t = 0$ del marco de referencia es arbitrario y la función de correlación $\langle [j_i(t), j_j(t')] \rangle_0$ depende únicamente de la diferencia $t - t'$, la expresión anterior puede escribirse como

$$\langle j_i(t) \rangle^{(1)} = e^{-i\omega t} \sigma_{ij}(\omega) E_j(\omega) + c.c., \quad (29)$$

donde $\sigma_{ij}(\omega)$ es el tensor de conductividad eléctrica de respuesta lineal en función de la frecuencia que se busca y está dado por

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \int_0^\infty d\tau e^{i\tilde{\omega}\tau} \langle [j_i(\tau), j_j(0)] \rangle_0. \quad (30)$$

A causa de la divergencia en la integral cuando $\tau \rightarrow \infty$, es necesario introducir el parámetro positivo infinitesimal $\eta = 0^+$ de modo que $\tilde{\omega} = \omega + i\eta$. Físicamente, este parámetro puede ser justificado como un mecanismo de relajación (Il'inskii y Keldysh, 1994; Bruus y Flensberg, 2004).

Para realizar la integral en el tiempo de la ecuación (30) es necesario desglosar los términos del conmutador, de manera que

$$\begin{aligned} \langle [j_i(t), j_j(0)] \rangle_0 &= \sum_{m,n} w_m \left[\langle m | j_i(t) | n \rangle \langle n | j_j(0) | m \rangle - \langle m | j_j(0) | n \rangle \langle n | j_i(t) | m \rangle \right] \\ &= \sum_{m,n} (w_m - w_n) \langle m | j_i(t) | n \rangle \langle n | j_j(0) | m \rangle \end{aligned} \quad (31)$$

donde se ha utilizado la propiedad $\sum_n |n\rangle \langle n| = 1$. Además, dado que los operadores están en la representación de interacción, recordando la ecuación (6) se tiene

$$\begin{aligned} \langle m | j_i(t) | n \rangle &= \langle m | e^{iH_0 t/\hbar} j_i(0) e^{-iH_0 t/\hbar} | n \rangle \\ &= e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} \langle m | j_i(0) | n \rangle \\ &= e^{i(\omega_m - \omega_n)t} \langle m | j_i(0) | n \rangle \\ &\equiv e^{i(\omega_{mn})t} \langle m | j_i | n \rangle. \end{aligned} \quad (32)$$

Al sustituir las ecuaciones (31) y (32) en (30), la conductividad eléctrica queda como

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}(\omega) &= \frac{1}{\hbar\tilde{\omega}} \sum_{m,n} \int_0^\infty dt e^{i(\tilde{\omega}+\omega_{mn})t} (w_m - w_n) \langle m|j_i|n\rangle \langle n|j_j|m\rangle \\ &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}} \sum_{m,n} (w_m - w_n) \frac{\langle m|j_i|n\rangle \langle n|j_j|m\rangle}{\tilde{\omega} + \omega_{mn}}.\end{aligned}\quad (33)$$

En su definición, la densidad de corriente presenta dos contribuciones, denotadas, una paramagnética y la otra diamagnética. La conductividad eléctrica hereda esta distinción, y la contribución que se obtiene mediante la fórmula de Kubo, es decir, la expresión (33), corresponde a la parte paramagnética de la conductividad. El término diamagnético de respuesta lineal puede ser introducido mediante la fórmula

$$\sigma_{ij}(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} [\Pi_{ij}(\omega) - \Pi_{ij}(0)], \quad (34)$$

donde

$$\Pi_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{i\tilde{\omega}t} \langle [j_i(t), j_j(0)] \rangle_0 \quad (35)$$

y $\Pi_{ij}(0) = \lim_{\tilde{\omega} \rightarrow 0} \Pi_{ij}(\omega)$. El término proporcional a $-\Pi_{ij}(0)$ corresponde a la parte diamagnética y su introducción se justifica al notar que la corriente debe anularse cuando el potencial vectorial no varía con el tiempo ($\omega = 0$) (Falkovsky y Varlamov, 2007). Explícitamente, el tensor de conductividad de primer orden que incluye ambas contribuciones está dado por

$$\begin{aligned}\sigma_{ij}(\omega) &= \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}} \sum_{m,n} (w_m - w_n) \langle m|\hat{j}_i|n\rangle \langle n|\hat{j}_j|m\rangle \left(\frac{1}{\tilde{\omega} + \omega_{mn}} - \frac{1}{\omega_{mn}} \right) \\ &= -\frac{i}{\hbar} \sum_{m,n} \frac{w_m - w_n}{\omega_{mn}} \frac{\langle m|\hat{j}_i|n\rangle \langle n|\hat{j}_j|m\rangle}{\tilde{\omega} + \omega_{mn}}.\end{aligned}\quad (36)$$

Conductividad eléctrica a segundo orden

La fórmula de Kubo de segundo orden para la densidad de corriente eléctrica es

$$\langle j_i(t) \rangle^{(2)} = \frac{1}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} \int_{-\infty}^t dt' \int_{-\infty}^{t'} dt'' \langle [[j_i(t), j_j(t')], j_k(t'')] \rangle_0 E_j(t') E_k(t''). \quad (37)$$

Para la respuesta cuadrática, el campo eléctrico perturbativo se define como

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}(\omega_1)e^{-i\omega_1 t} + \mathbf{E}(\omega_2)e^{-i\omega_2 t} + c.c., \quad (38)$$

con dos frecuencias diferentes, ω_1 y ω_2 . La aplicación de un campo de este tipo da lugar a diversos fenómenos que involucran la suma y la diferencia de estas frecuencias; casos particulares son la generación de segundo armónico y la rectificación óptica, cuando $\omega_1 = \omega_2$. Una de las aplicaciones más importantes de estos fenómenos en estado sólido es la producción de radiación modulable en regiones del espectro inaccesibles mediante métodos lineales. Esto posibilita, a través de la espectroscopía no lineal, el acceso a información sobre la estructura de la materia, permitiendo, por ejemplo, determinar la orientación cristalina de una muestra (Shen, 1984). Si al desarrollar el factor $E_j(t')E_k(t'')$ nos enfocamos en el término de suma de frecuencias (SF), es decir, el proporcional a $e^{-i(\omega_1+\omega_2)t}$, se tiene

$$\begin{aligned} \langle j_i(t) \rangle_{SF} = e^{-i(\omega_1+\omega_2)t} \frac{1}{\hbar^2 \omega_1 \omega_2} \int_{-\infty}^0 d\tau' \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau'' \left\langle \left[[j_i(t), j_j(t-\tau')], j_k(t-\tau'') \right] \right\rangle_0 \\ \times \left\{ e^{i\omega_1 \tau'} e^{i\omega_2 \tau''} E_j(\omega_1) E_k(\omega_2) + e^{i\omega_2 \tau'} e^{i\omega_1 \tau''} E_j(\omega_2) E_k(\omega_1) \right\} + c.c., \end{aligned} \quad (39)$$

donde se han realizado los cambios de variable $t - t' \rightarrow \tau'$ y $t - t'' \rightarrow \tau''$. Al factorizar las componentes del campo eléctrico $E_j(\omega_1)E_k(\omega_2)$ se obtiene

$$\langle j_i(t) \rangle_{SF} = e^{-i(\omega_1+\omega_2)t} \sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) E_j(\omega_1) E_k(\omega_2) + c.c., \quad (40)$$

donde

$$\sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{\hbar^2 \tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2} \sum_P \int_{-\infty}^0 d\tau' \int_{-\infty}^{\tau'} d\tau'' \left\langle \left[[j_i(t), j_j(t-\tau')], j_k(t-\tau'') \right] \right\rangle_0 e^{i\tilde{\omega}_1 \tau'} e^{i\tilde{\omega}_2 \tau''} \quad (41)$$

es el tensor de conductividad eléctrica de la contribución por suma de frecuencias y \sum_P corresponde a la simetría de permutación intrínseca, esto es, $(j, \omega_1) \leftrightarrow (k, \omega_2)$.

De forma similar a como se hizo en (31), pueden desarrollarse los conmutadores en (41) y obtener

$$\begin{aligned} \left\langle \left[[j_i(t), j_j(t-\tau')], j_k(t-\tau'') \right] \right\rangle_0 = \langle m|j_i|n\rangle \langle n|j_j|l\rangle \langle l|j_k|m\rangle e^{-i\omega_{nl}\tau'} e^{-i\omega_{lm}\tau''} \\ - \langle m|j_j|n\rangle \langle n|j_i|l\rangle \langle l|j_k|m\rangle e^{-i\omega_{mn}\tau'} e^{-i\omega_{lm}\tau''} \\ - \langle m|j_k|n\rangle \langle n|j_i|l\rangle \langle l|j_j|m\rangle e^{-i\omega_{mn}\tau''} e^{-i\omega_{lm}\tau'} \\ + \langle m|j_k|n\rangle \langle n|j_j|l\rangle \langle l|j_i|m\rangle e^{-i\omega_{mn}\tau''} e^{-i\omega_{nl}\tau'}, \end{aligned} \quad (42)$$

donde se ha utilizado (32) y tomado en cuenta que $\omega_{ij} + \omega_{jk} + \omega_{ki} = 0$. Sustituyendo esta expresión en la conductividad, llevando a cabo las integrales en el tiempo y definiendo $\omega_3 = \omega_1 + \omega_2$, σ_{ijk}^{SF} queda como

$$\sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{\hbar^2 \tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{m,n,l} \frac{w_l - w_m}{\tilde{\omega}_2 - \omega_{lm}} \left(\frac{\langle m|j_i|n\rangle \langle n|j_j|l\rangle \langle l|j_k|m\rangle}{\tilde{\omega}_3 - \omega_{nm}} - \frac{\langle m|j_j|n\rangle \langle n|j_i|l\rangle \langle l|j_k|m\rangle}{\tilde{\omega}_3 - \omega_{ln}} \right), \quad (43)$$

o intercambiando el segundo término dentro de los paréntesis con el de la suma \sum_P ,

$$\sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{\hbar^2 \tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{m,n,l} \frac{\langle m|j_i|n\rangle \langle n|j_j|l\rangle \langle l|j_k|m\rangle}{\tilde{\omega}_3 - \omega_{nm}} \left(\frac{w_l - w_m}{\tilde{\omega}_2 - \omega_{lm}} - \frac{w_n - w_l}{\tilde{\omega}_1 - \omega_{nl}} \right). \quad (44)$$

De este tensor de conductividad para la suma de frecuencias es posible obtener los correspondientes al segundo armónico (2ω) y a la rectificación óptica (0ω) mediante

$$\sigma_{ijk}^{(2\omega)}(\omega) = \sigma_{ijk}^{SF}(\omega, \omega), \quad (45)$$

$$\sigma_{ijk}^{(0\omega)}(\omega) = \sigma_{ijk}^{SF}(\omega, -\omega). \quad (46)$$

Las tensores (36) y (44) son los tensores de conductividad de carga, lineal y de segundo orden, respectivamente, que se utilizarán posteriormente para obtener expresiones que describan específicamente a un sistema de dos niveles. Antes de eso, sin embargo, se mostrarán las ecuaciones, análogas a estas, correspondientes a la conductividad de espín.

2.4. Conductividad de espín

En esta sección, se presentan expresiones de primer y segundo orden para la conductividad de espín, una función respuesta que caracteriza una corriente de espín inducida. La conductividad de espín establece la relación entre el campo eléctrico y la densidad de corriente de espín, expresada como $\mathcal{J}_i^\ell(\omega) = \sigma_{ij}^\ell(\omega) E_j(\omega)$. La definición estándar de este operador es

$$\mathcal{J}_i^\ell = \frac{\hbar}{4} (\sigma_\ell v_i + v_i \sigma_\ell), \quad (47)$$

donde ℓ indica la dirección de polarización de la corriente de espín, mientras i la dirección del flujo (Shen et al., 2004; Sinova et al., 2004). Los mismos pasos que se siguieron en la sección anterior para

obtener expresiones de la conductividad de carga pueden seguirse para obtener las correspondientes de la conductividad de espín, de modo que lo único que hace falta es hacer el cambio de operador. Por lo tanto, para la función de respuesta lineal se tiene

$$\sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = \frac{i}{\hbar\tilde{\omega}} \sum_{m,n} (w_m - w_n) \frac{\langle m | \mathcal{J}_i^{\ell} | n \rangle \langle n | j_j | m \rangle}{\tilde{\omega} + \omega_{mn}}. \quad (48)$$

Por otro lado, para la contribución de suma de frecuencias de la conductividad de espín de segundo orden se obtiene el tensor

$$\sigma_{ijk}^{\ell,SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{\hbar^2 \tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{m,n,l} \frac{\langle m | \mathcal{J}_i^{\ell} | n \rangle \langle n | j_j | l \rangle \langle l | j_k | m \rangle}{\tilde{\omega}_3 - \omega_{nm}} \left(\frac{w_l - w_m}{\tilde{\omega}_2 - \omega_{lm}} - \frac{w_n - w_l}{\tilde{\omega}_1 - \omega_{nl}} \right), \quad (49)$$

del cual es posible obtener, una vez más, tanto la respuesta de segundo armónico como la de rectificación óptica haciendo las siguientes sustituciones de las frecuencias ω_1 y ω_2 :

$$\sigma_{ijk}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \sigma_{ijk}^{\ell,SF}(\omega, \omega), \quad (50)$$

$$\sigma_{ijk}^{\ell,(0\omega)}(\omega) = \sigma_{ijk}^{\ell,SF}(\omega, -\omega). \quad (51)$$

Capítulo 3. Hamiltoniano genérico de baja energía: modelo de dos bandas

Ahora que se han obtenido expresiones generales para las conductividades de carga y de espín de primer y segundo orden, es posible particularizarlas a los sistemas de interés. Sin embargo, antes de utilizarlas en los modelos específicos se reducirá su universalidad para obtener formas más prácticas que, no obstante, mantienen un grado de generalidad. El sistema cuántico para el que se reducirán las fórmulas es el modelo de dos bandas o niveles de energía. A pesar de su aparente simplicidad, el modelo de dos bandas no solo se limita a representar los sistemas que se examinarán en capítulos subsiguientes, sino que también demuestra ser aplicable a una amplia variedad de otros sistemas de gran relevancia. Esta versatilidad confiere un valor añadido a las expresiones que se desarrollarán en este capítulo, permitiendo su utilidad en diversos contextos de la física de la materia condensada. Este modelo encuentra aplicación en sistemas como los gases bidimensionales de electrones o huecos (Schliemann, 2017) y resulta fundamental para describir sistemas de Dirac, como el grafeno (Wehling et al., 2014), así como semimetales de Weyl (Parker et al., 2019) y aislantes topológicos 2D y 3D (Liu et al., 2016; Hamamoto et al., 2017) (ver Figura 3).

Consideremos el siguiente Hamiltoniano en el espacio de momentos:

$$H = \varepsilon_0(\mathbf{k})\mathbb{I} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{d}(\mathbf{k}), \quad (52)$$

donde $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ es el vector de las matrices de Pauli¹ que puede representar, según el sistema, al espín de la partícula en cuestión o a un pseudoespín, es decir, un grado de libertad que se comporta de forma análoga al espín-1/2 y, sin embargo, no está relacionado con el momento angular (Manchon et al., 2015). El vector de onda $\mathbf{k} = k_x\hat{\mathbf{x}} + k_y\hat{\mathbf{y}} + k_z\hat{\mathbf{z}}$ de este Hamiltoniano no está limitado a dos dimensiones, por lo que puede representar tanto sistemas 2D como 3D. La función $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ también mantiene un grado de generalidad y suele exhibir una dependencia lineal o cuadrática en k_i que puede reflejar características significativas de las bandas de energía. Este comportamiento es evidente, por ejemplo, en situaciones como la anisotropía de masas efectivas en un gas de electrones 2D (Ahn y Das Sarma, 2021; Saberi-Pouya et al., 2017), o la dispersión lineal asociada a una inclinación de las bandas (Trescher et al., 2015; Yang et al., 2018; Mojarro et al., 2021), conocida en inglés como *band tilt*. Por su

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

parte, el campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = d_x(\mathbf{k})\hat{x} + d_y(\mathbf{k})\hat{y} + d_z(\mathbf{k})\hat{z}$ se comporta como un campo Zeeman dependiente de \mathbf{k} que actúa sobre el grado de libertad correspondiente a σ . Es crucial tener presente esta distinción entre espín y pseudoespín pues, aunque las operaciones matemáticas al manipular las matrices de Pauli sean las mismas, la naturaleza física que representan es diferente, y esto repercute en las propiedades de simetría del sistema. Por ejemplo, para el caso de espín verdadero, la presencia de simetría de inversión temporal implica que $d_i(\mathbf{k})$ debe ser una función impar en \mathbf{k} , por lo tanto, si alguna de estas componentes es constante, la simetría se rompe; en cambio, si el campo es par en \mathbf{k} , el sistema presenta simetría de inversión espacial. En un sistema donde se conserven ambas simetrías es necesario que $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = 0$. Por otra parte, si σ se refiere a un tipo de pseudoespín, las condiciones de simetría de inversión temporal son $d_x(-\mathbf{k}) = d_x(\mathbf{k})$, $d_y(-\mathbf{k}) = -d_y(\mathbf{k})$ y $d_z(-\mathbf{k}) = d_z(\mathbf{k})$, mientras que los requerimientos para la simetría de inversión espacial únicamente difieren en $d_z(-\mathbf{k}) = -d_z(\mathbf{k})$. Por lo tanto, para el caso de pseudoespín, un sistema invariante temporal y espacialmente debe cumplir $d_z = 0$. Independientemente del caso, para conservar cualquiera de estas simetrías en el Hamiltoniano, es necesario también $\varepsilon_0(-\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k})$.

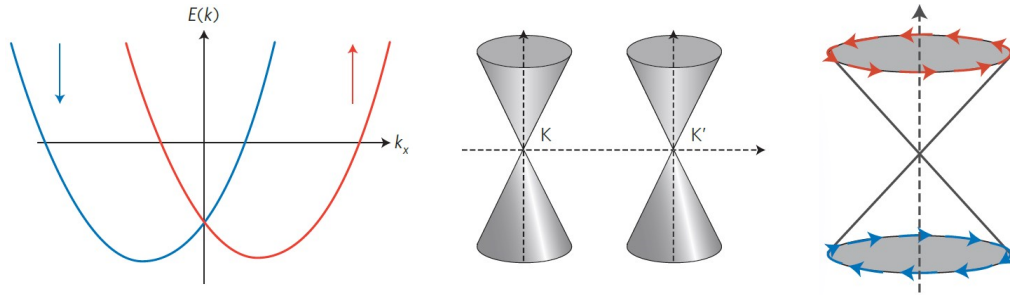


Figura 3. Representación de distintos sistemas de dos bandas: (a) sistema espín-órbita, (b) material de Dirac, (c) aislante topológico. Figura modificada de Manchon et al. (2015).

Los eigenvectores del Hamiltoniano (52) y su correspondiente espectro de energía están dados por

$$|\lambda\mathbf{k}\rangle = \begin{pmatrix} N_\lambda \\ \lambda N_{-\lambda} e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (53)$$

y

$$\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) = \varepsilon_0(\mathbf{k}) + \lambda d(\mathbf{k}), \quad (54)$$

respectivamente, donde $d(\mathbf{k}) = |\mathbf{d}(\mathbf{k})|$, $N_\lambda = \sqrt{(d + \lambda d_z)/2d}$, $\tan \phi = d_y/d_x$, mientras que $\lambda = \pm 1$ se encarga de etiquetar los niveles superior (+) e inferior (-) de energía. Un resultado de utilidad es el

valor esperado del operador de espín $\mathbf{S} = \hbar\boldsymbol{\sigma}/2$, que revela la orientación del espín en el estado $|\lambda\mathbf{k}\rangle$. Esta orientación es paralela al campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$, ya que

$$\langle\lambda\mathbf{k}|\boldsymbol{\sigma}|\lambda\mathbf{k}\rangle = \lambda\frac{\mathbf{d}(\mathbf{k})}{d(\mathbf{k})}, \quad (55)$$

lo cual explica por qué, cuando $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ representa un campo espín-órbita, se puede interpretar como un campo magnético efectivo dependiente de \mathbf{k} .

3.1. Densidad conjunta de estados

Antes de obtener los tensores de conductividad correspondientes a los sistemas de interés, se obtendrá su densidad conjunta de estados, la cual anticipa algunas propiedades espectrales como la posición y forma de la ventana de absorción. Esta función indica el número de transiciones verticales permitidas entre los niveles $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, y se define como

$$J_{+-}(\omega) = \sum_{\mathbf{k}}' \delta(\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) - \hbar\omega), \quad (56)$$

donde $\sum_{\mathbf{k}} \equiv \int d^n k / (2\pi)^n$ y n es la dimensionalidad del sistema. En la ecuación (56) pueden observarse dos restricciones, una indicada por la prima en la sumatoria, y la segunda, explícita, por la delta de Dirac. La primera limita los saltos energéticos a aquella región en que el nivel inferior está ocupado y el superior desocupado; a temperatura $T = 0$, esto equivale a satisfacer la condición $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$, donde ε_F es el nivel de Fermi. Para el caso de sistemas bidimensionales, esta región es la zona entre los contornos de Fermi $k_F^\lambda(\theta)$, curvas equienergéticas equivalentes a la superficie de Fermi de sistemas 3D, definidas por la ecuación

$$\varepsilon_\lambda(k_F^\lambda(\theta), \theta) = \varepsilon_F, \quad (57)$$

donde θ es el ángulo polar en el plano xy de $\mathbf{k} = k(\cos\theta, \sin\theta)$. La segunda restricción es consecuencia de la conservación de la energía y permite únicamente transiciones donde la diferencia energética entre los niveles sea

$$2d(\mathbf{k}) = \varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega \quad (58)$$

Esto significa que solo aquellos puntos (k_x, k_y) que pertenecen a la curva de resonancia

$$C_r(\omega) = \{(k_x, k_y) | 2d(k_x, k_y) = \hbar\omega\} \quad (59)$$

y se encuentran dentro de la región $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$, contribuyen a la densidad conjunta de estados $J_{+-}(\omega)$.

3.2. Conductividad de carga

3.2.1. Conductividad de carga de primer orden

Para un sistema electrónico de dos niveles, la conductividad de orden lineal (36) adquiere la forma

$$\sigma_{ij}(\omega) = -i\hbar \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_\lambda - f_{\lambda'}}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \frac{\langle \lambda | \hat{j}_i | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \hat{j}_j | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}}, \quad (60)$$

donde $f_\lambda = f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) = (1 + e^{(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_F)/k_B T})^{-1}$ es la distribución de Fermi-Dirac y se ha simplificado la notación del vector de estado (53) por brevedad ($|\lambda\mathbf{k}\rangle \rightarrow |\lambda\rangle$). Este tensor puede separarse en dos contribuciones, una que corresponde a las transiciones verticales entre los niveles de energía (interbanda) y otra que tiene ver con electrones que se mantienen en la misma banda, y sin embargo, presentan un cambio energético a través de un cambio en el vector de onda \mathbf{k} (intrabanda). De este modo, (60) puede escribirse como

$$\sigma_{ij}(\omega) = \sigma_{ij}^{intra}(\omega) + \sigma_{ij}^{inter}(\omega), \quad (61)$$

donde, para la contribución intrabanda se tiene²

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{intra}(\omega) &= -i\hbar \sum_{\lambda\mathbf{k}} \lim_{\lambda' \rightarrow \lambda} \frac{f_\lambda - f_{\lambda'}}{\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \frac{\langle \lambda | \hat{j}_i | \lambda' \rangle \langle \lambda' | \hat{j}_j | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'}} \\ &= \frac{i}{\tilde{\omega}} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f_\lambda}{\partial \varepsilon_\lambda} \right) \langle \lambda | \hat{j}_i | \lambda \rangle \langle \lambda | \hat{j}_j | \lambda \rangle, \end{aligned} \quad (62)$$

²El límite de $(f_\lambda - f_{\lambda'})/(\varepsilon_\lambda - \varepsilon_{\lambda'})$ cuando $\lambda' \rightarrow \lambda$ debe ser interpretado como $\partial f_\lambda / \partial \varepsilon_\lambda$, pues surge de

$$\lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k})) - f(\varepsilon_\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{q}))}{\varepsilon_\lambda(\mathbf{k}) - \varepsilon_\lambda(\mathbf{k} + \mathbf{q})}$$

en el cálculo de $\sigma_{ij}(\mathbf{q}, \omega)$ cuando se considera un campo inhomogéneo $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}$.

y el término interbanda es

$$\sigma_{ij}^{inter}(\omega) = -i\hbar \sum_{\lambda\mathbf{k}} \lambda \frac{f_{\lambda} - f_{-\lambda}}{2d} \frac{\langle \lambda | \hat{j}_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \hat{j}_j | \lambda \rangle}{\hbar\omega + \lambda 2d}. \quad (63)$$

Para obtener expresiones explícitamente en función de la energía $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ y del campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ se desarrollan los elementos de matriz del operador de corriente $\hat{j}_i = -e\hat{v}_i$, donde la velocidad \hat{v}_i puede obtenerse mediante (22), esto es

$$\begin{aligned} \hat{v}_i &= \frac{1}{\hbar} \frac{\partial H}{\partial k_i} \\ &= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon_0(\mathbf{k})}{\partial k_i} \mathbb{I} + \sigma_j \frac{\partial d_j(\mathbf{k})}{\partial k_i} \right), \end{aligned} \quad (64)$$

de manera que se obtiene el valor esperado

$$\langle \lambda | j_i | \lambda \rangle = -\frac{e}{\hbar} \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} + \frac{\partial d_j}{\partial k_i} \langle \lambda | \sigma_j | \lambda \rangle \right) \quad (65)$$

y

$$\langle \lambda | j_i | -\lambda \rangle = -\frac{e}{\hbar} \frac{\partial d_j}{\partial k_i} \langle \lambda | \sigma_j | -\lambda \rangle. \quad (66)$$

Por lo tanto, los factores presentes en (62) y (63) están dados por

$$\langle \lambda | j_i | \lambda \rangle \langle \lambda | j_j | \lambda \rangle = \frac{e^2}{\hbar^2} \left[\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_j} + \frac{\lambda}{d} \mathbf{d} \cdot \left(\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} + \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_j} \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) + \frac{1}{d^2} \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \right] \quad (67)$$

$$= \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_j} \quad (68)$$

y por

$$\langle \lambda | j_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_j | \lambda \rangle = \frac{e^2}{\hbar^2} \frac{\partial d_p}{\partial k_i} \frac{\partial d_q}{\partial k_j} \langle \lambda | \sigma_p | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_q | \lambda \rangle \quad (69)$$

$$= \frac{e^2}{\hbar^2} \left[\frac{1}{d^2} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) + \frac{i\lambda}{d} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} \right], \quad (70)$$

respectivamente, donde se han utilizado los resultados (55) y

$$\langle \lambda | \sigma_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_j | \lambda \rangle = \frac{1}{d^2} \left(d^2 \delta_{ij} - d_i d_j \right) + i\lambda \varepsilon_{ijk} \frac{d_k}{d}. \quad (71)$$

Sustituyendo en las contribuciones intrabanda e interbanda del tensor de conductividad de carga, estas

quedan como

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = i\pi \frac{\sigma_0}{\hbar\tilde{\omega}} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f_\lambda}{\partial \varepsilon_\lambda} \right) \frac{\partial \varepsilon_\lambda}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_\lambda}{\partial k_j}, \quad (72)$$

$$\sigma_{ij}^{inter}(\omega) = -i\pi\sigma_0 \sum_{\lambda\mathbf{k}} (f_\lambda - f_{-\lambda}) \frac{\lambda 2d}{\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d} \mathcal{Q}_{ij}^\lambda(\mathbf{k}), \quad (73)$$

donde $\sigma_0 = e^2/\pi\hbar$ y

$$\mathcal{Q}_{ij}^\lambda(\mathbf{k}) = g_{ij}(\mathbf{k}) - \frac{i}{2}\varepsilon_{ijz}\Omega_z^\lambda(\mathbf{k}) \quad (74)$$

es el tensor geométrico cuántico del estado $|\lambda\rangle$, cuya parte real es el tensor métrico cuántico y su parte imaginaria es la curvatura de Berry asociada a tal estado:

$$g_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{1}{4d^4} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right), \quad (75)$$

$$\Omega_z^\lambda(\mathbf{k}) = -\lambda\varepsilon_{ijz} \frac{1}{4d^3} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d}. \quad (76)$$

Estas expresiones son un resultado de gran utilidad ya que, al mantener un grado de generalidad, en ellas puede sustituirse cualquier sistema electrónico de dos niveles descrito por (52). En capítulos posteriores se utilizarán para obtener los tensores de conductividad lineal de los modelos físicos de interés.

3.2.2. Segundo armónico de la conductividad de carga

Ahora, se obtendrá una expresión del tensor de conductividad de orden cuadrático para el sistema de dos niveles, en específico la contribución de segundo armónico. La expresión (44) del término de la suma de frecuencias para este sistema toma la forma

$$\sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{1}{\tilde{\omega}_1\tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{\lambda\lambda'\lambda''} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\langle \lambda | j_i | \lambda' \rangle \langle \lambda' | j_j | \lambda'' \rangle \langle \lambda'' | j_k | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega}_3 - \varepsilon_{\lambda'\lambda}} \left(\frac{f_{\lambda''} - f_\lambda}{\hbar\tilde{\omega}_2 - \varepsilon_{\lambda''\lambda}} - \frac{f_{\lambda'} - f_{\lambda''}}{\hbar\tilde{\omega}_1 - \varepsilon_{\lambda'\lambda''}} \right), \quad (77)$$

que al desarrollar la sumatoria en λ' y λ'' puede escribirse como

$$\sigma_{ijk}^{SF}(\omega_1, \omega_2) = \frac{-1}{\tilde{\omega}_1\tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{\lambda\mathbf{k}} f_\lambda \left\{ \left(\langle \lambda | j_i | \lambda \rangle - \langle -\lambda | j_i | -\lambda \rangle \right) \frac{\langle \lambda | j_j | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_k | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_1 - \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 + \lambda 2d)} \right. \\ \left. - \left(\langle \lambda | j_j | \lambda \rangle - \langle -\lambda | j_j | -\lambda \rangle \right) \left[\frac{\langle \lambda | j_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_k | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_3 + \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 + \lambda 2d)} + \frac{\langle \lambda | j_k | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_i | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_3 - \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 - \lambda 2d)} \right] \right\}, \quad (78)$$

donde el factor $\langle \lambda | j_i | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_j | \lambda \rangle$ está dado por (69) y

$$\langle \lambda | j_i | \lambda \rangle - \langle -\lambda | j_i | -\lambda \rangle = -\lambda \frac{2e}{\hbar} \frac{1}{d} \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \quad (79)$$

$$= -\lambda \frac{2e}{\hbar} \frac{\partial d}{\partial k_i}. \quad (80)$$

Como se mencionó en el capítulo anterior, del tensor de conductividad correspondiente a la suma de frecuencias puede obtenerse la respuesta de segundo armónico. Esto se logra considerando ω_1 y ω_2 , ambas de frecuencia igual a ω , de manera que la conductividad de segundo armónico (45) adquiere la forma

$$\begin{aligned} \sigma_{ijk}^{(2\omega)}(\omega) = & \frac{2e^3}{\hbar^3 \tilde{\omega}^2} \sum_P \sum_{\lambda \mathbf{k}} (f_\lambda - f_{-\lambda}) \frac{1}{d^3} \left\{ \lambda \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \frac{1}{2\hbar\tilde{\omega}(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right. \\ & \left. - \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \left[\lambda \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) + id \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \cdot \mathbf{d} \right] \frac{1}{(2\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right\}. \end{aligned} \quad (81)$$

Al igual que las expresiones lineales (72) y (73), la fórmula para el segundo armónico (81) mantiene el grado de generalidad deseado y se utilizará para particularizar a nuestros sistemas en específico sin agotar, por supuesto, su aplicabilidad en una amplia variedad de modelos.

3.3. Conductividad de espín

En esta sección se procede a obtener los tensores de conductividad que describen corrientes de espín que dependen tanto lineal como cuadráticamente del campo eléctrico.

3.3.1. Conductividad de espín de primer orden

De forma análoga a como se hizo con la conductividad de carga, se obtienen expresiones de la conductividad de espín de orden lineal para un sistema electrónico de dos niveles descrito por el Hamiltoniano (52); se parte de escribir la expresión (48) como

$$\sigma_{ij}^\ell(\omega) = \frac{i}{\tilde{\omega}} \sum_{\lambda} (f_\lambda - f_{-\lambda}) \frac{\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_j | \lambda \rangle}{\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d}, \quad (82)$$

donde j_j es el operador de corriente (26), \mathcal{J}_i^ℓ es el operador de corriente de espín definido como en (47) y los elementos de matriz $\langle \lambda | j_j | \lambda \rangle$ y $\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle$ están dados por (66) y

$$\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle = \frac{1}{2} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \langle \lambda | \sigma_\ell | -\lambda \rangle, \quad (83)$$

respectivamente, de modo que

$$\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_j | \lambda \rangle = -\frac{e}{2\hbar} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{\partial d_p}{\partial k_j} \langle \lambda | \sigma_\ell | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \sigma_p | \lambda \rangle \quad (84)$$

$$= -\frac{e}{2\hbar} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{1}{d^2} \left\{ \left[\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \times \mathbf{d} \right]_\ell - i\lambda d \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right)_\ell \right\}. \quad (85)$$

Al tensor de conductividad de espín (82) se le puede dar entonces la forma

$$\sigma_{ij}^\ell(\omega) = \frac{e}{\hbar\omega} \sum_{\lambda\mathbf{k}} \lambda f_\lambda \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{1}{d} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d)^2} \left\{ 2i \left[\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \times \mathbf{d} \right]_\ell - \hbar\omega \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right)_\ell \right\}, \quad (86)$$

la cual está en función del campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ y la energía $\varepsilon_0(\mathbf{k})$, funciones características de un sistema de dos niveles.

3.3.2. Segundo armónico de la conductividad de espín

Para obtener la respuesta del segundo armónico primero se toma el tensor de conductividad correspondiente a la suma de frecuencias (49) y se expresa, utilizando la respectiva notación, para el modelo de dos niveles, de modo que

$$\begin{aligned} \sigma_{ijk}^{\ell,SF}(\omega_1, \omega_2) = & \frac{-1}{\tilde{\omega}_1 \tilde{\omega}_2} \sum_P \sum_{\lambda\mathbf{k}} f_\lambda \left\{ \left(\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | \lambda \rangle - \langle -\lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle \right) \frac{\langle \lambda | j_j | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_k | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_1 - \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 + \lambda 2d)} \right. \\ & \left. - \left(\langle \lambda | j_j | \lambda \rangle - \langle -\lambda | j_j | -\lambda \rangle \right) \left[\frac{\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle \langle -\lambda | j_k | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_3 + \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 + \lambda 2d)} + \frac{\langle \lambda | j_k | -\lambda \rangle \langle -\lambda | \mathcal{J}_i^\ell | \lambda \rangle}{(\hbar\tilde{\omega}_3 - \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega}_2 - \lambda 2d)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (87)$$

Al igual que como se hizo para obtener el tensor de segundo armónico a partir del de suma de frecuencias en la sección de la conductividad de carga, se considera $\omega_1 = \omega_2 = \omega$; tomando en cuenta, además, los resultados (70), (79), (85) y

$$\langle \lambda | \mathcal{J}_i^\ell | \lambda \rangle - \langle -\lambda | \mathcal{J}_i^\ell | -\lambda \rangle = \lambda \frac{d_\ell}{d} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i}, \quad (88)$$

es posible escribir la respuesta de segundo armónico del tensor de conductividad de espín como

$$\sigma_{ijk}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \frac{e^2}{(\hbar\tilde{\omega})^2} \sum_P \sum_{\lambda\mathbf{k}} \lambda(f_{-\lambda} - f_{\lambda}) \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{1}{d^3} \left\{ d_{\ell} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \frac{1}{2\hbar\tilde{\omega}(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right. \quad (89)$$

$$\left. - \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \left[\left[\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \times \mathbf{d} \right]_{\ell} - i\lambda d \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right)_{\ell} \right] \frac{1}{(2\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right\}.$$

Las expresiones (86) y (89), al igual que las correspondientes a los tensores lineal y de segundo armónico de la conductividad de carga, son generales en el sentido de que son aplicables a cualquier sistema que pueda ser descrito por un Hamiltoniano de la forma (52). En los próximos capítulos estas fórmulas se aplicarán a los modelos que son de nuestro particular interés.

Capítulo 4. GE2D con IEO Rashba y Dresselhaus[hkl]

El primer sistema a estudiar es un GE2D con orientación cristalográfica arbitraria en presencia de las contribuciones espín-órbita lineales en el momento de Rashba y de Dresselhaus. Para considerar tal arbitrariedad será conveniente definir un vector unitario $\hat{\mathbf{n}}$ perpendicular al plano del gas y, por lo tanto, paralelo a la dirección de crecimiento denotada por los índices de Miller $[hkl]$. El campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ lo escribiremos de la forma

$$d_i(\mathbf{k}) = \mu_{i\nu} k_\nu, \quad (90)$$

donde la matriz $\mu_{i\nu}$ contiene la información de la orientación cristalina y de los parámetros espín-órbita; los índices latinos toman valores x, y, z mientras que los índices griegos, debido a la bidimensionalidad, se limitan a x, y . En las próximas dos secciones se muestra la forma que toman la matriz $\mu_{i\nu}$ y el Hamiltoniano correspondiente tanto al acoplamiento espín-órbita tipo Rashba como al tipo Dresselhaus cuando se trabaja con un gas electrónico crecido a lo largo de una dirección arbitraria $\hat{\mathbf{n}}$.

4.1. Interacción espín-órbita tipo Rashba

Debido a la naturaleza 2D del gas, es conveniente que el sistema de referencia consista en dos ejes paralelos al plano y uno perpendicular a este. Cuando el plano del gas está orientado en dirección $[001]$, los ejes de referencia están alineados con los ejes principales del cristal, es decir, $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$ y $z \parallel [001]$, sin embargo, una dirección de crecimiento distinta a la $[001]$ requiere de la transformación de $z \parallel [001]$ a $z' \parallel [hkl]$, es decir, $z' \parallel \hat{\mathbf{n}}$, de modo que $\mathbf{k}' \cdot \hat{\mathbf{n}} = 0$. En el caso de la IEO tipo Rashba, esta rotación del sistema de referencia no implica un cambio en la forma del campo espín-órbita dado que es un fenómeno de superficie y su origen está en la asimetría del potencial que confina los electrones al plano (Bychkov y Rashba, 1984; Winkler, 2003). De manera que el Hamiltoniano de Rashba es formalmente el mismo sin importar la orientación del GE2D con respecto a los ejes cristalinos, y está dado por (Žutić et al., 2004)

$$\begin{aligned} H_R(\mathbf{k}') &= \mathbf{d}^R(\mathbf{k}') \cdot \boldsymbol{\sigma}' \\ &= \alpha (\mathbf{k}' \times \hat{\mathbf{n}}) \cdot \boldsymbol{\sigma}' \\ &= \alpha (k'_y \sigma'_x - k'_x \sigma'_y), \end{aligned} \quad (91)$$

donde α es el parámetro espín-órbita de Rashba, mientras que la prima en \mathbf{k}' indica que las componentes del vector de onda son con respecto a los nuevos ejes $x'y'z'$, lo mismo que la prima en $\boldsymbol{\sigma}'$. La expresión (91) revela que el campo espín-órbita $\mathbf{d}^R(\mathbf{k}')$ es paralelo al plano definido por $\hat{\mathbf{n}}$ y normal a \mathbf{k}' . Si $\mathbf{d}^R(\mathbf{k}')$ se escribe en la forma (90), la matriz $\mu_{i\nu}$ está dada por

$$\mu_{i\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \alpha & 0 \\ -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (92)$$

Por otra parte, como se mostró en la ecuación (55), la orientación del espín es paralela al campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ en un sistema de dos niveles; en el caso de la IEO tipo Rashba, esta dirección es

$$\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle_R = \lambda (\hat{\mathbf{k}}' \times \hat{\mathbf{n}}). \quad (93)$$

La figura 4 ilustra la dirección del vector $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ utilizando la orientación del espín en ambas bandas en función de los valores de \mathbf{k} .

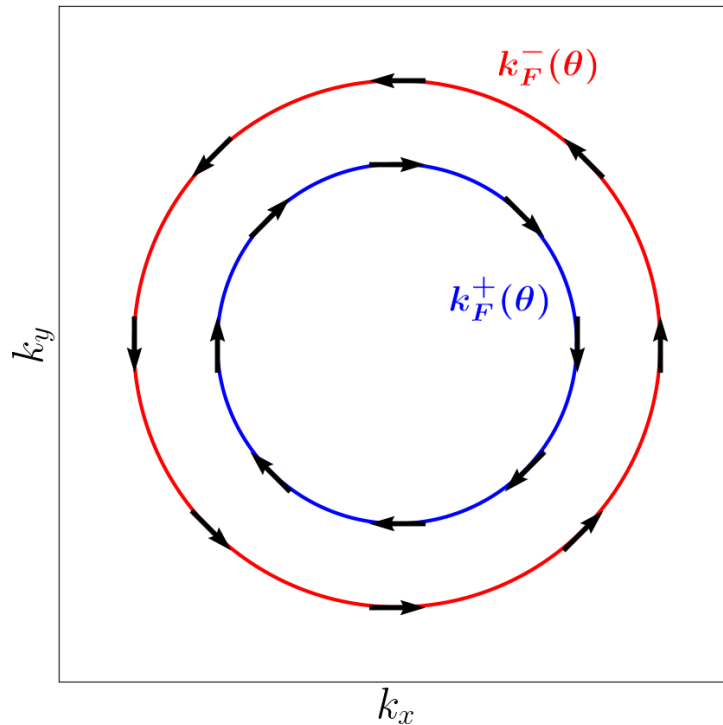


Figura 4. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y dirección de crecimiento arbitraria. Se han omitido las tildes en el vector de onda por simplicidad.

4.2. Interacción espín-órbita tipo Dresselhaus

A diferencia de lo que sucede con Rashba, el Hamiltoniano de la IEO tipo Dresselhaus lineal en el momento no presenta una forma universal, independiente de la dirección de crecimiento del gas. Como ya se mencionó, Dresselhaus surge de una asimetría de inversión en el bulto de los materiales en que se forman los pozos de potencial, y es a partir de una expresión para estructuras tridimensionales que se obtiene la correspondiente a los sistemas bidimensionales. Se parte del Hamiltoniano espín-órbita cúbico en el vector de onda \mathbf{k}

$$H_D^{3D}(\mathbf{k}) = \gamma \left[\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2) \right], \quad (94)$$

donde γ es el parámetro de Dresselhaus cúbico, una constante característica del material, y donde los ejes de referencia son los cristalográficos, esto es, $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$ y $z \parallel [001]$. Será útil definir el vector de onda también como $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp}$, con una parte paralela (\mathbf{k}_{\parallel}) y otra perpendicular (\mathbf{k}_{\perp}) al pozo de potencial. Esto debido a que cuando existe un fuerte confinamiento es posible reemplazar $k_{\perp} = |\mathbf{k}_{\perp}|$ y k_{\perp}^2 por el valor de expectación de los correspondientes operadores cuánticos; es decir, si $\hat{\mathbf{n}}$ es el vector unitario normal al GE2D, $k_{\perp} = \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{n}} \rightarrow k_n \equiv \langle -i\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}} \rangle = 0$ y $k_{\perp}^2 \rightarrow k_n^2 \equiv \langle -(\nabla \cdot \hat{\mathbf{n}})^2 \rangle \neq 0$ (Chen et al., 2021).

El proceso de *bidimensionalización* del Hamiltoniano (94) para el caso en que el sistema es crecido a lo largo de la dirección [001] es bastante sencillo dado que el vector $\hat{\mathbf{n}}$ coincide con $\hat{\mathbf{z}}$, por lo que $k_{\perp} = k_z \rightarrow k_n = 0$ y $k_z^2 \rightarrow k_n^2 = \langle -\partial^2/\partial z^2 \rangle$. Sin embargo, al tomar en cuenta cualquier orientación cristalográfica, es necesario realizar el promedio cuántico a lo largo de $\hat{\mathbf{n}} \parallel [hkl]$, el cual puede obtenerse mediante la fórmula (Žutić et al., 2004)

$$\langle k_i k_j k_k \rangle = k_n^2 (k_i n_j n_k + k_j n_k n_i + k_k n_i n_j) + k_i k_j k_k, \quad (95)$$

de modo que el campo espín-órbita de Dresselhaus 2D, utilizando la notación de índices repetidos, está dado por

$$d_i^{D1+D3}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \gamma \varepsilon_{ipq} \lambda_{qrs} \langle k_p k_r k_s \rangle \quad (96)$$

$$= \frac{1}{2} \gamma \varepsilon_{ipq} \lambda_{qrs} \left[k_n^2 (k_p n_r n_s + k_r n_s n_p + k_s n_p n_r) + k_p k_r k_s \right], \quad (97)$$

donde ε_{ijk} es el tensor de Levi-Civita y $\lambda_{ijk} = |\varepsilon_{ijk}|$. Por otra parte, si además se considera que para

pozos de potencial angostos $k_n^2 \gg k_{\parallel}^2 = |\mathbf{k}_{\parallel}|^2$, el término cúbico en (97) puede eliminarse y el campo adquiere la forma lineal en \mathbf{k}

$$d_i^{D1}(\mathbf{k}) = \mu_{ir} k_r, \quad (98)$$

donde

$$\mu_{ir} = \gamma k_n^2 \left(\varepsilon_{ips} \lambda_{rqs} + \frac{1}{2} \varepsilon_{irs} \lambda_{pqs} \right) n_p n_q. \quad (99)$$

Estas expresiones ya contienen la información de una dirección de crecimiento arbitraria, sin embargo, siguen estando referidas a los ejes cristalinos, es decir a los ejes definidos por $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$ y $z \parallel [001]$. Como se mencionó en la sección anterior, es necesario realizar una transformación de los ejes de referencia $xyz \rightarrow x'y'z'$ de manera que $z' \parallel \hat{\mathbf{n}}$.

Esta transformación se lleva a cabo mediante una matriz ortogonal de rotación M tal que $\mathbf{v}' = M\mathbf{v}$, la cual puede ser expresada utilizando los ángulos de Euler, tres ángulos correspondientes a tres rotaciones sucesivas¹: una rotación inicial de los ejes xyz de ángulo ϕ alrededor del eje z con lo que se obtiene un nuevo sistema de ejes $\xi\eta\zeta$; la segunda rotación, esta vez de los ejes $\xi\eta\zeta$, es alrededor del eje ξ un ángulo θ que resulta en los ejes $\xi'\eta'\zeta'$; para finalizar, se rota el nuevo sistema de ejes un ángulo ψ alrededor del eje ζ' y se obtiene el sistema referencial que se busca $x'y'z'$ (Goldstein et al., 1980).

La transformación inversa del sistema de referencia, $x'y'z' \rightarrow xyz$, está dada por $\mathbf{v} = M^T \mathbf{v}'$, donde M^T es la matriz traspuesta de M . Esta representación de la matriz mediante ϕ , θ y ψ , sin embargo, no es conveniente en nuestro caso, pues las direcciones de crecimiento del GE2D no se dan mediante ángulos, sino índices de Miller. Por esta razón resulta más natural expresar la matriz en función de las componentes de los vectores ortonormales $\hat{\mathbf{l}} = l_x \hat{\mathbf{x}} + l_y \hat{\mathbf{y}} + l_z \hat{\mathbf{z}}$, $\hat{\mathbf{m}} = m_x \hat{\mathbf{x}} + m_y \hat{\mathbf{y}} + m_z \hat{\mathbf{z}}$ y $\hat{\mathbf{n}} = n_x \hat{\mathbf{x}} + n_y \hat{\mathbf{y}} + n_z \hat{\mathbf{z}}$, los cuales tienen la dirección de los nuevos ejes, x' , y' y z' , respectivamente, y cumplen con $\hat{\mathbf{l}} \times \hat{\mathbf{m}} = \hat{\mathbf{n}}$. Esta nueva expresión se logra mediante las condiciones

$$M \begin{pmatrix} l_x \\ l_y \\ l_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M \begin{pmatrix} m_x \\ m_y \\ m_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad M \begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (100)$$

¹La matriz M es el resultado del producto de tres matrices de rotación sucesivas:

$$M = \begin{pmatrix} \cos \psi & \sin \psi & 0 \\ -\sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \\ 0 & -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi & 0 \\ -\sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

y resulta en la matriz de rotación²

$$M = \begin{pmatrix} l_x & l_y & l_z \\ m_x & m_y & m_z \\ n_x & n_y & n_z \end{pmatrix} \quad (101)$$

o, equivalentemente,

$$M_{ij} = \delta_{ix}l_j + \delta_{iy}m_j + \delta_{iz}n_j. \quad (102)$$

Notar que cuando $n_x = n_y = 0$, M debe reducirse a la matriz identidad, pues sería el caso de una dirección de crecimiento [001]. Una vez obtenida esta matriz, su traspuesta, M^T , se utiliza para transformar tanto el vector de onda como el vector de las matrices de Pauli y expresar el Hamiltoniano espín-órbita de Dresselhaus lineal en \mathbf{k} con respecto a los nuevos ejes, esto es $\mathbf{k} = M^T \mathbf{k}'$, $\boldsymbol{\sigma} = M^T \boldsymbol{\sigma}'$ y

$$\begin{aligned} H_D(\mathbf{k}) &= \sigma_i \mu_{ij} k_j \\ &= (M_{pi} \sigma'_p) \mu_{ij} (M_{vj} k'_j) \\ &= \sigma'_p (M_{pi} \mu_{ij} M_{vj}) k'_j \\ &= \sigma'_p \mu'_{pv} k'_v \end{aligned} \quad (103)$$

donde μ_{ij} está dada por (99) y

$$\mu'_{iv} = M_{pi} \mu_{ij} M_{vj}. \quad (104)$$

Se puede observar que la forma del Hamiltoniano se mantiene ($\sigma_i \mu_{ij} k_j$) y lo único que hace falta es sustituir μ_{ij} por μ'_{iv} . Explícitamente, la matriz μ'_{iv} está dada por

$$\mu'_{iv} = \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_p D_{pq} l_q & \gamma k_n^2 l_p D_{pq} m_q & 0 \\ \gamma k_n^2 m_p D_{pq} l_q & \gamma k_n^2 m_p D_{pq} m_q & 0 \\ \gamma k_n^2 n_p D_{pq} l_q & \gamma k_n^2 n_p D_{pq} m_q & 0 \end{pmatrix}, \quad (105)$$

donde

$$D_{ij} = \left(\varepsilon_{ipl} \lambda_{jql} + \frac{1}{2} \varepsilon_{ijl} \lambda_{pql} \right) n_p n_q \quad (106)$$

y, además, se ha omitido la columna correspondiente a μ'_{iz} debido a que $k'_z = 0$.

²La relación entre los ángulos de Euler y las componentes vectoriales de $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$ está dada por

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

donde $n_{\parallel} = \sqrt{n_x^2 + n_y^2} = \sqrt{1 - n_z^2}$.

La expresión (103) del Hamiltoniano de Dresselhaus es la deseada, y a partir de ella pueden obtenerse las correspondientes a sistemas crecidos a lo largo de una dirección particular; por ejemplo, los Hamiltonianos para GE2Ds con orientaciones de alta simetría:

- Dresselhaus[001]

$$H_{[001]}(\mathbf{k}) = \beta_{[001]} (k_y \sigma_y - k_x \sigma_x), \quad (107)$$

- Dresselhaus[110]

$$H_{[110]}(\mathbf{k}) = \beta_{[110]} k_x \sigma_z, \quad (108)$$

- Dresselhaus[111]

$$H_{[111]}(\mathbf{k}) = \beta_{[111]} (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) \quad (109)$$

donde $\beta_{[001]} = \gamma k_n^2$, $\beta_{[110]} = \gamma k_n^2/2$ y $\beta_{[111]} = 2\gamma k_n^2/\sqrt{3}$ son los parámetros espín-órbita de Dresselhaus lineal comúnmente encontrados en la literatura. Como se mencionó antes, el Hamiltoniano de Dresselhaus lineal en \mathbf{k} para la dirección de crecimiento [111] es formalmente idéntico al de la contribución de Rashba. No está de más recordar que en estos Hamiltonianos, aunque se han omitido las primas en \mathbf{k}' y σ' , los vectores $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$ y $\hat{\mathbf{z}}$ son paralelos a $\hat{\mathbf{l}}$, $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{n}}$, respectivamente, y, por lo tanto, diferentes para cada caso. Las matrices $\mu_{i\nu}$ correspondientes a cada Hamiltoniano son

$$\mu_{i\nu} = \begin{pmatrix} -\beta_{[001]} & 0 & 0 \\ 0 & \beta_{[001]} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_{i\nu} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ \beta_{[110]} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mu_{i\nu} = \begin{pmatrix} 0 & \beta_{[111]} & 0 \\ -\beta_{[111]} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (110)$$

Por otro lado, la orientación del espín para los diferentes sistemas está dada por

$$\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle_{D[001]} = \lambda (\sin \theta \hat{\mathbf{y}} - \cos \theta \hat{\mathbf{x}}), \quad (111)$$

$$\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle_{D[110]} = \lambda \operatorname{sgn}(k_x) \hat{\mathbf{z}}, \quad (112)$$

$$\langle \lambda | \boldsymbol{\sigma} | \lambda \rangle_{D[111]} = \lambda (\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{z}}), \quad (113)$$

donde puede apreciarse la variedad de situaciones posibles gracias a considerar diferentes direcciones de crecimiento; orientaciones de espín en el plano diferentes a las de la contribución Rashba en el sistema [001] (ver Figura 5), orientaciones estrictamente fuera del plano en [110], o incluso, orientaciones de

espín paralelas a las de Rashba debido al Hamiltoniano formalmente idéntico del caso [111].

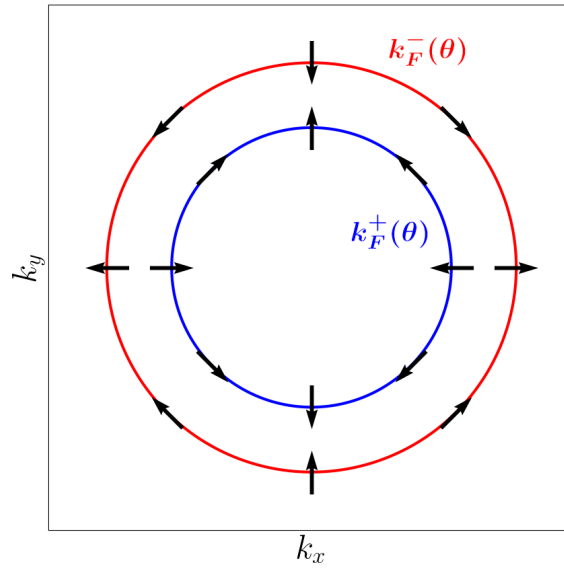


Figura 5. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Dresselhaus y dirección de crecimiento [001].

4.3. Hamiltoniano de GE2D con IEO Rashba y Dresselhaus[hkl]

Ahora que se han obtenido las expresiones correspondientes al acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus para una dirección de crecimiento arbitraria, lo único que hace falta es sumar dichas contribuciones e incluir la parte cinética, de modo que el Hamiltoniano total está dado por

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mathbb{I} + \sigma_i \mu_{i\nu} k_\nu, \quad (114)$$

donde $\mu_{i\nu}$ es la suma de (92) y (105), esto es

$$\mu_{i\nu} = \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_p D_{pq} l_q & \alpha + \gamma k_n^2 l_p D_{pq} m_q & 0 \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_p D_{pq} l_q & \gamma k_n^2 m_p D_{pq} m_q & 0 \\ \gamma k_n^2 n_p D_{pq} l_q & \gamma k_n^2 n_p D_{pq} m_q & 0 \end{pmatrix}. \quad (115)$$

A diferencia de los casos individuales, ya sea Rashba o Dresselhaus, donde la diferencia de los niveles $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = 2d(\mathbf{k})$ es una propiedad isotrópica, la combinación de ambas contribuciones ocasiona una anisotropía en el desdoblamiento de las bandas energéticas. Esta anisotropía se ve reflejada en la

magnitud del campo espín-órbita

$$\begin{aligned} d(\mathbf{k}) &= \sqrt{\mu_{i\nu}\mu_{i\rho}k_\nu k_\rho} \\ &= kg_{[hkl]}(\theta) \end{aligned} \quad (116)$$

a través de la función angular $g_{[hkl]}(\theta)$ que puede escribirse como

$$g_{[hkl]}(\theta) = |\boldsymbol{\mu}_x \cos \theta + \boldsymbol{\mu}_y \sin \theta|, \quad (117)$$

donde se ha realizado la transformación a coordenadas polares, $\mathbf{k} = k_x \hat{\mathbf{x}} + k_y \hat{\mathbf{y}} = k(\cos \theta \hat{\mathbf{x}} + \sin \theta \hat{\mathbf{y}})$, y donde $\boldsymbol{\mu}_x$ y $\boldsymbol{\mu}_y$ son los vectores definidos por las columnas de la matriz (115), explícitamente,

$$\boldsymbol{\mu}_x = \begin{pmatrix} \mu_{xx} \\ \mu_{yx} \\ \mu_{zx} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \gamma k_n^2 l_p D_{pq} l_q \\ -\alpha + \gamma k_n^2 m_p D_{pq} l_q \\ \gamma k_n^2 n_p D_{pq} l_q \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}_y = \begin{pmatrix} \mu_{xy} \\ \mu_{yy} \\ \mu_{zy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \gamma k_n^2 l_p D_{pq} m_q \\ \gamma k_n^2 m_p D_{pq} m_q \\ \gamma k_n^2 n_p D_{pq} m_q \end{pmatrix}. \quad (118)$$

Visualmente, el carácter anisotrópico puede observarse en los contornos de Fermi, definidos en (57) y dados por

$$k_F^\lambda(\theta) = \sqrt{2m\varepsilon_F/\hbar^2 + k_{so}^2(\theta)} - \lambda k_{so}(\theta) \quad (119)$$

$$= \frac{1}{g_{[hkl]}(\theta)} \left[\sqrt{\varepsilon_{so}^2(\theta) + 2\varepsilon_F \varepsilon_{so}(\theta)} - \lambda \varepsilon_{so}(\theta) \right], \quad (120)$$

donde $\varepsilon_{so}(\theta) = k_{so}(\theta)g_{[hkl]}(\theta) = mg_{[hkl]}^2(\theta)/\hbar^2$ es una energía característica de la interacción espín-órbita. En la Figura 6 se muestran estas curvas junto con la distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda\rangle$ para el sistema [001]. La Figura 6(a) muestra el caso cuando $\gamma k_n^2 = 2\alpha$, mientras que 6(b) cuando $\gamma k_n^2 = \alpha$. El segundo caso es el de mayor interés ya que cumple con la conocida condición $|\alpha| = |\beta_{[001]}|$ bajo la cual el Hamiltoniano adquiere la simetría SU(2) y se presenta un campo espín-órbita colineal en el espacio de momentos.

Estas características, como ya se mencionó, se traducen al espacio real como una textura de espín helicoidal conocida como *persistent spin helix*, donde el espín, puesto que se vuelve independiente de la velocidad, está en función únicamente de la posición del electrón.

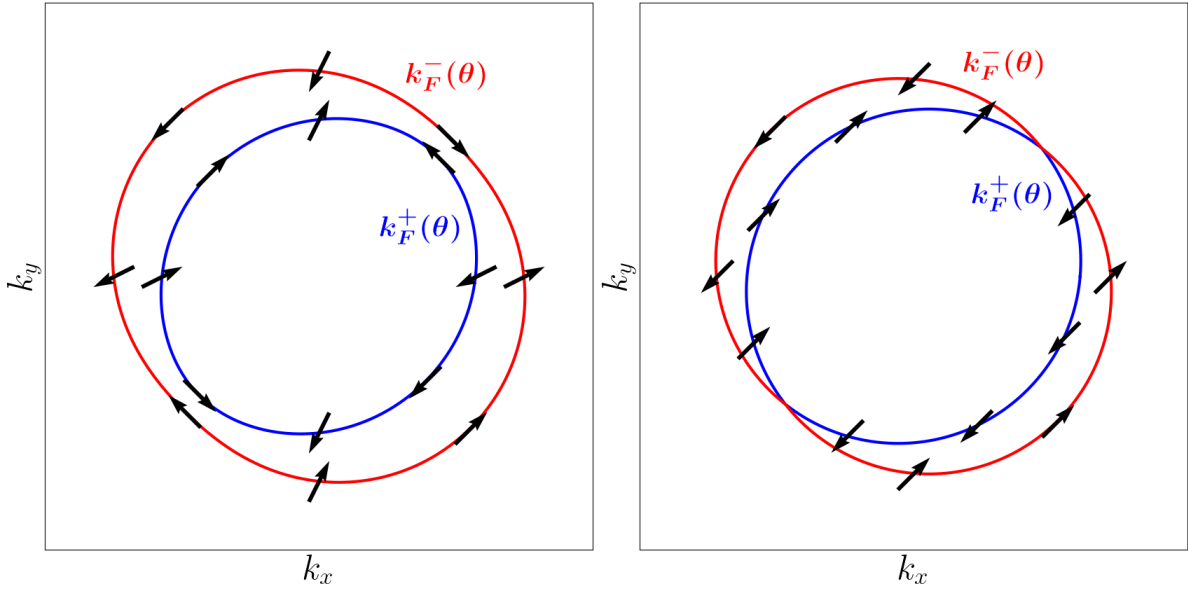


Figura 6. Contornos de Fermi y distribución de la orientación de espín en el estado $|\lambda\rangle$ para el caso de un GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y Dresselhaus[001]. La relación entre los parámetros espín-órbita es (a) $\gamma k_n^2 = 2\alpha$ y (b) $\gamma k_n^2 = \alpha$.

Por otro lado, la energía de Fermi puede escribirse, en función de la densidad electrónica n , la masa m y los vectores μ_i , que a su vez dependen de la orientación cristalina y los parámetros espín-órbita, como

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m} (k_0^2 - 2\kappa_{so}^2), \quad (121)$$

donde $k_0 = \sqrt{2\pi n}$ es el número de onda de Fermi de un GE2D con degeneración de espín, es decir, sin acoplamiento espín-órbita y³

$$\kappa_{so}^2 = \left(\frac{m}{\hbar^2}\right)^2 \frac{|\mu_x|^2 + |\mu_y|^2}{2}. \quad (122)$$

Para hacer una comparación entre la energía de Fermi y las contribuciones espín-órbita se suele utilizar el valor de la diferencia energética entre los niveles $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ como función de $k_F = \sqrt{k_0^2 - 2\kappa_{so}^2}$, es decir, $2d(k_F) = 2k_F g(\theta)$. Consideremos, por ejemplo, un GE2D crecido en InAs o InGaAs que presenta únicamente interacción tipo Rashba, lo cual significa, la función angular $g(\theta) = \alpha$. En estos pozos de potencial la densidad electrónica va de $n = 5 \times 10^{11}$ a 10^{12}cm^{-2} . Si además se toman los valores experimentales de α correspondientes, $\alpha = 0.6$ a $4 \times 10^{-11} \text{eVm}$, se obtienen energías de desdoblamiento en un rango de $2d(k_F) = 1$ a 5meV , mientras que el nivel de Fermi es del orden de $\varepsilon_F = 20$ a 50meV (Sinitsyn et al., 2004). Otra comparación valiosa es la de las contribuciones espín-órbita tipo Rashba y

³ $\kappa_{so}^2 = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} k_{so}^2(\theta) d\theta$.

tipo Dresselhaus a través de la relación entre sus respectivos parámetros. Para el caso de un pozo de potencial de GaAs con orientación cristalográfica [001] se tiene el valor experimental de $\alpha/\beta_{[001]} = 0.1$, o sea una contribución mayor por parte de la interacción tipo Dresselhaus (Schliemann et al., 2006). Sin embargo, en InAs y en InGaAs, donde $\alpha/\beta_{[001]} = 2.15$ y $\alpha/\beta_{[001]} = 1.5 - 1.85$, respectivamente, el acoplamiento de Rashba es el dominante (Ganichev et al., 2006).

4.4. Densidad conjunta de estados

Antes de proceder al cálculo de las funciones respuesta, resulta conveniente analizar primero la densidad conjunta de estados (JDOS, por sus siglas en inglés) para explorar los efectos de la IEO en el espectro de transiciones interbanda permitidas, en particular, las singularidades de Van Hove que han de presentarse en las funciones respuesta. Como se mencionó en la sección 3.1, a temperatura $T = 0$, el espacio k disponible para transiciones verticales energéticas está determinado por la condición $\varepsilon_-(\mathbf{k}) \leq \varepsilon_F \leq \varepsilon_+(\mathbf{k})$ y por la conservación de la energía $\varepsilon_+(\mathbf{k}) - \varepsilon_-(\mathbf{k}) = \hbar\omega$ para una energía de Fermi ε_F y frecuencia ω dadas. Esto quiere decir que solo aquellos puntos (k_x, k_y) que forman la curva de resonancia (59) y que satisfacen $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ contribuirán a $J_{+-}(\omega)$. Para un GE2D crecido en una dirección arbitraria, la densidad conjunta de estados toma la forma

$$J_{+-}(\omega) = \frac{\hbar\omega}{16\pi^2} \int d\theta \frac{\Theta[1 - |\xi(\omega, \theta)|]}{g_{[hkl]}^2(\theta)}, \quad (123)$$

donde Θ es la función escalón y

$$\xi(\omega, \theta) = \frac{\omega - \frac{1}{2}[\omega_-(\theta) + \omega_+(\theta)]}{\frac{1}{2}[\omega_-(\theta) - \omega_+(\theta)]}. \quad (124)$$

Esta expresión implica que las transiciones verticales son posibles únicamente en la ventana energética $\hbar\omega_+(\theta) \leq \hbar\omega \leq \hbar\omega_-(\theta)$, donde

$$\hbar\omega_\lambda(\theta) = 2d(k_F^\lambda(\theta)) \quad (125)$$

$$= 2k_F^\lambda(\theta)g_{[hkl]}(\theta) \quad (126)$$

son las energías mínima ($\lambda = +$) y máxima ($\lambda = -$) requeridas para inducir dichas transiciones entre los estados correspondientes a la dirección θ en el espacio k . De manera que los extremos de la ventana de

absorción están dados por las energías $\hbar\omega = \min_{\theta}[\hbar\omega_+(\theta)]$ y $\hbar\omega = \max_{\theta}[\hbar\omega_-(\theta)]$. Estas cantidades son la mínima y máxima separación energética entre $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ que cae dentro de la zona que contribuye a la densidad conjunta de estados (sombreada en la Figura 7), y se manifiestan a lo largo de $\theta_<$ y $\theta_>$, respectivamente, ángulos característicos de cada orientación cristalina.

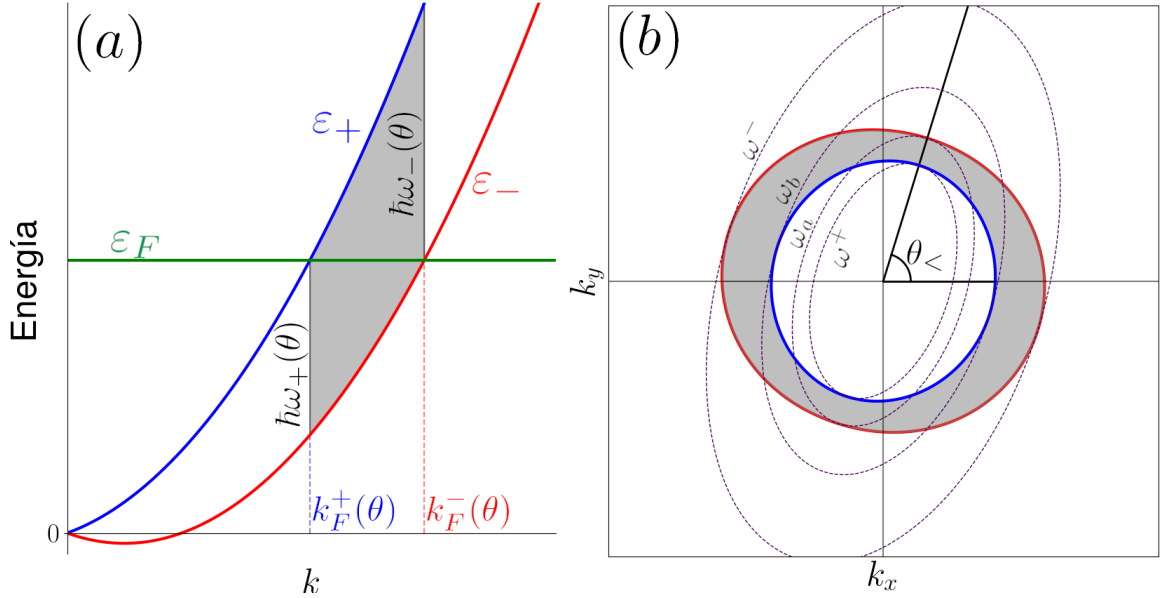


Figura 7. (a) Esquema de posibles transiciones verticales de energía a temperatura $T=0$; se dan para aquellos valores de k y ω que satisfacen $k_F^+(\theta) \leq k \leq k_F^-(\theta)$ y $\omega_+ \leq \omega \leq \omega_-$. (b) Contornos de Fermi y curvas de resonancia para las cuatro frecuencias características ω^+ , ω_a , ω_b y ω^- de un GE2D crecido en dirección $[123]$. La zona sombreada en ambas figuras indica los valores de k que pueden contribuir a las transiciones.

La forma del espectro puede ser analizada geoméricamente mediante la curva de resonancia $C_r(\omega)$, notando como, al ir incrementando la frecuencia, esta entra, interseca y sale de la región de transiciones permitidas $k_F^+ \leq k \leq k_F^-$ (Figura 7b). Recordando la definición (59), para un Hamiltoniano de la forma (114), esta curva de resonancia es descrita por la ecuación

$$|k_x \mu_x + k_y \mu_y| = \frac{\hbar\omega}{2}, \quad (127)$$

la cual, dado que $\mu_x \cdot \mu_y \leq |\mu_x| |\mu_y|$, representa una elipse rotada un ángulo ξ , que a su vez está determinado por

$$\tan(2\xi) = \frac{2\mu_x \cdot \mu_y}{|\mu_x|^2 - |\mu_y|^2}. \quad (128)$$

Al hacer la rotación correspondiente, $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{q}$, la ecuación adquiere la forma cartesiana estándar de la

elipse

$$\frac{q_x^2}{Q_x^2(\omega)} + \frac{q_y^2}{Q_y^2(\omega)} = 1, \quad (129)$$

con ejes principales

$$Q_x(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2g_{hkl}(\theta_<)} \quad \text{y} \quad Q_y(\omega) = \frac{\hbar\omega}{2g_{hkl}(\theta_>)}, \quad (130)$$

donde $\theta_<$ se elige de modo que coincida con la dirección en que se encuentra la mínima separación energética que posibilita transiciones verticales, esto es

$$\theta_< = \begin{cases} \xi & \text{si } g_{[hkl]}(\xi) < g_{[hkl]}(\xi + \pi/2) \\ \xi + \pi/2 & \text{si } g_{[hkl]}(\xi) > g_{[hkl]}(\xi + \pi/2) \end{cases}, \quad (131)$$

mientras que $\theta_> = \theta_< + \pi/2$.

Con estos ángulos es posible definir las energías críticas donde comienza y termina la ventana de absorción, así como donde ocurren las singularidades de Van Hove. Dichas energías están dadas por aquellos valores $\hbar\omega$ en los cuales la elipse de resonancia toca tangencialmente los contornos de Fermi k_F^λ a lo largo de la dirección de los ejes $Q_x(\omega)$ y $Q_y(\omega)$, es decir, a lo largo de las direcciones $\theta_<$ y $\theta_>$.

Por lo tanto, las frecuencias críticas se obtienen de las igualdades $Q_x(\omega^+) = k_F^+(\theta_<)$, $Q_x(\omega_a) = k_F^-(\theta_<)$, $Q_y(\omega_b) = k_F^+(\theta_>)$ y $Q_y(\omega^-) = k_F^-(\theta_>)$, así como sus correspondientes energías

$$\hbar\omega^+ = 2k_F^+g_{[hkl]}(\theta_<), \quad (132)$$

$$\hbar\omega_a = 2k_F^-g_{[hkl]}(\theta_<), \quad (133)$$

$$\hbar\omega_b = 2k_F^+g_{[hkl]}(\theta_>), \quad (134)$$

$$\hbar\omega^- = 2k_F^-g_{[hkl]}(\theta_>). \quad (135)$$

De estas expresiones se infiere que la energía $\hbar\omega^+$ siempre es la más pequeña, mientras que $\hbar\omega^-$ siempre es la más grande, por lo tanto, corresponden al principio y al fin de la ventana de absorción en el espectro de la densidad conjunta de estados, respectivamente. En cambio, los valores intermedios pueden intercambiar el orden, es decir, existe la posibilidad de que $\hbar\omega_a < \hbar\omega_b$ o de que $\hbar\omega_a > \hbar\omega_b$ dependiendo de los parámetros espín-órbita y la dirección de crecimiento cristalográfica.

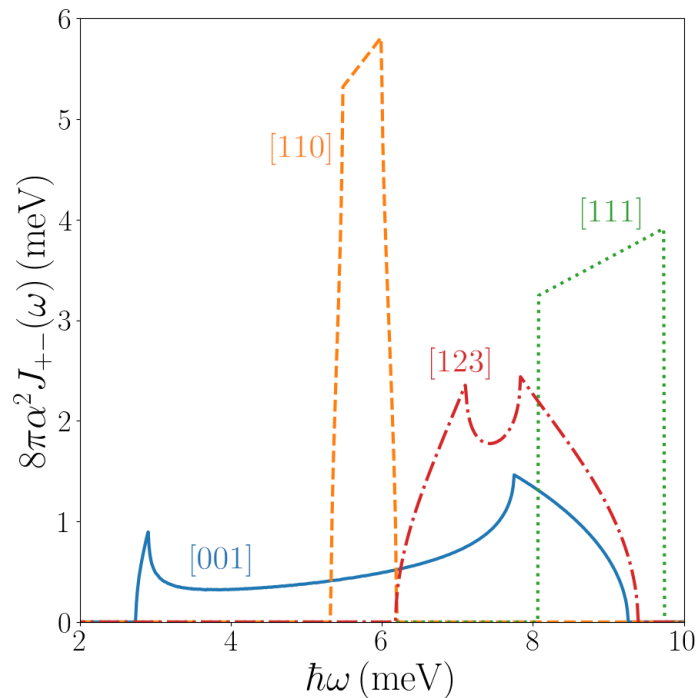


Figura 8. Espectro de la densidad conjunta de estados para varias orientaciones cristalográficas. Los parámetros utilizados son $\alpha = 160 \text{ meV \AA}$, $\gamma k_n^2 = 0.5\alpha$, $n = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ y $m = 0.05m_0$.

En la figura 8 se compara el espectro de la densidad conjunta de estados de cuatro diferentes orientaciones cristalinas, manteniendo los mismos parámetros espín-órbita. Esta revela fuertes cambios de la forma general, del tamaño de estos espectros y del corrimiento de la ventana de absorción dependiendo de la dirección de crecimiento de la muestra. En el caso [111], el Hamiltoniano es formalmente idéntico al de un sistema con, únicamente, IEO tipo Rashba, por lo que presenta un desdoblamiento isotrópico de los niveles energéticos. Por lo tanto, la curva de resonancia y los contornos de Fermi son círculos concéntricos y la densidad conjunta de estados presenta la conocida forma de caja con solamente dos energías críticas ($\hbar\omega^\pm$). Para las otras direcciones de crecimiento, sin embargo, el espacio k permitido para transiciones verticales ya no es isotrópico y dos formas diferentes de espectro son posibles dependiendo del valor relativo entre ω_a y ω_b . Cuando $\omega_a < \omega_b$ el espectro desarrolla un forma convexa entre estas dos energías, que es el caso de las orientaciones [001] y [123] en la figura 8. Por otro lado, cuando $\omega_b < \omega_a$, $J_{+-}(\omega)$ presenta, en cambio, una dependencia lineal entre ellas, como ilustra el caso [110]. Esto puede explicarse observando, para cada caso, como la curva de resonancia se superpone a la región de posibles transiciones delimitada por los contornos de Fermi. Cuando $\omega_a < \omega_b$, el semieje mayor $Q_x(\omega)$ de la curva $C_r(\theta)$ tocará el contorno $k_F^-(\theta)$ antes de que el semieje menor $Q_y(\omega)$ interseque $k_F^+(\theta)$, lo que significa que para $\omega_a < \omega < \omega_b$ hay una porción de la curva que no contribuye a $J_{+-}(\omega)$ y el espectro presenta una forma convexa. En contraste, cuando $\omega_a > \omega_b$ se tiene la situación contraria, el semieje

$Q_x(\omega)$ toca el contorno de Fermi $k_F^-(\theta)$ después de que $Q_y(\omega)$ hace contacto con el contorno de Fermi $k_F^+(\theta)$. Esto implica que existe un rango de frecuencias, $\omega_b < \omega < \omega_a$, en el cual las elipses $C_r(\omega)$ se encuentran completamente dentro de la zona de contribución, provocando un incremento lineal de la densidad conjunta de estados. En la Figura 9 se ejemplifican ambos casos mediante dos orientaciones cristalográficas distintas manteniendo los mismos valores de α y γk_n^2 . Se muestran las cuatro elipses correspondientes a las cuatro frecuencias críticas junto con los contornos de Fermi k_F^\pm , el espectro de la densidad conjunta de estados y la región angular disponible en el espacio de momentos para transiciones verticales.

4.5. Conductividad de carga a primer orden

En esta sección se calcula el tensor de conductividad que determina la corriente eléctrica inducida a primer orden como respuesta al campo eléctrico externo. En este sistema, la curvatura de Berry se anula, pues

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} &= \varepsilon_{ijz} \left[(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y) \cdot (\boldsymbol{\mu}_x k_x + \boldsymbol{\mu}_y k_y) \right] \\ &= 0, \end{aligned} \quad (136)$$

lo que refleja la simetría ante inversión temporal del sistema, por lo que, a temperatura $T = 0$,

$$\sigma_{ij}^{inter}(\omega) = i\pi\sigma_0 \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{1}{d^3} \frac{\hbar\tilde{\omega}}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - (2d)^2} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \quad (137)$$

$$\begin{aligned} &= i\sigma_0 \frac{\hbar\tilde{\omega}}{8\pi} |\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^3(\theta)} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - (2d)^2} \\ &\quad \times \left\{ [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] \delta_{ij} - \sin 2\theta (1 - \delta_{ij}) \right\}, \end{aligned} \quad (138)$$

donde se ha utilizado el resultado

$$\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) = |\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 k^2 \left[(\sin^2\theta \delta_{ix} + \cos^2\theta \delta_{iy}) \delta_{ij} - \sin\theta \cos\theta (1 - \delta_{ij}) \right]. \quad (139)$$

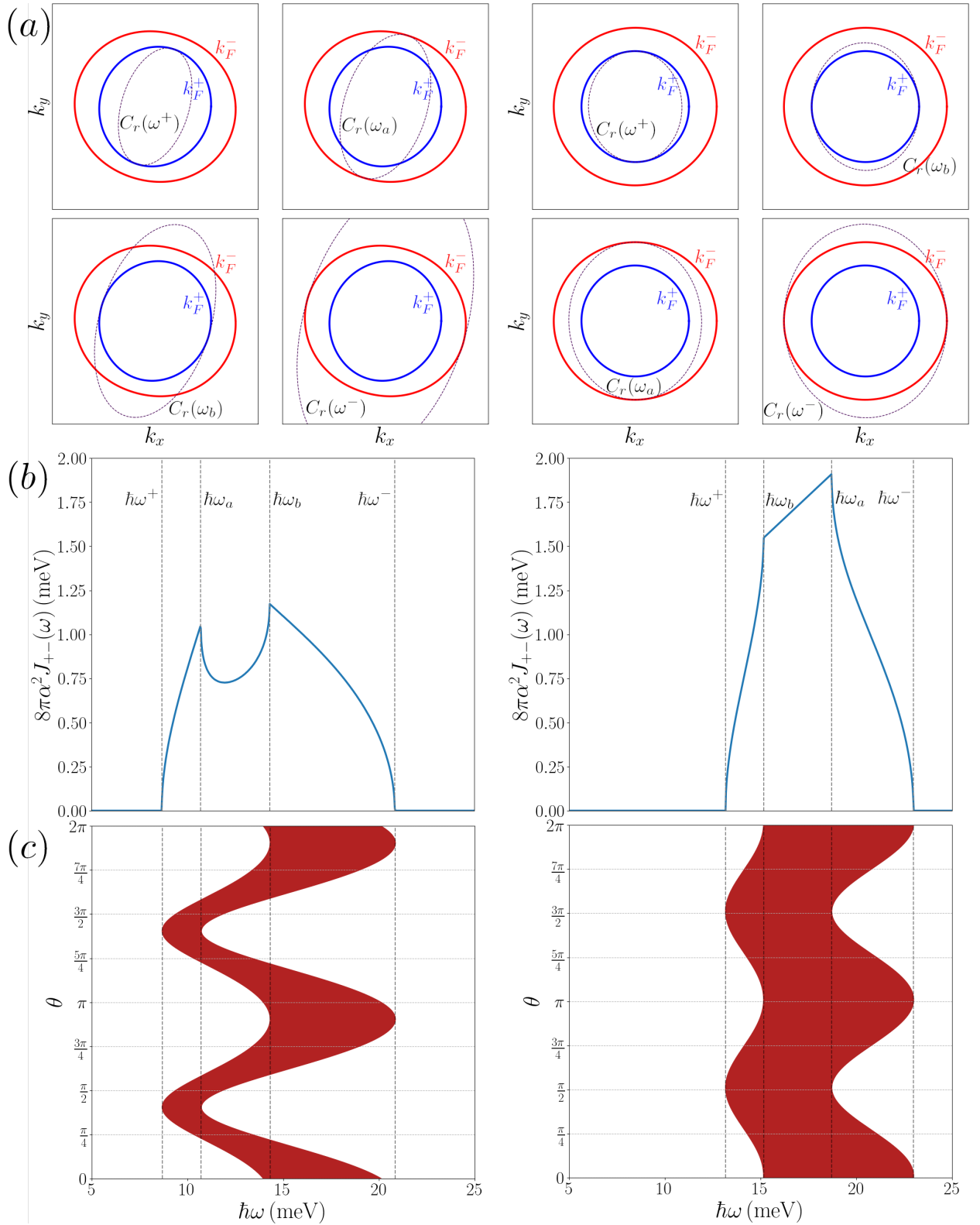


Figura 9. (a) Curvas de resonancia $C_r(\omega^+)$, $C_r(\omega_a)$, $C_r(\omega_b)$, $C_r(\omega^-)$ y contornos de Fermi $k_F^\pm(\theta)$ para las orientaciones cristalográficas [123] y [456]. (b) Se muestran también los correspondientes espectros de la densidad conjunta de estados $J_{+-}(\omega)$, (c) así como la región angular disponible en el espacio de momentos para transiciones verticales. Los parámetros espín-órbita considerados en ambos casos son $\alpha = 1.6 \times 10^{-9}$ eV cm y $\gamma k_n^2 = 2\alpha$, la densidad electrónica es $n = 5 \times 10^{11}$ cm $^{-2}$ y la masa efectiva $m = 0.05m_0$.

Al separar nuestra expresión en una parte real y una imaginaria y considerando únicamente procesos de absorción, la conductividad toma la forma

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{inter}(\omega) = i\sigma_0 \frac{\hbar\tilde{\omega}}{8\pi} |\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^3(\theta)} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \left\{ \mathcal{P} \left[\frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d)^2} \right] - \frac{i\pi}{2\hbar\omega} \delta(\hbar\omega - 2d) \right\} \\ \times \left\{ [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] \delta_{ij} - \sin 2\theta (1 - \delta_{ij}) \right\}, \end{aligned} \quad (140)$$

donde \mathcal{P} denota la integral del valor principal.⁴ Después de realizar la integral en k , se tiene que

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{inter}(\omega) &= \frac{\sigma_0}{32} |\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \Theta [1 - |\xi(\omega, \theta)|] \\ &\quad \times \left\{ [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] \delta_{ij} - \sin 2\theta (1 - \delta_{ij}) \right\}, \\ \text{Im } \sigma_{ij}^{inter}(\omega) &= \frac{\sigma_0}{32\pi} |\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \ln \left| \frac{[\omega + \omega_-(\theta)] [\omega - \omega_+(\theta)]}{[\omega - \omega_-(\theta)] [\omega + \omega_+(\theta)]} \right| \\ &\quad \times \left\{ [1 + (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \cos 2\theta] \delta_{ij} - \sin 2\theta (1 - \delta_{ij}) \right\}. \end{aligned}$$

Es importante destacar de estas expresiones el factor global

$$|\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2 = (\mu_{xx}\mu_{yy} - \mu_{xy}\mu_{yx})^2 + (\mu_{xx}\mu_{zy} - \mu_{zx}\mu_{xy})^2 + (\mu_{yx}\mu_{zy} - \mu_{yy}\mu_{zx})^2, \quad (141)$$

el cual depende tanto de los parámetros espín-órbita como de la orientación cristalográfica del gas, de acuerdo a (118). Su anulación implica la ausencia de corriente interbanda, lo cual recuerda a la condición $|\alpha| = |\beta_{[001]}|$ bajo la que esta misma cantidad se anula en gases crecidos a lo largo de la dirección [001] (Zhou Li, 2013). A continuación, mostramos que, efectivamente, las condiciones bajo las cuales se anula el factor $|\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|^2$ son una generalización de tal resultado.

La desaparición de la corriente está sujeta a la presencia de un campo espín-órbita colineal en el espacio de momentos, el cual es posible obtener mediante las condiciones de simetría SU(2) encontradas por Kammermeier et al. (2016): un sistema crecido a lo largo de una dirección cristalográfica que tenga al menos dos índices de Miller iguales en módulo y una relación adecuada entre los parámetros de Rashba y Dresselhaus. Para demostrarlo, sin pérdida de generalidad, se eligen los vectores ortonormales $\hat{\mathbf{n}}$ (perpendicular al plano), $\hat{\mathbf{m}}$ y $\hat{\mathbf{i}}$ (paralelos al plano)

$$\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z), \quad \hat{\mathbf{m}} = (-1, 1, 0)/\sqrt{2}, \quad \hat{\mathbf{i}} = (n_z, n_z, -2\eta)/\sqrt{2}, \quad (142)$$

⁴ $\mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) dx = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{x_0 - \delta} f(x) dx + \int_{x_0 + \delta}^{\infty} f(x) dx \right]$, donde x_0 es una singularidad.

donde $n_z^2 = (1 - 2\eta^2)$. Bajo esta selección, los vectores $\boldsymbol{\mu}_\nu$ pasan a ser

$$\boldsymbol{\mu}_x = \begin{pmatrix} 0 \\ \mu_{yx} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha + \gamma k_n^2 (1 - 9\eta^2) n_z \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\mu}_y = \begin{pmatrix} \mu_{xy} \\ \mu_{yy} \\ \mu_{zy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + \gamma k_n^2 (1 + 3\eta^2) n_z \\ 0 \\ -\gamma k_n^2 \sqrt{2}\eta (1 - 3\eta^2) \end{pmatrix}. \quad (143)$$

Cuando α y γk_n^2 , parámetros espín-órbita de Rashba y Dresselhaus lineal, respectivamente, satisfacen la relación

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = (1 - 9\eta^2) n_z, \quad (144)$$

es decir, cuando $\mu_{yx} = 0$, el campo espín-órbita toma la forma

$$\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \gamma k_n^2 (3\eta^2 - 1) (-2n_z, 0, \sqrt{2}\eta) k_y \quad (145)$$

y su dirección deja de depender del momento. Bajo esta situación, $\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y = \mu_{yx} (\mu_{zy}, 0, -\mu_{xy}) = 0$, lo que corresponde a la anulación de la corriente interbanda. Al particularizar (144) a las direcciones de crecimiento [001], [110] y [111] la relación entre los parámetros espín-órbita se reduce a las conocidas condiciones de simetría SU(2) $|\alpha| = |\beta_{[001]}|$, $\alpha = 0$ y $\alpha = -\beta_{[111]}$, respectivamente.

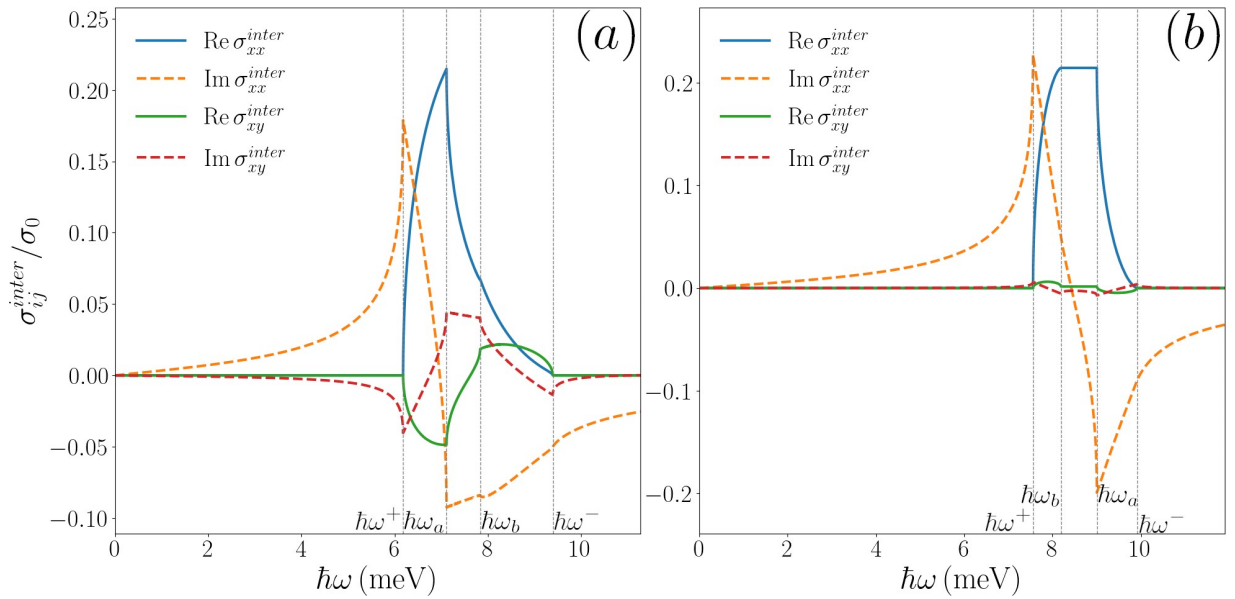


Figura 10. Componentes (a) longitudinal y (b) transversal del tensor de conductividad lineal $\sigma_{ij}^{inter}(\omega)$ para un GE2D con IEO Rashba-Dresselhaus crecido en la dirección [123]. Las líneas de puntos verticales indican las posiciones de las frecuencias críticas. Los parámetros utilizados son los mismos que en la Fig. 8.

En la figura 10 se muestra el espectro de la conductividad interbanda para los sistemas crecidos en la dirección [123] y [456]. Como se anticipó mediante la densidad conjunta de estados, puede identificarse la presencia de singularidades de Van Hove en las energías críticas respectivas (132)-(135) además de un cambio en el ancho, el tamaño, la región y forma general del espectro que depende de la orientación cristalográfica, incluso sin alterar los parámetros espín-órbita. Esto posibilita la elección de características espectrales particulares a través de un estudio comparativo entre sistemas con distintas direcciones de crecimiento.

4.6. Conductividad eléctrica de segundo armónico

Una vez más, debido a la anulación de la curvatura de Berry, el último término en la ecuación (81) es cero y el tensor de conductividad de segundo armónico para nuestro sistema se reduce a

$$\sigma_{ijk}^{(2\omega)}(\omega) = \frac{2e^3}{\hbar^3 \tilde{\omega}^2} \sum_P \sum_\lambda \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\lambda f_\lambda}{d^3} \left\{ \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \frac{1}{2\hbar\tilde{\omega}(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right. \\ \left. - \left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_k} \right) \frac{1}{(2\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)(\hbar\tilde{\omega} + \lambda 2d)} \right\}, \quad (146)$$

sin embargo, la integral de los términos restantes también se anula debido a simetría de inversión temporal. Matemáticamente, este resultado puede apreciarse una vez realizada la integral en k ; utilizando el resultado (139) y

$$\left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) = (\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{\mu}_\nu) k_\nu \\ = \boldsymbol{\mu}_i \cdot (\boldsymbol{\mu}_x k_x + \boldsymbol{\mu}_y k_y) \\ = k \boldsymbol{\mu}_i \cdot (\boldsymbol{\mu}_x \cos \theta + \boldsymbol{\mu}_y \sin \theta), \quad (147)$$

se tiene que estas integrales son de la forma

$$\int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - (2d)^2} = \mathcal{P} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} \frac{dk k}{(\hbar\tilde{\omega})^2 - (2d)^2} - \frac{i\pi}{2\hbar\tilde{\omega}} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk k \delta(\hbar\tilde{\omega} - 2d) \quad (148)$$

$$= \frac{1}{8g_{[hkl]}^2(\theta)} \left\{ \ln \left| \frac{\omega^2 - \omega_+^2(\theta)}{\omega^2 - \omega_-^2(\theta)} \right| - i\pi \Theta[1 - |\xi(\omega, \theta)|] \right\}, \quad (149)$$

y los integrandos en θ resultantes son del tipo $\sin \theta h(\theta)$ y $\cos \theta h(\theta)$, donde $h(\theta)$ es una función $f(\cos^2 \theta, \sin^2 \theta, \sin \theta \cos \theta)$ con periodo π , es decir,

$$\int_0^{2\pi} h(\theta) d\theta = 2 \int_0^{\pi} h(\theta) d\theta, \quad (150)$$

y, por lo tanto, la conductividad se anula debido a integrales como

$$\int_0^{2\pi} \sin \theta h(\theta) d\theta = \int_0^{\pi} \sin \theta h(\theta) d\theta - \int_0^{\pi} \sin \theta h(\theta) d\theta = 0, \quad (151)$$

$$\int_0^{2\pi} \cos \theta h(\theta) d\theta = 2 \int_0^{\pi} \cos \theta h(\theta) d\theta = 0. \quad (152)$$

4.7. Conductividad de espín a primer orden

En esta sección se dirige la atención a la respuesta lineal de conductividad de espín dada por la expresión (86). Se tiene que, para el GE2D con acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus crecido en una dirección arbitraria, el término proporcional a

$$\left[\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \times \mathbf{d} \right]_{\ell} = \left[(\boldsymbol{\mu}_{\nu} \times \boldsymbol{\mu}_i) \times \boldsymbol{\mu}_{\rho} \right]_{\ell} k_{\nu} k_{\rho} \quad (153)$$

se anula debido a simetría de inversión temporal, y el tensor de conductividad de espín lineal en el campo eléctrico (a temperatura $T = 0$) queda como

$$\sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = e \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{\partial \varepsilon_0}{\partial k_i} \frac{1}{d} \frac{1}{(\hbar \tilde{\omega})^2 - (2d)^2} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right)_{\ell} \quad (154)$$

$$= \frac{e}{8\pi^2} \left(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y \right)_{\ell} \frac{1}{m/\hbar^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}(\theta)} \int_{k_F^+(\theta)}^{k_F^-(\theta)} dk \frac{k^2}{(\hbar \tilde{\omega})^2 - (2d)^2} \times [\varepsilon_{ijz} + \sin 2\theta (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \delta_{ij} + \cos 2\theta (1 - \delta_{ij})], \quad (155)$$

donde se han desarrollado los factores $\partial \varepsilon_0 / \partial k_i = \hbar^2 k_i / m$ y

$$\begin{aligned} \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right)_{\ell} &= (\boldsymbol{\mu}_{\nu} \times \boldsymbol{\mu}_i)_{\ell} k_{\nu} \\ &= \left(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y \right)_{\ell} \varepsilon_{\nu iz} k_{\nu} \\ &= \left(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y \right)_{\ell} k (\cos \theta \delta_{iy} - \sin \theta \delta_{ix}). \end{aligned} \quad (156)$$

Después de hacer la integral en k , se tiene que la parte real está dada por

$$\begin{aligned} \text{Re } \sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = \sigma_{ij}^{\ell}(0) - \frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_{\ell} \frac{\hbar\omega}{8m/\hbar^2} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \ln \left| \frac{[\omega + \omega_+(\theta)][\omega - \omega_-(\theta)]}{[\omega - \omega_+(\theta)][\omega + \omega_-(\theta)]} \right| \\ \times [\varepsilon_{ijz} + \text{sen } 2\theta (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \delta_{ij} + \text{cos } 2\theta (1 - \delta_{ij})]. \end{aligned} \quad (157)$$

Aquí, el primer término es la conductividad de espín

$$\sigma_{ij}^{\ell}(0) = -\frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_{\ell} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^2(\theta)} [\varepsilon_{ijz} + \text{sen } 2\theta (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \delta_{ij} + \text{cos } 2\theta (1 - \delta_{ij})], \quad (158)$$

la cual puede resolverse analíticamente al considerar $z = e^{i\theta}$ e integrar sobre el círculo unitario. Esto da como resultado

$$\sigma_{ij}^{\ell}(0) = -\frac{e}{8\pi} \frac{(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_{\ell}}{|\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y|} \begin{pmatrix} -\text{Im}(z_+) & 1 + \text{Re}(z_+) \\ -1 + \text{Re}(z_+) & \text{Im}(z_+) \end{pmatrix} \quad (159)$$

donde

$$z_+ = -\frac{A - \sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}}{B^2 + C^2} (B + iC), \quad (160)$$

$A = (|\boldsymbol{\mu}_x|^2 + |\boldsymbol{\mu}_y|^2)/2$, $B = (|\boldsymbol{\mu}_x|^2 - |\boldsymbol{\mu}_y|^2)/2$, y $C = \boldsymbol{\mu}_x \cdot \boldsymbol{\mu}_y$. Por otro lado, la integral de la delta de Dirac permite obtener la expresión de la parte imaginaria del tensor de conductividad de espín

$$\begin{aligned} \text{Im } \sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = -\frac{e}{8\pi} (\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_{\ell} \frac{\hbar\omega}{16m/\hbar^2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g_{[hkl]}^4(\theta)} \Theta[1 - |\xi(\omega, \theta)|] \\ \times [\varepsilon_{ijz} + \text{sen } 2\theta (\delta_{iy} - \delta_{ix}) \delta_{ij} + \text{cos } 2\theta (1 - \delta_{ij})]. \end{aligned} \quad (161)$$

Debido a que $(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_x$ y $(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_y$ se anulan cuando $\mu_{z\nu} = 0$, se puede concluir que los únicos sistemas que admiten una corriente lineal de espín con polarización de espín perpendicular al plano son los crecidos a lo largo de las direcciones [001] y [111]; cualquier otra dirección cristalográfica tendría componentes de la corriente de espín con polarización paralela al gas. Al igual que la contribución interbanda a la corriente de carga, la corriente de espín a primer orden se anula por completo en presencia de un campo espín-órbita colineal ($\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y = 0$). Esto sucede cuando se cumplen las condiciones de Kammermeier, una dirección de crecimiento con al menos dos índices de Miller iguales en módulo y la relación (144). La primera condición equivale a considerar el subconjunto de sistemas definido por los vectores (142) e implica $\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y = \mu_{yx}(\mu_{zy}, 0, -\mu_{xy})$, mientras que la relación particular de los parámetros espín-órbita de Rashba y Dresselhaus conlleva $\mu_{yx} = 0$. Sin embargo, cabe notar que para

el mismo subconjunto de sistemas es posible obtener corrientes de espín con una polarización de espín particular. Evidentemente, estos sistemas nunca presentarán corrientes con polarización de espín a lo largo de $\hat{\mathbf{m}}(y')$, pero sí pueden presentar corrientes con polarización en $\hat{\mathbf{I}}(x')$ y $\hat{\mathbf{n}}(z')$ cuando $\mu_{xy} = 0$ y $\mu_{zy} = 0$, respectivamente, siempre y cuando $\mu_{yx} \neq 0$. De (143) se tiene que el caso $\mu_{xy} = 0$ corresponde a la relación de parámetros espín-órbita

$$\frac{\alpha}{\gamma k_n^2} = (1 + 3\eta^2)n_z, \quad (162)$$

que a diferencia de $\mu_{yx} = 0$ no implica un campo $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ colineal y, sin embargo, provoca la ausencia de corriente con polarización fuera del plano. Por otro lado, $\mu_{zy} = 0$ es independiente de la magnitud de los parámetros y sucede únicamente en sistemas crecidos a lo largo de las direcciones [001] y [111], con $\eta = 0$ y $\eta^2 = 1/3$, respectivamente.

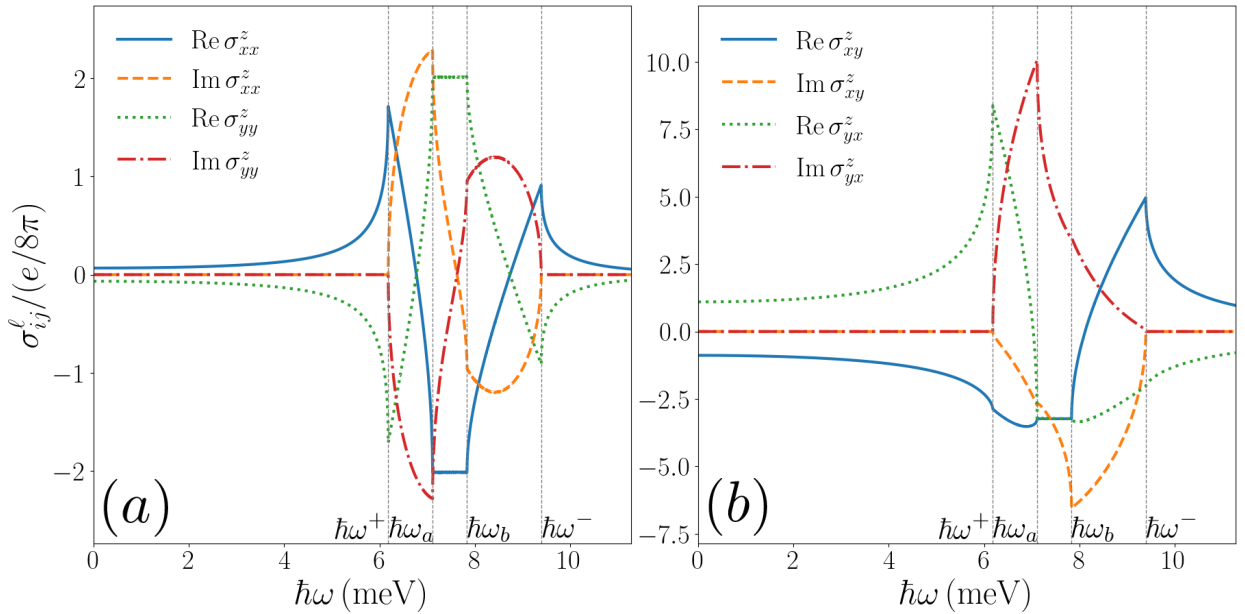


Figura 11. (a) Componentes longitudinales y (b) transversales del tensor de conductividad de espín $\sigma_{ij}^z(\omega)$ para un GE2D crecido a lo largo de la dirección [123]. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 8.

4.8. Segundo armónico de la conductividad de espín

A diferencia de lo que pasa con la respuesta de segundo armónico de la conductividad de carga, la expresión correspondiente a la conductividad de espín (89) no se anula en su totalidad y puede ser

expresada, utilizando (147), (153) y (156), como

$$\sigma_{ijl}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \frac{e^2}{(\hbar\omega)^2} \frac{(\hbar^2/m)}{(2\pi)^2} (\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_p \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^6(\theta)} \hat{k}_i \hat{k}_\nu \left\{ (\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y)_p \mu_{\ell\nu} (\delta_{jl} - \hat{k}_j \hat{k}_l) C(\omega, \theta) \right. \quad (163)$$

$$\left. - \epsilon_{\ell pq} \mu_{q\rho} \hat{k}_\rho (\boldsymbol{\mu}_j \cdot \boldsymbol{\mu}_\nu) (\hat{k}_x \delta_{ly} - \hat{k}_y \delta_{lx}) [C(\omega, \theta) - 4C(2\omega, \theta)] + (j \leftrightarrow l) \right\}$$

donde $\hat{k}_i = k_i/k = \cos \theta \delta_{ix} + \sin \theta \delta_{iy}$ y

$$C(x, \theta) = -\frac{1}{4} \left(\frac{2mg^2(\theta)}{\hbar^2} + \frac{\hbar x}{4} \ln \left| \frac{[x + \omega_+(\theta)][x - \omega_-(\theta)]}{[x - \omega_+(\theta)][x + \omega_-(\theta)]} \right| \right) - i\pi \frac{\hbar x}{16} \Theta[1 - |\xi(x, \theta)|]. \quad (164)$$

Al igual que en la respuesta lineal, el sistema $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$ no admite corriente de espín en 2ω cuando $\mu_{yx} = 0$ o, equivalentemente, cuando el campo espín-órbita se vuelve colineal. No obstante, es posible estudiar la polarización de una corriente de espín para la misma familia de orientaciones de forma similar a como se hizo a primer orden. Esta vez, los factores que es necesario analizar son

$$(\boldsymbol{\mu}_x)_\ell = \mu_{yx} \delta_{\ell y}, \quad (165)$$

$$(\boldsymbol{\mu}_y)_\ell = (\mu_{xy} \delta_{\ell x} + \mu_{zy} \delta_{\ell z}), \quad (166)$$

$$\left[(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y) \times \boldsymbol{\mu}_x \right]_\ell = \mu_{yx}^2 (\mu_{xy} \delta_{\ell x} + \mu_{zy} \delta_{\ell y}), \quad (167)$$

$$\left[(\boldsymbol{\mu}_x \times \boldsymbol{\mu}_y) \times \boldsymbol{\mu}_y \right]_\ell = -\mu_{yx} (\mu_{xy}^2 + \mu_{zy}^2) \delta_{\ell y}. \quad (168)$$

En estas expresiones se advierte el potencial control sobre la polarización de la corriente de espín, siempre y cuando esta no se anule por la condición $\mu_{yx} = 0$. Una vez más, las condiciones para llevarlo a cabo son $\mu_{xy} = 0$ o $\mu_{zy} = 0$. El primer caso corresponde al flujo de una corriente de espín con espín polarizado paralelamente al plano definido por $\hat{\mathbf{m}}(y')$ y $\hat{\mathbf{n}}(z')$, es decir $\sigma_{ijl}^{x,(2\omega)}(\omega) = 0$, mientras que el segundo implica el flujo de una corriente con polarización de espín paralela al plano descrito por los vectores $\hat{\ell}(x')$ y $\hat{\mathbf{m}}(y')$, o lo que es lo mismo, $\sigma_{ijl}^{z,(2\omega)}(\omega) = 0$. Por otro lado, para tener $\sigma_{ijl}^{y,(2\omega)}(\omega) = 0$ es necesaria la condición de campo $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ colineal, $\mu_{yx} = 0$. Por lo tanto, se tiene que en un sistema del subconjunto $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$, dado que $\sigma_{ij}^y(\omega) = 0$, cualquier generación de corriente de espín polarizada a lo largo de la dirección $\hat{\mathbf{m}}(y')$ dependerá cuadráticamente del campo eléctrico, pues es inducida únicamente como respuesta de segundo orden. Otro aspecto a destacar es que, al contrario de lo que sucedía con la respuesta de orden lineal, todos los sistemas $[hkl]$, a excepción de los gases crecidos a lo largo de $[001]$ y $[111]$, presentarían corrientes con componentes de polarización de espín fuera del plano, esto es, $\sigma_{ijl}^{z,(2\omega)}(\omega) \neq 0$. El requerimiento para tener esta polarización de corriente fuera del plano es $d_z(\mathbf{k}) \neq 0$, característica que distingue a las muestras orientadas a lo largo de $[110]$ de las correspondientes a $[001]$

y [111], hablando de los sistemas normalmente estudiados.

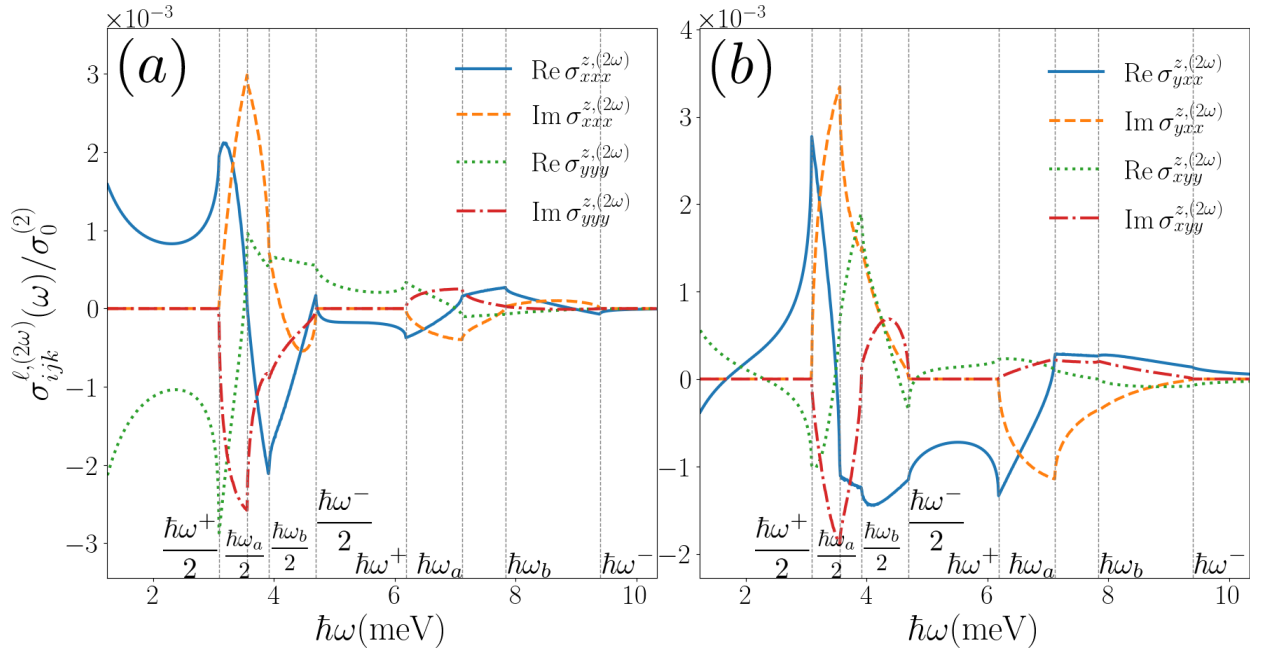


Figura 12. (a) Componentes longitudinales y (b) transversales Hall del tensor de conductividad de espín de segundo armónico con polarización de espín fuera del plano para un GE2D crecido a lo largo de la dirección [123]. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 8.

Al hacer una estimación del tamaño relativo entre la corriente de espín lineal y de segundo armónico para el sistema crecido a lo largo de la dirección cristalográfica [123] (figuras 11 y 12) se tiene

$$\frac{\mathcal{J}^{(2)}}{\mathcal{J}^{(1)}} \sim \frac{eE/k_R}{\varepsilon_R} N(\omega), \quad (169)$$

donde $N(\omega)$ es un escalar dependiente de la frecuencia, $k_R = m\alpha/\hbar^2$ y $\varepsilon_R = \alpha k_R$. El factor $(eE/k_R)/\varepsilon_R$ es una medida de comparación que relaciona el acoplamiento del dipolo espín-órbita e/k_R y el campo eléctrico con la energía característica ε_R . A una energía $\hbar\omega \approx 4$ a 5 meV (en el rango de los THz), $N \sim 10^{-3}$ a 10^{-2} , y para un campo eléctrico $E \sim 10^3$ a 10^5 Vm^{-1} (Hamamoto et al., 2017; Pan y Marinescu, 2019), se estima $\mathcal{J}^{(2)}/\mathcal{J}^{(1)} \sim 10^{-3} - 1$. Para una comparación con la corriente eléctrica de primer orden, se estima

$$\frac{\mathcal{J}^{(2)}(2/\hbar)}{\mathcal{J}^{(1)}/e} \sim \frac{(eE/k_R)}{\varepsilon_R} \times 10^{-4} \sim 10^{-2} \quad (170)$$

para una energía $\hbar\omega = 6 \text{ meV}$ y $E \sim 10^5 \text{ Vm}^{-1}$. Estas estimaciones sugieren que la corriente de espín inducida por segundo armónico puede alcanzar valores significativos mediante valores razonables del campo eléctrico, para algunas frecuencias en el rango de los THz.

Aunque en este trabajo se han excluido los términos cúbicos de la contribución espín-órbita tipo Dresselhaus, algunas observaciones pueden hacerse con respecto a las consecuencias que tendrían en la respuesta a segundo orden. El considerar los términos cúbicos en k rompe la simetría $SU(2)$ conseguida bajo las condiciones de Kammermeier para el Hamiltoniano lineal; sin embargo, bajo estas mismas condiciones, el campo espín-órbita total (con términos lineales y cúbicos) correspondiente a los sistemas [110] y [111] se mantiene colineal (Kammermeier et al., 2016). Esto conduce a la anulación de los tensores interbanda de conductividad de carga y de espín, tanto de primer como de segundo orden, como puede mostrarse utilizando las expresiones generales para un sistema de dos niveles (73), (81), (86) y (89), al notar que cada término involucra un factor del tipo $\mathbf{d}(\mathbf{k}) \times \partial\mathbf{d}(\mathbf{k})/\partial k_i$. Cuando $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ es colineal, $\mathbf{d}(\mathbf{k}) \parallel \partial\mathbf{d}(\mathbf{k})/\partial k_i$ y, como consecuencia, su producto cruz es cero.

En este capítulo, se han determinado la densidad conjunta de estados y las conductividades asociadas tanto a una corriente de carga como a una corriente de espín de respuesta lineal y de segundo armónico para un GE2D con acoplamiento espín-órbita crecido en una dirección arbitraria. A continuación, se presentan algunas de las conclusiones obtenidas:

- Se muestra cómo la elección de una orientación cristalográfica modifica la forma general del espectro de la densidad conjunta de estados y de las funciones respuesta, así como su tamaño y la posición de la ventana de absorción.
- Se encuentra que no hay conductividad eléctrica de segundo armónico para este sistema debido a simetría de inversión temporal.
- La conductividad eléctrica de primer orden, al igual que la conductividad de espín lineal y de segundo armónico, se anulan debido a un campo espín-órbita colineal bajo las condiciones de simetría $SU(2)$: una dirección de crecimiento con dos índices de Miller iguales en módulo y una relación específica entre los parámetros espín-órbita para cada una de estas direcciones.
- Los únicos sistemas que admiten una corriente de espín lineal con polarización de espín perpendicular al plano del gas son los crecidos a lo largo de [001] y [111]. Notablemente, estos también son los únicos sistemas que no exhiben una corriente de espín de segundo armónico con polarización fuera del plano.

- En el conjunto de sistemas $\hat{\mathbf{n}} = (\eta, \eta, n_z)$, existe la posibilidad de generar corrientes de espín, tanto lineales como de segundo armónico, con una orientación específica mediante una relación diferente entre los parámetros espín-órbita en comparación con la requerida para la simetría SU(2).
- La corriente de espín inducida como respuesta de segundo armónico en estos sistemas puede alcanzar magnitudes significativas.

Capítulo 5. Modelo anisotrópico de Rashba

En este capítulo se considera un sistema que se asemeja a un GE2D, sin embargo, muestra otro tipo de anisotropía. Esta anisotropía surge en materiales atómicamente delgados, pero con cierto grado de corrugación como el fosforeno o los monocalcogenuros metálicos del grupo IV. En este modelo la reducción de simetría en el desdoblamiento de los estados es debido a una anisotropía de la masa, es decir, el electrón presenta masas efectivas distintas dependiendo de si se mueve en dirección x o en dirección y , de modo que el Hamiltoniano que lo representa es

$$H = \left(\frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \right) \mathbb{I} + \alpha \left(\sqrt{\frac{m_d}{m_y}} k_y \sigma_x - \sqrt{\frac{m_d}{m_x}} k_x \sigma_y \right) + \Delta \sigma_z, \quad (171)$$

donde α es el parámetro espín-órbita y $m_d = \sqrt{m_x m_y}$ es la media geométrica de las masas efectivas m_x y m_y . Son estas masas las que provocan que los dos primeros términos en (171), correspondientes a la parte cinética y a la interacción espín-órbita tipo Rashba, se distingan de su contraparte isotrópica presente en heteroestructuras semiconductoras. Además el modelo se ha extendido para incluir un parámetro $\Delta \geq 0$ que da origen a una brecha energética entre los niveles $\varepsilon_+(\mathbf{k})$ y $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. Si no hay interacción espín-órbita ni brecha energética, es decir, $\alpha = 0$ y $\Delta = 0$, nuestro sistema se reduce al GE2D anisotrópico considerado por Ahn y Das Sarma (2021); por otro lado, si $\alpha = 0$, $\Delta \neq 0$ y $m_x = m_y$ se obtiene el modelo ferromagnético de Rashba, ampliamente utilizado para estudiar aspectos fundamentales del efecto Hall anómalo (Nagaosa et al., 2010). Es importante señalar que estos sistemas están incluidos en el nuestro. Particularmente, mientras que todas nuestras expresiones incluyen a Δ , estas abarcan el caso $\Delta = 0$, el cual equivale a un modelo con simetría de inversión temporal, en tanto que $\Delta \neq 0$ rompe dicha simetría. Esto permite estudiar fácilmente las diferencias entre ambas situaciones. Escritos en coordenadas polares, las bandas de conducción ($\lambda = +$) y de valencia ($\lambda = -$), expresados en (54), están dados por

$$\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \frac{\hbar^2 k^2 g^2(\theta)}{2m_d} + \lambda d(k, \theta), \quad (172)$$

donde

$$d(k, \theta) = \sqrt{\alpha^2 k^2 g^2(\theta) + \Delta^2} \quad (173)$$

es la magnitud del campo vectorial $\mathbf{d}(\mathbf{k}) = \alpha(\sqrt{m_d/m_y} k_y \hat{\mathbf{x}} - \sqrt{m_d/m_x} k_x \hat{\mathbf{y}}) + \Delta \hat{\mathbf{z}}$ y donde

$$g(\theta) = \sqrt{\frac{m_d}{m_x} \cos^2 \theta + \frac{m_d}{m_y} \sin^2 \theta} \quad (174)$$

contiene la información acerca de la anisotropía del modelo; cuando $m_x = m_y$, se tiene que $g(\theta) = 1$, lo que corresponde al conocido caso del modelo anisotrópico de Rashba mencionado previamente. Sabemos que $\varepsilon_+(k, \theta) - \varepsilon_-(k, \theta) = 2d(k, \theta)$, mientras que utilizando la definición (59) encontramos que la curva que satisface una diferencia de energía constante, o curva de resonancia, es la elipse descrita por la ecuación

$$\varepsilon_0(k_x, k_y) = \frac{(\hbar\omega/2)^2 - \Delta^2}{2\varepsilon_A}, \quad (175)$$

donde

$$\begin{aligned} \varepsilon_0(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} \\ &= \frac{\hbar^2 k^2 g^2(\theta)}{2m_d} \end{aligned} \quad (176)$$

es la parte cinética del Hamiltoniano (171) y $\varepsilon_A = m_d \alpha^2 / \hbar^2$.

La introducción de Δ no solamente afecta la topología del sistema al introducir una brecha energética entre los niveles, sino que además, la misma forma del nivel $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ se ve modificada dependiendo de la relación entre Δ y ε_A (ver Figura 13). Cuando $\Delta < \varepsilon_A$ el nivel inferior desarrolla un máximo local $-\Delta$ en $k = 0$ rodeado por un valor mínimo $\varepsilon_{\min} = -(\varepsilon_A^2 + \Delta^2)/2\varepsilon_A$ en los puntos de \mathbf{k} sobre la elipse $\varepsilon_0(k_x, k_y) = (\varepsilon_A^2 - \Delta^2)/2\varepsilon_A$. Por otro lado, cuando $\Delta > \varepsilon_A$, la banda de valencia exhibe solamente un mínimo en $k = 0$. Debido a la presencia de Δ y a las posibles morfologías de $\varepsilon_-(\mathbf{k})$, existen distintas posiciones en que puede estar ubicado el nivel de Fermi ε_F con respecto a la brecha de energía, lo cual afecta la definición de los contornos de Fermi y, por lo tanto, el espectro de transiciones ópticas:

(i) Cuando $\varepsilon_F > \Delta$, la ecuación (57) tiene como raíces las curvas (ver Figura 14a)

$$k_F^\pm(\theta) = \frac{1}{\alpha g(\theta)} \left[\left(\sqrt{\varepsilon_A^2 + \Delta^2 + 2\varepsilon_A \varepsilon_F \mp \varepsilon_A} \right)^2 - \Delta^2 \right]^{1/2}, \quad (177)$$

uno por el corte a la banda de conducción (+) y otro por el corte a la banda de valencia (-).

(ii) Si $|\varepsilon_F| < \Delta$, el único contorno de Fermi que se genera es el definido por $k_F^-(\theta)$ en (177) (ver Figura 14b).

(iii) Por último, si la forma del nivel $\varepsilon_-(\mathbf{k})$ es la correspondiente a $\Delta < \varepsilon_A$ y $\varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta$, dos

contornos de Fermi resultan del corte al nivel inferior (Figura 14c):

$$q_F^\pm(\theta) = \frac{1}{\alpha g(\theta)} \left[\left(\varepsilon_A \pm \sqrt{\varepsilon_A^2 + \Delta^2 + 2\varepsilon_A \varepsilon_F} \right)^2 - \Delta^2 \right]^{1/2}, \quad (178)$$

donde $q_F^+(\theta) = k_F^-(\theta)$.

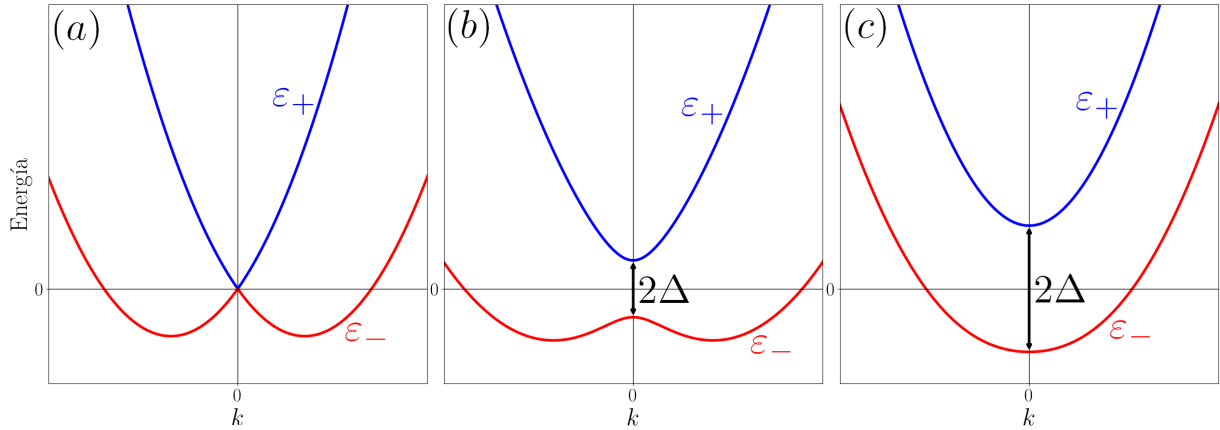


Figura 13. Forma de los niveles Rashba según la relación entre Δ y ε_A : (a) $\Delta = 0$, (b) $\Delta < \varepsilon_A$ y (c) $\Delta > \varepsilon_A$.

Mientras para la situación (ii) es necesario que $\Delta \neq 0$, es conveniente señalar que (i) y (iii) comprenden el caso sin brecha energética $\Delta = 0$ en que basta decir si el valor del nivel de Fermi es positivo o negativo, respectivamente. Los contornos expresados mediante (177) y (178) son elipses concéntricas orientadas horizontalmente si $m_x > m_y$ o verticalmente si $m_x < m_y$. Además, la separación energética entre los niveles, correspondiente a los puntos \mathbf{k} que forman estas curvas, es decir,

$$2d(k_F^\pm(\theta)) = 2 \left(\sqrt{\varepsilon_A^2 + \Delta^2 + 2\varepsilon_A \varepsilon_F} \mp \varepsilon_A \right), \quad (179)$$

$$2d(q_F^\pm(\theta)) = 2 \left(\varepsilon_A \pm \sqrt{\varepsilon_A^2 + \Delta^2 + 2\varepsilon_A \varepsilon_F} \right), \quad (180)$$

es independiente de θ . La curva de resonancia $C_r(\omega)$ es una elipse con la misma forma y orientación que los contornos $k_F^\pm(\theta)$ y $q_F^\pm(\theta)$, lo cual se confirma mediante (59), y la única diferencia es la variación del tamaño dada su dependencia de la frecuencia. Como consecuencia, se tendrán únicamente dos energías críticas en el espectro de la densidad conjunta de estados, determinadas por las frecuencias ω_+ y ω_- en que $C_r(\omega)$ entra y sale, respectivamente, de la zona sombreada en la figura 14. La ventana de absorción comenzará, entonces, con la energía $\hbar\omega_+$ que, dependiendo de la posición del nivel de Fermi, está dada

por

$$\hbar\omega_{\pm} = \begin{cases} 2d(k_F^+) & \text{si } \varepsilon_F > \Delta \\ 2\Delta & \text{si } |\varepsilon_F| < \Delta \\ 2d(q_F^-) & \text{si } \varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta \end{cases}, \quad (181)$$

mientras que terminará en $\hbar\omega_{-}$, que en cualquier circunstancia es

$$\hbar\omega_{-} = 2d(k_F^-). \quad (182)$$

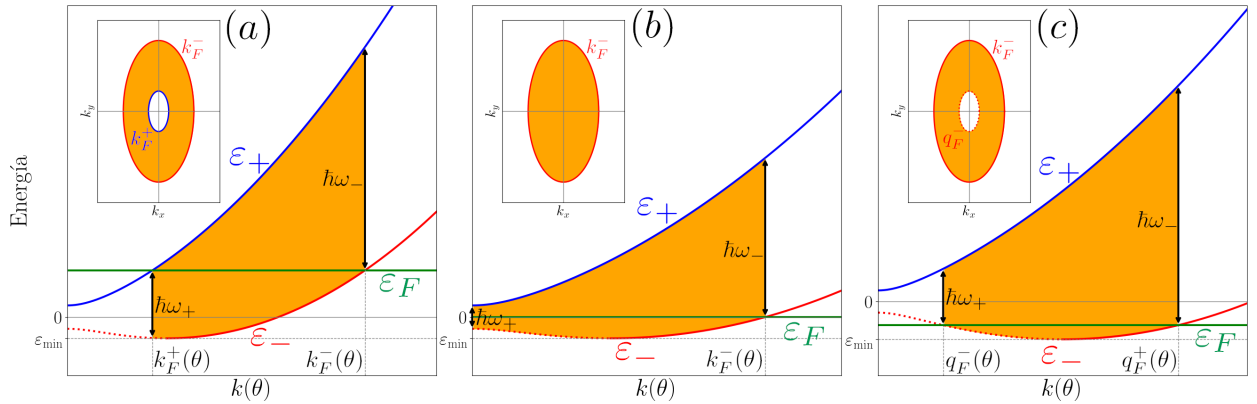


Figura 14. Bandas de energía $\varepsilon_{\pm}(k, \theta)$ del modelo de Rashba anisotrópico con $\varepsilon_A > \Delta > 0$. Las zonas sombreadas indican la región k permitida para transiciones ópticas según la posición del nivel de Fermi: (a) $\varepsilon_F > \Delta$, (b) $|\varepsilon_F| < \Delta$, (c) $\varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta$. Los recuadros muestran los contornos de Fermi correspondientes.

Los diferentes casos se ven ilustrados en la Figura 14, donde se muestra el esquema de posibles transiciones energéticas, así como los correspondientes contornos de Fermi cuando $\Delta < \varepsilon_A$. Todo esto se manifiesta en la densidad conjunta de estados, que toma la forma

$$J_{+-}(\omega; \varepsilon_F) = \frac{\hbar\omega}{8\pi\alpha^2} \Theta [1 - |\xi(\omega; \varepsilon_F)|], \quad (183)$$

donde

$$\xi(\omega, \varepsilon_F) = \frac{\omega - (\omega_- + \omega_+)/2}{(\omega_- - \omega_+)/2}. \quad (184)$$

Conviene resaltar que la función $\xi(\omega, \varepsilon_F)$ depende de las frecuencias críticas, por lo tanto, se ve modificada por la posición del nivel de Fermi de acuerdo a (181). La figura 15 presenta la función $J_{+-}(\omega)$ mediante un mapa de color donde, para un valor de ε_F dado, el gradiente de color deja ver su crecimiento lineal dentro de la ventana de absorción $\hbar\omega_+ < \hbar\omega < \hbar\omega_-$. Además, puede visualizarse el comportamiento de los umbrales (181): (i) $\varepsilon_F > \Delta$, $\hbar\omega_+$ decrementa su valor junto con ε_F hasta $\hbar\omega_+ = 2\Delta$;

(ii) $|\varepsilon_F| < \Delta$, el límite de la ventana se mantiene en $\hbar\omega_+ = 2\Delta$; (iii) $\varepsilon_F < -\Delta$, $\hbar\omega_+$ comienza a incrementar su valor conforme el nivel de Fermi sigue disminuyendo hasta $\varepsilon_F = \varepsilon_{\min}$. Por su parte, la magnitud de $\hbar\omega_-$ va reduciendo su valor junto con el nivel de Fermi ε_F , independientemente de la posición con respecto a la brecha energética de este último.

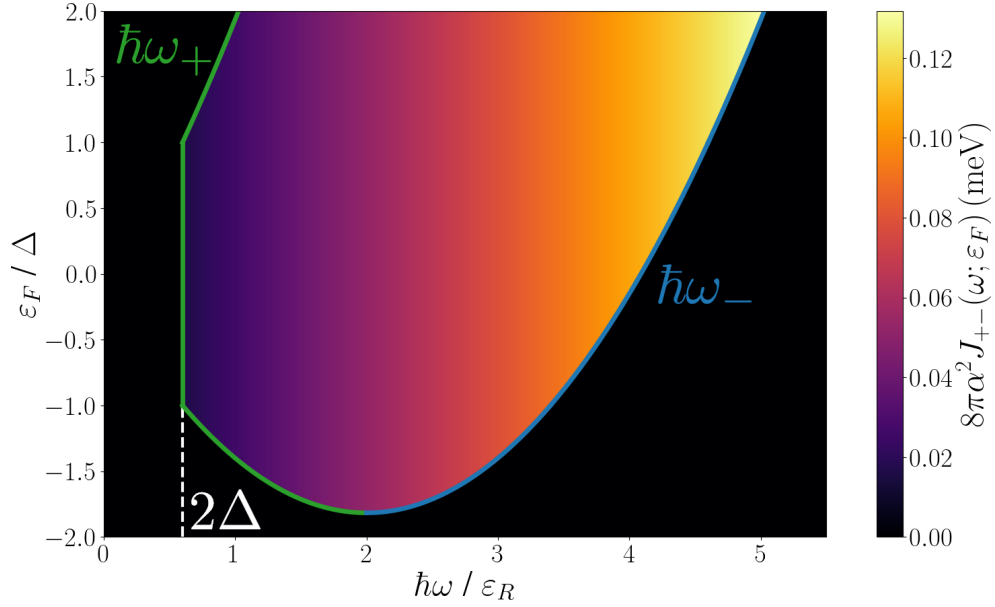


Figura 15. Densidad conjunta de estados $8\pi\alpha^2 J_{+-}(\omega; \varepsilon_F)$ y bordes de absorción $\hbar\omega_{\pm}(\varepsilon_F)$ del modelo anisotrópico de Rashba para el caso $\varepsilon_A > \Delta$. Los parámetros utilizados son $\Delta = 0.3\varepsilon_A$, $\alpha = 10\text{meV\AA}$, $n = 1 \times 10^{13}\text{cm}^{-2}$ y $m_x = m_0$, $m_y = 4m_0$ para las masas efectivas.

5.1. Conductividad eléctrica de primer orden

La conductividad intrabanda (72) puede formularse de la siguiente manera:

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = i\pi \frac{\sigma_0}{\hbar\omega} \sum_{\lambda} \int \frac{d^2k}{(2\pi)^2} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_i} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_j} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\lambda}), \quad (185)$$

donde, a su vez, las derivadas parciales de los niveles y la delta de Dirac pueden escribirse como

$$\frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k_i} = \frac{1}{g^2(\theta)} \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k} \frac{k_i}{k} \frac{m_d}{m_i} \quad (186)$$

y

$$\delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\lambda}) = \sum_n \frac{\delta(k - k_n^{\lambda})}{\left. \frac{\partial \varepsilon_{\lambda}}{\partial k} \right|_{k=k_n^{\lambda}}}, \quad (187)$$

respectivamente; k_n^λ es la n -ésima raíz de $\varepsilon_\lambda(k, \theta) = \varepsilon_F$ y por brevedad se omite su dependencia en θ .

Después de hacer la integral en k , el tensor intrabanda queda como

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = \frac{i\sigma_0}{4\pi\hbar\tilde{\omega}} \sum_{\lambda,n} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^4(\theta)} k_n^\lambda \left. \frac{\partial \varepsilon_\lambda}{\partial k} \right|_{k=k_n^\lambda} \frac{m_d^2}{m_i m_j} \quad (188)$$

$$\times \left[(\cos^2 \theta \delta_{ix} + \sin^2 \theta \delta_{iy}) \delta_{ij} + \sin \theta \cos \theta (1 - \delta_{ij}) \right]. \quad (189)$$

Ahora, al desarrollar el factor

$$k_n^\lambda \left. \frac{\partial \varepsilon_\lambda}{\partial k} \right|_{k=k_n^\lambda} = \left(\frac{d^2(k_n^\lambda) - \Delta^2}{d(k_n^\lambda)} \right) \left(\frac{d(k_n^\lambda) + \lambda \varepsilon_R}{\varepsilon_R} \right) \quad (190)$$

se ve su independencia angular debido a los resultados (179) y (180), de modo que se puede llevar a cabo la integral en θ ((261), (260) y (262) en anexo) y se obtiene

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = \delta_{ij} \frac{i\sigma_0}{4\hbar\tilde{\omega}} \sum_{\lambda,n} \left[\frac{d^2(k_n^\lambda) - \Delta^2}{d(k_n^\lambda)} \right] \left[\frac{d(k_n^\lambda) + \lambda \varepsilon_R}{\varepsilon_R} \right] \frac{m_d}{m_i}. \quad (191)$$

Esta expresión, completamente imaginaria, es aplicable a toda posición del nivel de Fermi con respecto a la brecha de energía; la única diferencia se encuentra en las raíces k_n^λ que estarán dadas, según sea el caso, por (177) y (178). La expresión (191) puede escribirse también en función de las energías (181) y (182), sin embargo, al hacer la suma en λ es importante recordar que para el caso (iii) $\hbar\omega_+$ en realidad viene de una raíz del nivel $\varepsilon_-(\mathbf{k})$. Tomando esto en cuenta, la forma explícita de los tres casos es

(i) $\varepsilon_F > \Delta$:

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = \delta_{ij} \frac{i\sigma_0}{4\hbar\tilde{\omega}} \left\{ \left[\frac{(\hbar\omega_+)^2 - (2\Delta)^2}{\hbar\omega_+} \right] \left[\frac{(\hbar\omega_+) + 2\varepsilon_R}{2\varepsilon_R} \right] + \left[\frac{(\hbar\omega_-)^2 - (2\Delta)^2}{\hbar\omega_-} \right] \left[\frac{(\hbar\omega_-) - 2\varepsilon_R}{2\varepsilon_R} \right] \right\} \frac{m_d}{m_i}, \quad (192)$$

(ii) $|\varepsilon_F| < \Delta$:

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = \delta_{ij} \frac{i\sigma_0}{4\hbar\tilde{\omega}} \left[\frac{(\hbar\omega_-)^2 - (2\Delta)^2}{\hbar\omega_-} \right] \left[\frac{(\hbar\omega_-) - 2\varepsilon_R}{2\varepsilon_R} \right] \frac{m_d}{m_i}, \quad (193)$$

(iii) $\varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta$:

$$\sigma_{ij}^{intra}(\omega) = \delta_{ij} \frac{i\sigma_0}{4\hbar\tilde{\omega}} \left\{ \left[\frac{(\hbar\omega_+)^2 - (2\Delta)^2}{\hbar\omega_+} \right] \left[\frac{(\hbar\omega_+) - 2\varepsilon_R}{2\varepsilon_R} \right] + \left[\frac{(\hbar\omega_-)^2 - (2\Delta)^2}{\hbar\omega_-} \right] \left[\frac{(\hbar\omega_-) - 2\varepsilon_R}{2\varepsilon_R} \right] \right\} \frac{m_d}{m_i}. \quad (194)$$

Por su lado, la contribución interbanda de la conductividad lineal sí presenta tanto parte real como parte imaginaria. Para la parte real del tensor se tiene que las componentes de la diagonal principal pueden escribirse de la forma

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{8} \alpha^2 \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_1}^{k_2} dk \frac{k}{d^3} \left[\alpha^2 k^2 (\sin^2 \theta \delta_{ix} + \cos^2 \theta \delta_{iy}) + \Delta^2 \frac{m_d}{m_i} \right] \delta(\hbar\omega - 2d), \quad (195)$$

donde se han utilizado las expresiones que corresponden, esencialmente, al tensor métrico cuántico y a la curvatura de Berry del modelo anisotrópico de Rashba

$$\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) \cdot \left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) = \alpha^2 \left[\left(\alpha^2 k^2 + \Delta^2 \frac{m_d}{m_i} \right) \delta_{ij} - \alpha^2 k_i k_j \right], \quad (196)$$

$$\left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \cdot \mathbf{d} = \varepsilon_{ijz} \alpha^2 \Delta, \quad (197)$$

además de $(k^2 - k_i k_j) \delta_{ij} = k^2 (\sin^2 \theta \delta_{ix} + \cos^2 \theta \delta_{iy}) \delta_{ij}$, donde no se suma sobre índices repetidos. Los límites de la integral en k están dados por

$$k_1 = \begin{cases} k_F^+(\theta) & \text{si } \varepsilon_F > \Delta \\ 0 & \text{si } |\varepsilon_F| < \Delta \\ q_F^-(\theta) & \text{si } \varepsilon_{\min} < \varepsilon_F < -\Delta \end{cases}, \quad (198)$$

y $k_2 = k_F^-(\theta)$. Al escribir la delta de Dirac como

$$\delta(\hbar\omega - 2d) = \frac{d(k^*)}{2\alpha^2 g^2(\theta) k^*} \delta(k - k^*), \quad (199)$$

donde

$$k^* = \frac{1}{2\alpha g(\theta)} \sqrt{(\hbar\omega)^2 - (2\Delta)^2} \quad (200)$$

y $d(k^*) = \hbar\omega/2$, de la integral en k se obtiene directamente

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} \left\{ \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \frac{\sin^2 \theta \delta_{ix} + \cos^2 \theta \delta_{iy}}{g^2(\theta)} + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{m_d}{m_i} \right\} \Theta[1 - |\eta(\omega; \varepsilon_F)|], \quad (201)$$

mientras que al utilizar los resultados (259), (260) y (261) del anexo, la parte real de las componentes longitudinales del tensor de conductividad queda como

$$\text{Re } \sigma_{ii}^{inter}(\omega) = \frac{\pi\sigma_0}{16} \left[1 + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \frac{m_d}{m_i} \Theta[1 - |\eta(\omega; \varepsilon_F)|]. \quad (202)$$

Para las componentes Hall se tiene $k_i k_j = k^2 \cos \theta \sin \theta$, de modo que la integral en θ se anula (ver resultado (262) en anexo), y por lo tanto,

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\text{Re } \sigma_{yx}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{4\pi} \alpha^2 2\Delta \int_0^{2\pi} d\theta \int_{k_1}^{k_2} dk \frac{k}{d} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d)^2}. \quad (203)$$

Las integrales pueden resolverse analíticamente y están dadas por (250) y (259), con lo que se obtiene

$$\text{Re } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\text{Re } \sigma_{yx}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{8} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right) \ln \left| \frac{(\omega + \omega_-)(\omega - \omega_+)}{(\omega - \omega_-)(\omega + \omega_+)} \right|. \quad (204)$$

Similarmenete, al proceder con la parte imaginaria se obtienen las expresiones

$$\text{Im } \sigma_{ii}^{inter}(\omega) = \frac{\sigma_0}{16} \left\{ \left[1 + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{(\omega + \omega_-)(\omega - \omega_+)}{(\omega - \omega_-)(\omega + \omega_+)} \right| - \frac{2\omega(\omega_+ - \omega_-)}{\omega_+ \omega_-} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right\} \frac{m_d}{m_i}, \quad (205)$$

y

$$\text{Im } \sigma_{xy}^{inter}(\omega) = -\text{Im } \sigma_{yx}^{inter}(\omega) = -\frac{\sigma_0\pi}{8} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right) \Theta[1 - |\xi(\omega; \varepsilon_F)|]. \quad (206)$$

Las integrales necesarias para llegar a estas expresiones también pueden encontrarse en el anexo. Ahora que se han obtenido la parte intrabanda e interbanda de la conductividad, únicamente hace falta sumar las contribuciones para obtener el tensor completo, el cual está dado por

$$\text{Re } \sigma_{ii}(\omega) = D_{ii}(\omega)\delta(\omega) + \frac{\pi\sigma_0}{16} \left[1 + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \frac{m_d}{m_i} \Theta[1 - |\xi(\omega; \varepsilon_F)|], \quad (207)$$

$$\text{Im } \sigma_{ii}(\omega) = \text{Im } \sigma_{ii}^{intra}(\omega) + \frac{\sigma_0}{16} \left\{ \left[1 + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{(\omega + \omega_-)(\omega - \omega_+)}{(\omega - \omega_-)(\omega + \omega_+)} \right| - \frac{2\omega(\omega_+ - \omega_-)}{\omega_+ \omega_-} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right\} \frac{m_d}{m_i}, \quad (208)$$

$$\text{Re } \sigma_{xy}(\omega) = -\text{Re } \sigma_{yx}(\omega) = \frac{\sigma_0}{8} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right) \ln \left| \frac{(\omega + \omega_-)(\omega - \omega_+)}{(\omega - \omega_-)(\omega + \omega_+)} \right|, \quad (209)$$

$$\text{Im } \sigma_{xy}(\omega) = -\text{Im } \sigma_{yx}(\omega) = -\frac{\sigma_0 \pi}{8} \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right) \Theta[1 - |\xi(\omega; \varepsilon_F)|], \quad (210)$$

donde se ha añadido el peso de Drude¹ $D_{ii}(\omega)$ en (207) con el fin de tomar en cuenta correctamente el límite $\omega \rightarrow 0$ de la contribución intrabanda a la conductividad longitudinal (Agarwal et al., 2011; Stauber et al., 2013). El espectro de la conductividad puede observarse en la figura 16 para un sistema donde $\Delta < \varepsilon_A$ para las tres posiciones de ε_F . Se puede observar lo que ya anticipaba la densidad conjunta de estados: el comportamiento de las energías características $\hbar\omega_+$ y $\hbar\omega_-$ conforme se considera un valor de la energía de Fermi cada vez más pequeño, lo cual ocasiona a la vez una ventana de absorción más estrecha.

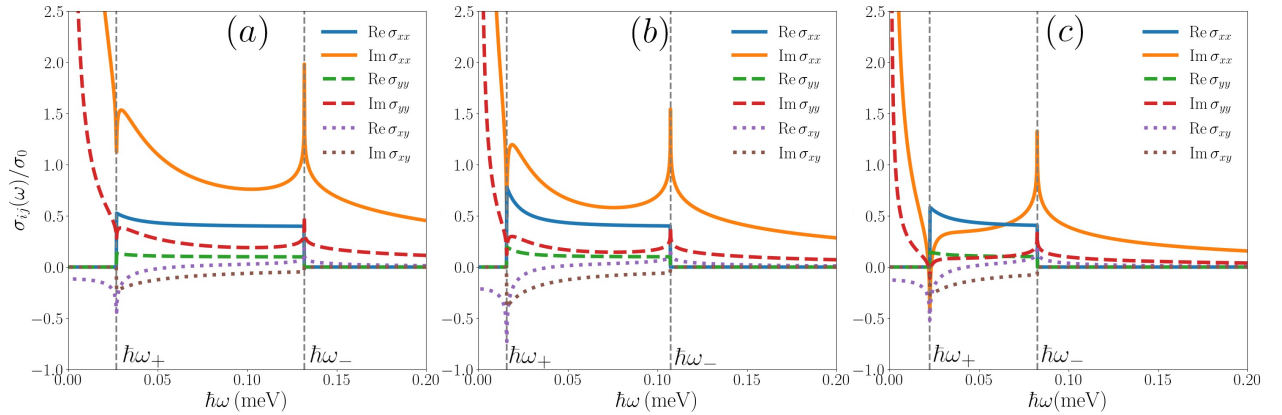


Figura 16. (a) Componentes longitudinales y transversales del tensor de conductividad $\sigma_{ij}(\omega)$ para un modelo de Rashba anisotrópico con brecha de energía cuando (a) $\varepsilon_F > \Delta$ (b) $|\varepsilon_F| < \Delta$ y $\varepsilon_F < -\Delta$. Los parámetros utilizados son $\Delta = 0.3\varepsilon_R$, $n = 1 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$, $m_x = m_0$, $m_y = 4m_0$, $\alpha = 10 \text{meV}\text{\AA}$.

5.1.1. Propiedades ópticas lineales

5.1.2. Dicroísmo lineal

La anisotropía del sistema asociada a $\sigma_{xx}(\omega) \neq \sigma_{yy}(\omega)$ puede ser expresada también al separar la corriente eléctrica en la suma de una componente longitudinal y otra transversal. Esto es, si la amplitud

¹El peso de Drude $D_{ii}(\omega)$ surge de la necesidad de satisfacer las relaciones de Kramers-Kronig y está definido como

$$D_{ii} = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \omega \text{Im } \sigma_{ii}(\mathbf{q}, \omega).$$

En nuestro caso

$$D_{ii} = \pi \lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \text{Im } \sigma_{ii}^{\text{intra}}(\omega),$$

dato que $\lim_{\omega \rightarrow 0} \omega \text{Im } \sigma_{ii}^{\text{inter}}(\omega) = 0$.

del campo eléctrico externo es $\mathbf{E}_0(\omega) = E_0(\omega) (\cos \varphi \hat{\mathbf{x}} + \sin \varphi \hat{\mathbf{y}})$, la corriente puede escribirse como

$$\mathbf{J} = \sigma_{\parallel} \mathbf{E}_0 + \sigma_{\perp} \mathbf{E}_0 \times \hat{\mathbf{z}}, \quad (211)$$

donde

$$\sigma_{\parallel}(\omega; \varphi) = \sigma_{xx}(\omega) \cos^2 \varphi + \sigma_{yy}(\omega) \sin^2 \varphi + \sin \varphi \cos \varphi [\sigma_{xy}(\omega) + \sigma_{yx}(\omega)], \quad (212)$$

$$\sigma_{\perp}(\omega; \varphi) = [\sigma_{xx}(\omega) - \sigma_{yy}(\omega)] \sin \varphi \cos \varphi + \sigma_{xy}(\omega) \sin^2 \varphi - \sigma_{yx}(\omega) \cos^2 \varphi. \quad (213)$$

Al considerar que en nuestro sistema $\sigma_{xy}(\omega) = -\sigma_{yx}(\omega)$, la conductividad del término paralelo al campo, conocido como longitudinal, se reduce a

$$\sigma_{\parallel}(\omega; \varphi) = \sigma_{xx}(\omega) \cos^2 \varphi + \sigma_{yy}(\omega) \sin^2 \varphi, \quad (214)$$

y su parte real, la cual determina la disipación para campos linealmente polarizados, está dada por

$$\text{Re } \sigma_{\parallel}(\omega; \varphi) = \frac{\sigma_0 \pi}{16} \left[1 + \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \Theta(1 - |\xi(\omega; \varepsilon_F)|) g^2(\varphi). \quad (215)$$

Esta expresión sugiere cómo la corriente inducida puede ser manipulada no solamente a través de ω , sino también mediante la dirección del campo eléctrico externo (ver Figura 17); esta última dependencia es determinada mediante la función de anisotropía angular $g(\varphi)$ definida en (174).

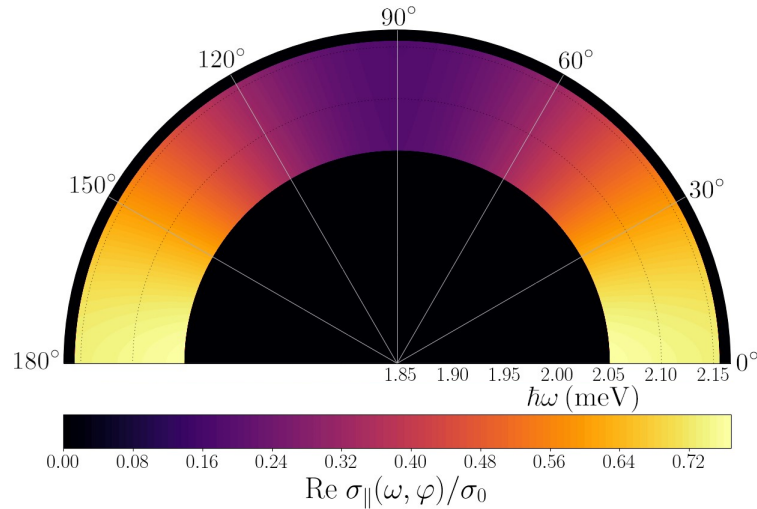


Figura 17. Conductividad longitudinal del modelo anisotrópico de Rashba en función de la frecuencia y la dirección del campo eléctrico externo. Aquí, $\Delta = 1$ meV y $\varepsilon_F = 2\Delta$, mientras el resto de los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 16.

5.1.3. Dicroísmo circular

Por otro lado, la variación en la absorción de luz según el tipo de polarización circular puede observarse utilizando la corriente inducida $\mathbf{J} = \sigma_{\pm} \mathbf{E}_{\pm}$, donde

$$\sigma_{\pm}(\omega) = \sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega) \pm i [\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)] \quad (216)$$

es la conductividad apropiada para el campo eléctrico externo circularmente polarizado \mathbf{E}_{\pm} . En este caso, la disipación está determinada por

$$\text{Re } \sigma_{\pm}(\omega) = \text{Re} [\sigma_{xx}(\omega) + \sigma_{yy}(\omega)] \mp \text{Im} [\sigma_{xy}(\omega) - \sigma_{yx}(\omega)], \quad (217)$$

donde puede apreciarse que si la componente Hall no se anula ($\sigma_{xy} \neq 0$), lo cual sucede en nuestro sistema cuando existe una brecha de energía ($\Delta > 0$), esto es suficiente para que exista un dicroísmo circular.

5.1.4. Reflectividad diferencial

En este apartado, se utilizan expresiones derivadas del problema de reflexión y refracción en una interfaz que involucra el sistema bidimensional descrito por el Hamiltoniano (171) para calcular $\Delta R/R$, una medida del nivel de anisotropía del sistema. La reflectividad y la transmisividad se expresan como:

$$R(\omega; \varphi) = (|r_{pp}|^2 + |r_{sp}|^2) \cos^2 \varphi + (|r_{ps}|^2 + |r_{ss}|^2) \sin^2 \varphi + 2 \text{Re} (r_{pp} r_{ps}^* + r_{ss} r_{sp}^*) \sin \varphi \cos \varphi \quad (218)$$

$$T(\omega; \varphi) = \frac{\sqrt{\epsilon_2} \cos \theta_t}{\sqrt{\epsilon_1} \cos \theta} (|t_{pp}|^2 + |t_{sp}|^2) \cos^2 \varphi + (|t_{ps}|^2 + |t_{ss}|^2) \sin^2 \varphi + 2 \text{Re} (t_{pp} t_{ps}^* + t_{ss} t_{sp}^*) \sin \varphi \cos \varphi \quad (219)$$

donde $r_{pp}, r_{sp}, r_{ps}, r_{ss}, t_{pp}, t_{sp}, t_{ps}$ y t_{ss} son los coeficientes de Fresnel que dependen del tensor de conductividad, ϵ_1 y ϵ_2 son las constantes dieléctricas de los medios para los cuales nuestro sistema sirve de interfaz, φ es el ángulo de polarización, θ el ángulo de incidencia y θ_t el ángulo de refracción. Para el

caso de incidencia normal, los valores de los coeficientes de reflexión son

$$r_{pp} = \frac{\left(\sqrt{\epsilon_2} - \sqrt{\epsilon_1} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}{\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}, \quad (220)$$

$$r_{sp} = -\frac{\frac{8\pi}{c}\sigma_{yx}\sqrt{\epsilon_1}}{\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}, \quad (221)$$

$$r_{ps} = \frac{\frac{8\pi}{c}\sigma_{xy}\sqrt{\epsilon_1}}{\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}, \quad (222)$$

$$r_{ss} = \frac{\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} - \sqrt{\epsilon_2} - \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) + \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}{\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{xx}\right)\left(\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2} + \frac{4\pi}{c}\sigma_{yy}\right) - \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2\sigma_{xy}\sigma_{yx}}, \quad (223)$$

mientras que los de transmisión pueden obtenerse mediante

$$t_{pp} = 1 - r_{pp}, \quad (224)$$

$$t_{sp} = r_{sp}, \quad (225)$$

$$t_{ps} = -r_{ps}, \quad (226)$$

$$t_{ss} = 1 + r_{ss}. \quad (227)$$

Aunque la reflectividad de materiales bidimensionales suele ser muy pequeña, la anisotropía de estos sistemas puede ser medida utilizando espectroscopía de reflectancia y transmitancia (Frisenda et al., 2017). En esta técnica de caracterización se utiliza la cantidad

$$\frac{\Delta R}{R} = 2\frac{R_p - R_s}{R_p + R_s}, \quad (228)$$

donde $R_p = R(\omega; \varphi = 0)$ y $R_s = R(\omega; \varphi = \pi/2)$ son las reflectividades para incidencia normal de luz con polarización lineal p y s , respectivamente. En la Figura 18, se presenta $\Delta R/R$ para varias relaciones entre m_x y m_y . Aquí, se puede apreciar el aumento en la diferencia de las reflectividades cuando la frecuencia coincide con los valores dentro de la ventana de absorción. Además, se aprecia un aumento general cuando existe una mayor disparidad entre las masas efectivas.

La cantidad $\Delta R/R$ puede aprovecharse para caracterizar la anisotropía de los materiales bidimensionales de forma no invasiva. Su aplicación experimental en técnicas de espectroscopía de reflectancia permite obtener esta información sin requerir contacto directo, mediante la simple aplicación de luz.

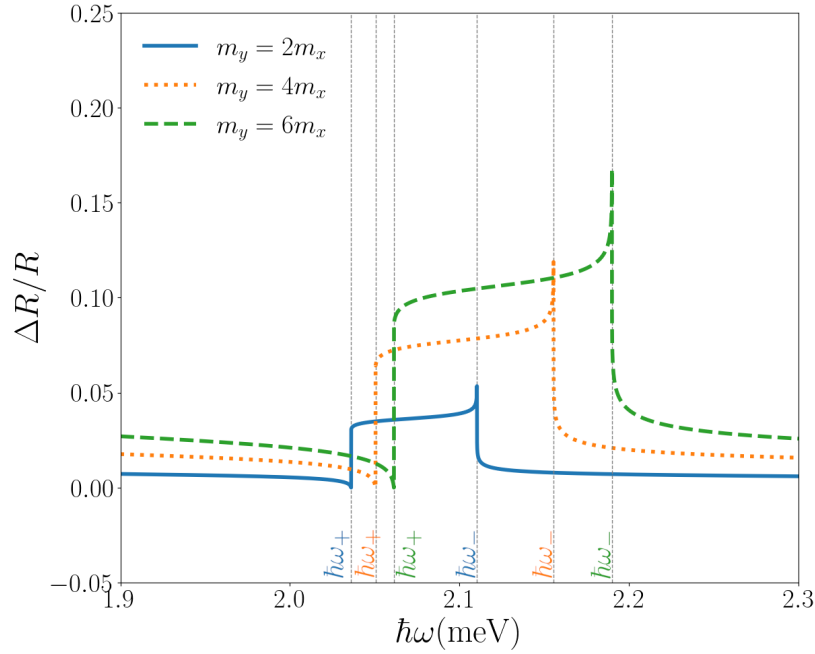


Figura 18. $\Delta R/R$ para un modelo anisotrópico de Rashba, donde $m_x = m_0$ y m_y toma distintos valores. Las constantes dieléctricas utilizadas son $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, $\Delta = 1\text{meV}$, $\varepsilon_F = 2\Delta$ y el resto de los parámetros son los mismos que en la figura 16.

5.1.5. Rotación de Kerr/Faraday

El rompimiento de simetría de inversión temporal, evidenciado por la aparición de una componente transversal no nula, permite la existencia de fenómenos magneto-ópticos como las rotaciones de Kerr y Faraday debido a la presencia de acoplamiento espín-órbita. Al considerar incidencia normal, el ángulo Kerr está dado por

$$\theta_K = \frac{1}{2} \arg \left(\frac{1 + i\chi_K}{1 - i\chi_K} \right), \quad (229)$$

donde $\chi_K \equiv E_y^r/E_x^r$ (Born et al., 1999; Visnovsky, 2006). Equivalentemente, puede ser expresado mediante

$$\tan 2\theta_K = \frac{\text{Im } z}{\text{Re } z}, \quad (230)$$

con $z \equiv (1 + i\chi_K)/(1 - i\chi_K)$. Si además, se toma el caso de luz polarizada en p o en s , esta expresión toma la forma

$$\tan 2\theta_K = \frac{2 \text{Re } \chi_K}{1 - |\chi_K|^2} \quad (231)$$

y

$$\chi_K = \begin{cases} -\frac{r_{sp}}{r_{pp}}, & \text{polarización en } p \\ \frac{r_{ps}}{r_{ss}}, & \text{polarización en } s \end{cases}. \quad (232)$$

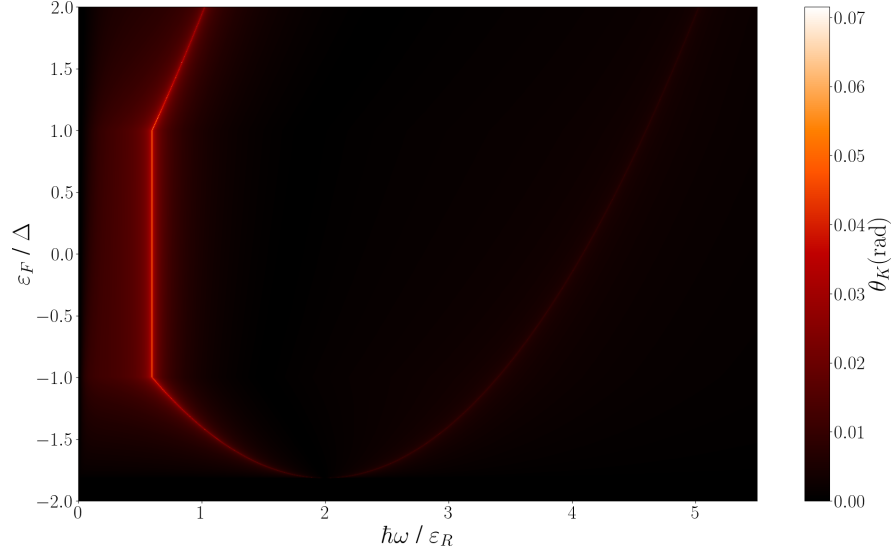


Figura 19. Ángulo de rotación Kerr en el modelo anisotrópico de Rashba con brecha energética. $\Delta = 0.3\epsilon_A$, las constantes dieléctricas utilizadas son $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, mientras el resto de los parámetros son los mismos que en la figura 17.

El ángulo de rotación Kerr puede observarse en el mapa de color de la figura 19. De forma análoga puede llegarse a la expresión del ángulo de rotación de Faraday para incidencia normal

$$\tan 2\theta_F = \frac{2 \operatorname{Re} \chi_F}{1 - |\chi_F|^2}, \quad (233)$$

donde

$$\chi_F = \begin{cases} \frac{t_{sp}}{t_{pp}}, & \text{polarización en } p \\ -\frac{t_{ps}}{t_{ss}}, & \text{polarización en } s \end{cases}. \quad (234)$$

Para destacar la relación entre estos fenómenos y la componente transversal de la conductividad, consideramos $|\chi_K| \ll 1$ y un ángulo pequeño, de modo que $\theta_{K/F} \approx \operatorname{Re} \chi_{K/F}$. Además, si tomamos $\epsilon_1 = 1$ y $\epsilon_2 = 2$, así como valores pequeños de $|\sigma_{ii}|/c$ y $(|\sigma_{xy}|/c)^2$ se tiene $\theta_{K/F}^p(\omega) \approx \theta_{K,F}^s(\omega)$ y las siguientes expresiones aproximadas:

$$\theta_K^s(\omega) \approx -\frac{8\pi \operatorname{Re} [\sigma_{xy}(\omega)/c]}{\epsilon_2 - 1 + 2\pi\alpha\sqrt{\epsilon_2}}, \quad (235)$$

$$\theta_F^s(\omega) \approx \frac{4\pi \operatorname{Re}[\sigma_{xy}(\omega)/c]}{\sqrt{\epsilon_2} + 1 + \pi\alpha}, \quad (236)$$

donde los índices p y s indican el tipo de polarización, se han utilizado valores de $\sigma_{ii}/c \approx \pi\sigma_0/4c = \alpha/4$ y α es la constante de estructura fina. Cabe destacar la relevancia de las diversas componentes del tensor de conductividad en la caracterización de las propiedades ópticas de materiales anisotrópicos. Por ejemplo, la anisotropía en las componentes longitudinales, $\sigma_{xx}(\omega) \neq \sigma_{yy}(\omega)$, resulta en dicroísmo lineal, mientras que la presencia de componentes Hall no nulas da lugar al dicroísmo circular. Además, las ecuaciones (235) y (236) demuestran que la parte real de la componente $\sigma_{xy}(\omega)$ proporciona una excelente aproximación de las rotaciones del plano de polarización de la luz.

5.2. Conductividad eléctrica en el segundo armónico

Al igual que con el primer sistema discutido, el modelo anisotrópico de Rashba no presenta una respuesta de segundo armónico de la conductividad de carga. Aún con el rompimiento de simetría de inversión temporal, matemáticamente, los resultados (196), (197) y

$$\left(\mathbf{d} \cdot \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_i} \right) = \alpha^2 \frac{m_d}{m_i} k_i, \quad (237)$$

arrojan únicamente integrandos con términos lineales y cúbicos en las componentes del vector de onda, esto es, $\sim k_i$ y $\sim k_i k_j k_k$. Esto ocasiona que al realizar las integrales en θ , la conductividad se anule debido a expresiones como (151) y (152).

5.3. Conductividad de espín a primer orden

Para obtener el tensor de conductividad de espín lineal para este sistema resultan útiles los resultados

$$\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right)_\ell = \alpha^2 \varepsilon_{\nu j z} k_\nu \delta_{\ell z} + \alpha \sqrt{\frac{m_d}{m_j}} \Delta (1 - \delta_{\ell z}) \quad (238)$$

y

$$\left[\left(\mathbf{d} \times \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial k_j} \right) \times \mathbf{d} \right]_{\ell} = \alpha^3 \sqrt{\frac{m_d}{m_j}} \varepsilon_{\nu j z} k_{\nu} k_j \delta_{\ell j} + \varepsilon_{\ell j z} \left(\alpha^3 \sqrt{\frac{m_d}{m_{\ell}}} k_{\ell}^2 + \alpha \Delta^2 \sqrt{\frac{m_d}{m_j}} \right) - \alpha^2 \Delta \frac{m_d}{m_j} k_j \delta_{\ell z}. \quad (239)$$

Sin embargo, debido a las integrales (266), únicamente sobreviven los términos proporcionales a $\delta_{\ell z}$, de modo que la expresión (86) puede escribirse para este caso particular como

$$\sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = \frac{e}{\hbar \omega} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{\alpha^2}{m_i / \hbar^2} \frac{k_i}{d} \frac{1}{(\hbar \tilde{\omega})^2 - (2d)^2} \left(\hbar \omega \varepsilon_{\nu j z} k_{\nu} - 2i \Delta \frac{m_d}{m_j} k_j \right) \delta_{\ell z}, \quad (240)$$

donde también se ha utilizado $\partial \varepsilon_0 / \partial k_i = \hbar^2 k_i / m_i$. Cambiando a coordenadas polares e integrando respecto a k y θ (ver integrales (251), (260), (261) y (262) en el anexo, finalmente se obtiene

$$\sigma_{ij}^{\ell}(\omega) = -\delta_{\ell z} \frac{e}{8\pi} \frac{1}{2\varepsilon_A} \left[\varepsilon_{ijz} - i \frac{m_d}{m_i} \left(\frac{2\Delta}{\hbar \tilde{\omega}} \right) \delta_{ij} \right] \left[A(\tilde{\omega}) + \frac{1}{2} \hbar (\omega_- - \omega_+) \right], \quad (241)$$

donde

$$A(x) = \frac{\hbar x}{4} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar x} \right)^2 \ln \left[\frac{(x + \omega_+)(x - \omega_-)}{(x - \omega_+)(x + \omega_-)} \right] \right]. \quad (242)$$

Cabe destacar que las corrientes de espín lineales generadas en este sistema tendrán únicamente electrones con polarización de espín perpendicular al plano. Esto es una consecuencia del rompimiento de simetría de inversión temporal inducido por el término $d_z = \Delta$. Las componentes longitudinales de esta conductividad (figura 20a) son proporcionales al parámetro Δ por lo que desaparecen para el caso sin brecha energética. Además, al igual que en la conductividad de carga, estas componentes diagonales son inversamente proporcionales a $\sqrt{m_i}$, de modo que, como consecuencia de la anisotropía de la masa, se tiene $m_x \sigma_{xx}^z = m_y \sigma_{yy}^z$. Por otra parte, las componentes fuera de la diagonal (figura 20b) son diferentes de cero sin importar el valor de Δ , señalando la presencia de un efecto Hall de espín en sistemas con o sin brecha de energía; la relación entre estas componentes es $\sigma_{xy}^{\ell}(\omega) = \sigma_{yx}^{\ell}(\omega)$. El efecto de la posición de la energía de Fermi con respecto a la brecha se manifiesta a través de las energías $\hbar \omega_{\pm}(\varepsilon_F)$, por lo que el cambio de ε_F lleva principalmente a un cambio en el ancho y posición de la ventana de absorción, de la misma forma que en la densidad conjunta de estados.

La corriente de espín puede expresarse con una componente paralela y otra perpendicular al campo

$\mathbf{E}_0(\omega)$ como

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^z(\omega; \varphi) = & \left[\sigma_{xx}^z(\omega) \cos^2 \varphi + \sigma_{yy}^z(\omega) \sin^2 \varphi \right] \mathbf{E}_0(\omega) \\ & + \left[\left(\sigma_{xx}^z(\omega) - \sigma_{yy}^z(\omega) \right) \sin \varphi \cos \varphi + \sigma_{xy}^z(\omega) \right] (\mathbf{E}_0(\omega) \times \hat{\mathbf{z}}), \end{aligned} \quad (243)$$

la cual se reduce a $\mathcal{J}^z(\omega; \varphi) = \sigma_{xy}^z(\omega) (\mathbf{E}_0(\omega) \times \hat{\mathbf{z}})$ cuando $\Delta = 0$. La expresión (243) sugiere la posibilidad de un control de la corriente de espín mediante la dirección del campo eléctrico externo determinada por el ángulo φ .

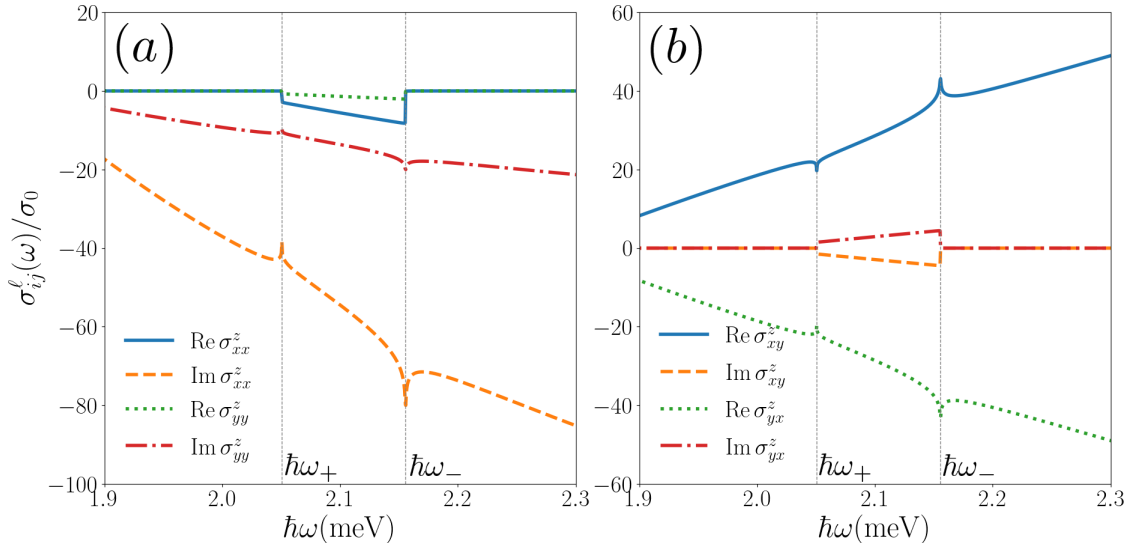


Figura 20. Componentes (a) longitudinales y (b) transversales del tensor de conductividad de espín $\sigma_{ij}^z(\omega)$ para el modelo anisotrópico de Rashba con brecha energética. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 17.

5.4. Segundo armónico de la conductividad de espín

Desde el punto de vista algebraico, nada sustancialmente diferente al caso lineal se lleva a cabo para obtener los tensores de conductividad de espín de segundo armónico, sin embargo, la longitud del desarrollo es considerablemente mayor. Por esta razón se omitirán las expresiones preliminares y bastará señalar que algunos resultados útiles para su obtención son (237), (238) y (239), mientras que las integrales necesarias se encuentran en el anexo. Las diferentes componentes del tensor resultantes son

$$\sigma_{ijj}^{\ell, (2\omega)}(\omega) = \delta_{\ell j} \varepsilon_{ijz} \frac{e^2/8\pi}{(\hbar\tilde{\omega})^2} \frac{1}{k_A} \left(\frac{m_d}{m_j} \right)^{1/2} F(\tilde{\omega}), \quad (244)$$

$$\sigma_{iii}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \frac{e^2/8\pi}{(\hbar\tilde{\omega})^2} \frac{1}{k_A} \left(\frac{m_d}{m_i}\right)^{3/2} \left\{ \varepsilon_{\ell iz} G(\tilde{\omega}) + 2i(1 - \delta_{\ell z}) \left(\frac{2\Delta}{\hbar\tilde{\omega}}\right) [A(\tilde{\omega}) - A(2\tilde{\omega})] \right\}, \quad (245)$$

$$\sigma_{iji}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \sigma_{ijj}^{\ell,(2\omega)}(\omega) = \frac{e^2/16\pi}{(\hbar\tilde{\omega})^2} \frac{1}{k_A} \left(\frac{m_d}{m_i}\right)^{1/2} \left\{ \delta_{\ell i} \varepsilon_{ijz} H(\tilde{\omega}) + 2i(1 - \delta_{\ell z}) \left(\frac{2\Delta}{\hbar\tilde{\omega}}\right) [A(\tilde{\omega}) - A(2\tilde{\omega})] \right\}, \quad (246)$$

donde $k_A = \varepsilon_A/\alpha = m_d\alpha/\hbar^2$, $A(x)$ está dada por (242) y

$$F(\tilde{\omega}) = \left\{ 1 + \frac{1}{4} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] \right\} A(\tilde{\omega}) - \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{2\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] A(2\tilde{\omega}) + \frac{1}{8}\hbar(\omega_- - \omega_+), \quad (247)$$

$$G(\tilde{\omega}) = \left\{ 1 - \frac{3}{4} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] \right\} A(\tilde{\omega}) - \left\{ 4 - 3 \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{2\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] \right\} A(2\tilde{\omega}) - \frac{3}{8}\hbar(\omega_- - \omega_+), \quad (248)$$

$$H(\tilde{\omega}) = \left\{ 2 - \frac{1}{2} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] \right\} A(\tilde{\omega}) - 2 \left\{ 2 - \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{2\hbar\tilde{\omega}}\right)^2 \right] \right\} A(2\tilde{\omega}) - \frac{1}{4}\hbar(\omega_- - \omega_+). \quad (249)$$

De estas expresiones se pueden derivar algunas conclusiones. En contraste a la respuesta lineal, se observa que no es posible generar una corriente de espín polarizada en la dirección z , es decir $\sigma_{ijk}^{z,(2\omega)} = 0$. Por otra parte, (245) muestra que si $\Delta = 0$ la componente longitudinal $\sigma_{iii}^{\ell,(2\omega)}(\omega)$ describe una corriente de espín con el espín orientado en dirección perpendicular al campo eléctrico y a la corriente, mientras que una corriente con espín orientado paralelamente al flujo y al campo es posible cuando $\Delta \neq 0$. Las componentes Hall $\sigma_{ijj}^{\ell,(2\omega)}(\omega)$, descritas por (244) generan corrientes de espín polarizadas siempre en dirección del campo y perpendicularmente al flujo independientemente de la presencia de una brecha de energía. En cuanto a las componentes (246), $\sigma_{iji}^{\ell,(2\omega)}(\omega)$ y $\sigma_{ijj}^{\ell,(2\omega)}(\omega)$, estas están asociadas a una corriente de segundo armónico con orientación de espín paralela al flujo cuando $\Delta = 0$, mientras que para $\Delta \neq 0$ dicha orientación no es fija.

La anisotropía de las masas se hace evidente en toda componente diferente de cero a través de un factor del tipo $(m_x/m_y)^{\pm\nu/4}$, con $\nu = 1$ o 3 . La figura 21 muestra la dependencia en la frecuencia de las componentes con polarización en el plano $\sigma_{ijl}^{x,(2\omega)}(\omega)$ y $\sigma_{ijl}^{y,(2\omega)}(\omega)$. Como era de esperar, la singularidades de Van Hove alrededor de $\hbar\omega_{\pm}$ están acompañadas ahora por unas nuevas en los subarmónicos $\hbar\omega_{\pm}/2$. La estructura general puede modificarse mediante la variación de la energía de Fermi, dado el comportamiento de las funciones $\hbar\omega_{\pm}(\varepsilon_F)$ observado en la figura 15.

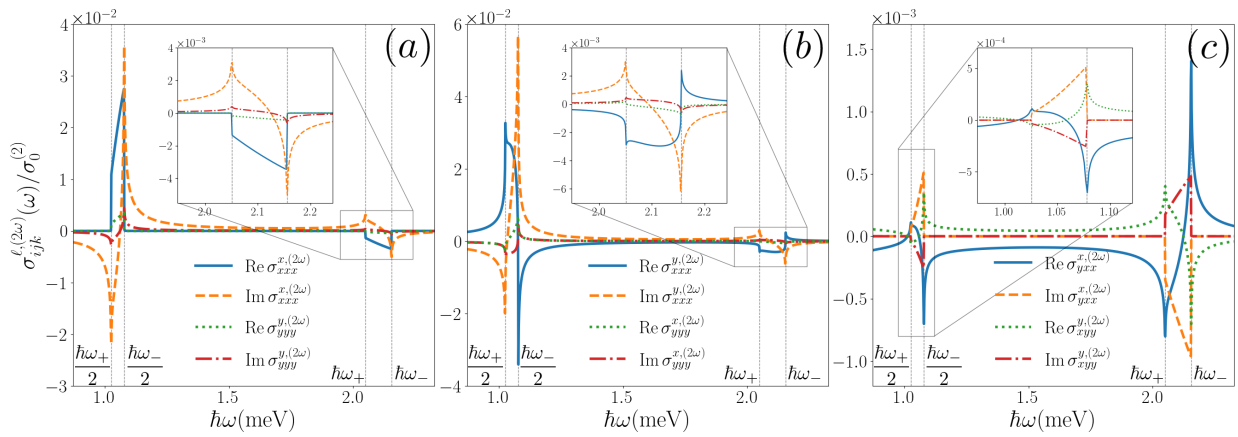


Figura 21. Tensor de la conductividad de espín de segundo armónico $\sigma_{ijk}^{\ell,(2\omega)}(\omega)$ para el modelo anisotrópico de Rashba con brecha de energía, que determina una corriente de espín con flujo en dirección i y espín polarizado en a lo largo de ℓ , inducida por las componentes j y l del campo eléctrico externo. (a) Componentes longitudinales con $i = j = l = \ell$. (b) Componentes longitudinales con $i = j = l \neq \ell$. (c) Componentes Hall con $i \neq j = l = \ell$. Los parámetros utilizados son los mismos que en la figura 17.

A continuación, se resumen los resultados más relevantes obtenidos en el transcurso de este capítulo que aborda el modelo anisotrópico de Rashba:

- La posición del nivel de Fermi en relación con la brecha energética afecta la definición de los contornos de Fermi y por lo tanto a las energías características y la ventana de absorción presente en la densidad conjunta de estados y las funciones respuesta.
- La anisotropía del sistema se manifiesta en las conductividades a través de factores que involucran la relación de las masas efectivas m_x/m_y y se hace evidente en la conductividad longitudinal con el dicroísmo lineal del modelo.
- La presencia de una brecha de energía en el sistema implica el rompimiento de simetría de inversión temporal, lo que provoca que las componentes Hall de la conductividad eléctrica lineal no se anulen y den lugar a fenómenos magneto-ópticos como las rotaciones de Kerr y Faraday, así como dicroísmo circular.
- El tensor de conductividad de espín de primer orden no presenta componentes longitudinales para el caso sin brecha de energía, es decir, el caso temporalmente simétrico.
- Las corrientes de espín generadas linealmente en el modelo anisotrópico de Rashba únicamente presentarán polarización de espín perpendicular al plano. En contraste, una corriente de espín de segundo armónico tendría solo polarización paralela al plano del gas.

- Aun cuando el parámetro Δ rompe la simetría de inversión temporal, esto no es suficiente para generar una respuesta de segundo armónico en la conductividad eléctrica.
- Las expresiones analizadas revelan diversas dependencias de las direcciones del flujo y de la polarización de la corriente de espín en función de factores como la dirección del campo eléctrico y la presencia de una brecha de energía tanto para los casos lineales y los correspondientes al segundo armónico.

Capítulo 6. Conclusiones

Se ha estudiado detalladamente las conductividades ópticas, tanto en respuesta lineal como de segundo armónico, vinculadas a la corriente eléctrica y de espín en dos sistemas anisotrópicos con acoplamiento espín-órbita. Los resultados resaltan el papel que desempeñan diferentes elementos en la determinación de propiedades espectrales y los efectos que tienen sobre los dos tipos de corriente. Entre estos factores se encuentran la frecuencia y dirección del campo externo perturbativo, la orientación cristalográfica, la inherente anisotropía del sistema y parámetros como los de acoplamiento espín-órbita tipo Rashba y tipo Dresselhaus, así como la presencia de una brecha energética y la posición del nivel de Fermi con respecto a ella. La comprensión detallada de estas dependencias proporciona un marco sólido para futuras investigaciones y aplicaciones tecnológicas donde dichos factores pueden ser hábilmente manipulados para generar y modular corrientes con características específicas, ofreciendo un enfoque prometedor para la ingeniería de materiales con propiedades eléctricas y de espín a medida.

Literatura citada

- Agarwal, A., Chesi, S., Jungwirth, T., Sinova, J., Vignale, G., y Polini, M. (2011). Plasmon mass and drude weight in strongly spin-orbit-coupled two-dimensional electron gases. *Physical Review B*, 83, 115135. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.115135>.
- Ahn, S. y Das Sarma, S. (2021). Theory of anisotropic plasmons. *Physical Review B*, 103, L041303. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L041303>.
- Akhtar, M., Anderson, G., Zhao, R., Alruqi, A., Mroczkowska, J. E., Sumanasekera, G., y Jasinski, J. B. (2017). Recent advances in synthesis, properties, and applications of phosphorene. *npj 2D Materials and Applications*, 1(1), 1–13. <https://doi.org/10.1038/s41699-017-0007-5>.
- Averkiev, N., Glazov, M., y Tarasenko, S. (2005). Suppression of spin beats in magneto-oscillation phenomena in two-dimensional electron gas. *Solid State Communications*, 133(8), 543–547. <https://doi.org/https://doi.org/10.1016/j.ssc.2004.12.005>.
- Badalyan, S. M., Matos-Abiague, A., Vignale, G., y Fabian, J. (2009). Anisotropic plasmons in a two-dimensional electron gas with spin-orbit interaction. *Physical Review B*, 79(20), 205305. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.79.205305>.
- Bercioux, D. y Lucignano, P. (2015). Quantum transport in Rashba spin-orbit materials: a review. *Reports on Progress in Physics*, 78(10), 106001. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/78/10/106001>.
- Bihlmayer, G., Noël, P., Vyalikh, D. V., Chulkov, E. V., y Manchon, A. (2022). Rashba-like physics in condensed matter. *Nature Reviews Physics*, 4(10), 642–659. <https://doi.org/10.1038/s42254-022-00490-y>.
- Biswas, T. y Ghosh, T. K. (2012). Zitterbewegung of electrons in quantum wells and dots in the presence of an in-plane magnetic field. *J. Phys. Condens. Matter*, 24(18), 185304. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/24/18/185304>.
- Blum, K. (2012). *Density matrix theory and applications*. Springer Science & Business Media.
- Born, M., Wolf, E., Bhatia, A. B., Clemmow, P. C., Gabor, D., Stokes, A. R., Taylor, A. M., Wayman, P. A., y Wilcock, W. L. (1999). *Principles of Optics: Electromagnetic Theory of Propagation, Interference and Diffraction of Light*. Cambridge University Press.
- Boyd, R. W. (2020). *Nonlinear Optics*, (4ta ed.). Elsevier.
- Bruus, H. y Flensberg, K. (2004). *Many-body quantum theory in condensed matter physics: an introduction*. Oxford University Press.
- Bychkov, Y. A. y Rashba, E. I. (1984). Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 17(33), 6039. <https://doi.org/10.1088/0022-3719/17/33/015>.
- Carvalho, A., Wang, M., Zhu, X., Rodin, A. S., Su, H., y Castro Neto, A. H. (2016). Phosphorene: from theory to applications. *Nature Reviews Materials*, 1(11), 1–16. <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.61>.
- Chen, J., Wu, K., Hu, W., y Yang, J. (2021). Spin-Orbit Coupling in 2D Semiconductors: A Theoretical Perspective. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 12(51), 12256–12268. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c03662>.

- Deyo, E., Golub, L. E., Ivchenko, E. L., y Spivak, B. (2009). Semiclassical theory of the photogalvanic effect in non-centrosymmetric systems. <https://doi.org/10.48550/arXiv.0904.1917>.
- Dresselhaus, G. (1955). Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures. *Physical Review*, 100(2), 580. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.100.580>.
- Du, Z. Z., Lu, H. Z., y Xie, X. C. (2021). Nonlinear Hall effects. *Nature Reviews Physics*, 3(11), 744–752. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00359-6>.
- Dyakonov, M. I. y Perel, V. I. (1971). Current-induced spin orientation of electrons in semiconductors. *Physics Letters A*, 35(6), 459–460. [https://doi.org/10.1016/0375-9601\(71\)90196-4](https://doi.org/10.1016/0375-9601(71)90196-4).
- Falkovsky, L. A. y Varlamov, A. A. (2007). Space-time dispersion of graphene conductivity. *The European Physical Journal B*, 56(4), 281–284. <https://doi.org/10.1140/EPJB/E2007-00142-3>.
- Frisenda, R., Niu, Y., Gant, P., Molina-Mendoza, A. J., Schmidt, R., Bratschitsch, R., Liu, J., Fu, L., Dumcenco, D., Kis, A., De Lara, D. P., y Castellanos-Gomez, A. (2017). Micro-reflectance and transmittance spectroscopy: a versatile and powerful tool to characterize 2D materials. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 50(7), 074002. <https://doi.org/10.1088/1361-6463/AA5256>.
- Ganichev, S. D., Danilov, S. N., Schneider, P., Bel'Kov, V. V., Golub, L. E., Wegscheider, W., Weiss, D., y Prettl, W. (2006). Electric current-induced spin orientation in quantum well structures. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 300(1), 127–131. <https://doi.org/10.1016/J.JMMM.2005.10.048>.
- Goldstein, H., Poole, C., y Safko, J. (1980). *Classical Mechanics*. Addison-Wesley.
- Gomes, L. C. y Carvalho, A. (2015). Phosphorene analogues: Isoelectronic two-dimensional group-IV monochalcogenides with orthorhombic structure. *Physical Review B*, 92(8), 085406. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.085406>.
- Gupta, A., Sakthivel, T., y Seal, S. (2015). Recent development in 2D materials beyond graphene. *Progress in Materials Science*, 73, 44–126. <https://doi.org/10.1016/J.PMATSCI.2015.02.002>.
- Hamamoto, K., Ezawa, M., Kim, K. W., Morimoto, T., y Nagaosa, N. (2017). Nonlinear spin current generation in noncentrosymmetric spin-orbit coupled systems. *Physical Review B*, 95(22), 224430. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.95.224430>.
- Il'inskii, Y. A. y Keldysh, L. V. (1994). *Electromagnetic Response of Material Media*. Springer US.
- Ivanov, V. I., Dugaev, V. K., Sherman, E. Y., y Barnaś, J. (2011). Nonlinear spin Hall effect in GaAs (110) quantum wells. *Physical Review B*, 84(8), 085326. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.085326>.
- Kammermeier, M., Wenk, P., y Schliemann, J. (2016). Control of Spin Helix Symmetry in Semiconductor Quantum Wells by Crystal Orientation. *Physical Review Letters*, 117(23), 236801. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.117.236801>.
- Kapri, P., Dey, B., y Ghosh, T. K. (2021). Role of Berry curvature in the generation of spin currents in Rashba systems. *Physical Review B*, 103(16), 165401. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165401>.
- Kato, Y. K., Myers, R. C., Gossard, A. C., y Awschalom, D. D. (2004). Observation of the Spin Hall Effect in Semiconductors. *Science*, 306(5703), 1910–1913. <https://doi.org/10.1126/SCIENCE.1105514>.

- Koo, H. C., Kwon, J. H., Eom, J., Chang, J., Han, S. H., y Johnson, M. (2009). Control of spin precession in a spin-injected field effect transistor. *Science*, 325(5947), 1515–1518. <https://doi.org/10.1126/science.1173667>.
- Koralek, J. D., Weber, C. P., Orenstein, J., Bernevig, B. A., Zhang, S. C., MacK, S., y Awschalom, D. D. (2009). Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. *Nature*, 458(7238), 610–613. <https://doi.org/10.1038/nature07871>.
- Kozulin, A. S. y Malyshev, A. I. (2019). General condition for realizing a collinear spin-orbit effective magnetic field in two-dimensional electron systems and its application to zinc-blende and wurtzite quantum wells. *Physical Review B*, 99(3), 035305. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.035305>.
- Kozulin, A. S., Malyshev, A. I., y Konakov, A. A. (2017). Persistent spin helices in 2D electron systems. *Journal of Physics: Conference Series*, 816(1), 012023. <https://doi.org/10.1088/1742-6596/816/1/012023>.
- 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. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.12.570>.
- Li, Z., Marsiglio, F., y Carbotte, J. P. (2013). Vanishing of interband light absorption in a persistent spin helix state. *Scientific Reports*, 3(1), 1–6. <https://doi.org/10.1038/srep02828>.
- Liu, C. X., Zhang, S. C., y Qi, X. L. (2016). The Quantum Anomalous Hall Effect: Theory and Experiment. *Annual Review of Condensed Matter Physics*, 7, 301–321. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031115-011417>.
- Ma, Q., Xu, S. Y., Shen, H., MacNeill, D., Fatemi, V., Chang, T. R., Mier Valdivia, A. M., Wu, S., Du, Z., Hsu, C. H., Fang, S., Gibson, Q. D., Watanabe, K., Taniguchi, T., Cava, R. J., Kaxiras, E., Lu, H. Z., Lin, H., ... , y Jarillo-Herrero, P. (2018). Observation of the nonlinear Hall effect under time-reversal-symmetric conditions. *Nature*, 565(7739), 337–342. <https://doi.org/10.1038/s41586-018-0807-6>.
- Mahan, G. D. (2000). *Many-Particle Physics*. Springer US.
- Manchon, A., Koo, H. C., Nitta, J., Frolov, S. M., y Duine, R. A. (2015). New perspectives for Rashba spin-orbit coupling. *Nature Materials*, 14(9), 871–882. <https://doi.org/10.1038/nmat4360>.
- Mas-Ballesté, R., Gómez-Navarro, C., Gómez-Herrero, J., y Zamora, F. (2011). 2D materials: to graphene and beyond. *Nanoscale*, 3(1), 20–30. <https://doi.org/10.1039/C0NR00323A>.
- 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. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.74.235313>.
- Mojarro, M. A., Carrillo-Bastos, R., y Maytorena, J. A. (2021). Optical properties of massive anisotropic tilted Dirac systems. *Physical Review B*, 103(16), 165415. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.165415>.
- Moore, J. E. y Orenstein, J. (2010). Confinement-induced berry phase and helicity-dependent photocurrents. *Physical Review Letters*, 105(2), 026805. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.026805>.

- Nagaosa, N., Sinova, J., Onoda, S., MacDonald, A. H., y Ong, N. P. (2010). Anomalous Hall effect. *Reviews of modern physics*, 82(2), 1539–1592. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1539>.
- Nitta, J., Akazaki, T., Takayanagi, H., y Enoki, T. (1997). Gate control of spin-orbit interaction in an inverted $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ heterostructure. *Physical Review Letters*, 78, 1335–1338. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.1335>.
- 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. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>.
- Pan, A. y Marinescu, D. C. (2019). Nonlinear spin-current generation in quantum wells with arbitrary Rashba-Dresselhaus spin-orbit interactions. *Physical Review B*, 99(24), 245204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.245204>.
- Parker, D. E., Morimoto, T., Orenstein, J., y Moore, J. E. (2019). Diagrammatic approach to nonlinear optical response with application to Weyl semimetals. *Physical Review B*, 99(4), 045121. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.99.045121>.
- Popović, Z. S., Kurdestany, J. M., y Satpathy, S. (2015). Electronic structure and anisotropic Rashba spin-orbit coupling in monolayer black phosphorus. *Physical Review B*, 92(3), 035135. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.92.035135>.
- 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(7), 075411. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.96.075411>.
- Sarkar, A. S. y Stratakis, E. (2020). Recent advances in 2d metal monochalcogenides. *Advanced Science*, 7(21), 2001655. <https://doi.org/10.1002/advs.202001655>.
- Schliemann, J. (2017). Colloquium: Persistent spin textures in semiconductor nanostructures. *Reviews of Modern Physics*, 89(1), 011001. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.89.011001>.
- Schliemann, J., Egues, J. C., y Loss, D. (2003). Nonballistic Spin-Field-Effect Transistor. *Physical Review Letters*, 90(14), 4. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.90.146801>.
- Schliemann, J., Loss, D., y Westervelt, R. M. (2006). Zitterbewegung of electrons and holes in III-V semiconductor quantum wells. *Physical Review B*, 73(8), 085323. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.085323>.
- Shen, S. Q., Ma, M., Xie, X. C., y Zhang, F. C. (2004). Resonant spin hall conductance in two-dimensional electron systems with a Rashba interaction in a perpendicular magnetic field. *Physical Review Letters*, 92(25 I), 256603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.256603>.
- Shen, Y. R. (1984). *Principles of nonlinear optics*. Wiley.
- Sih, V., Myers, R. C., Kato, Y. K., Lau, W. H., Gossard, A. C., y Awschalom, D. D. (2005). Spatial imaging of the spin Hall effect and current-induced polarization in two-dimensional electron gases. *Nature Physics*, 1(1), 31–35. <https://doi.org/10.1038/nphys009>.
- Sinitsyn, N. A., Hankiewicz, E. M., Teizer, W., y Sinova, J. (2004). Spin Hall and spin-diagonal conductivity in the presence of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling. *Physical Review B*, 70(8), 081312. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.081312>.

- Sinova, J., Culcer, D., Niu, Q., Sinitsyn, N. A., Jungwirth, T., y MacDonald, A. H. (2004). Universal intrinsic spin Hall effect. *Physical Review Letters*, 92(12), 126603. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.126603>.
- Sinova, J., Valenzuela, S. O., Wunderlich, J., Back, C. H., y Jungwirth, T. (2015). Spin Hall effects. *Reviews of modern physics*, 87(4), 1213–1260. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.87.1213>.
- Sodemann, I. y Fu, L. (2015). Quantum Nonlinear Hall Effect Induced by Berry Curvature Dipole in Time-Reversal Invariant Materials. *Physical Review Letters*, 115(21), 216806. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.115.216806>.
- Stauber, T., San-Jose, P., y Brey, L. (2013). Optical conductivity, Drude weight and plasmons in twisted graphene bilayers. *New Journal of Physics*, 15(11), 113050. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/15/11/113050>.
- Stern, F. (1967). Polarizability of a Two-Dimensional Electron Gas. *Physical Review Letters*, 18(14), 546. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.18.546>.
- Sun, Z., Yi, Y., Song, T., Clark, G., Huang, B., Shan, Y., Wu, S., Huang, D., Gao, C., Chen, Z., McGuire, M., Cao, T., Xiao, D., Liu, W. T., Yao, W., Xu, X., y Wu, S. (2019). Giant nonreciprocal second-harmonic generation from antiferromagnetic bilayer CrI₃. *Nature*, 572(7770), 497–501. <https://doi.org/10.1038/s41586-019-1445-3>.
- Sundaram, G. y Niu, Q. (1999). Wave-packet dynamics in slowly perturbed crystals: Gradient corrections and Berry-phase effects. *Physical Review B*, 59(23), 14915. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.14915>.
- Trescher, M., Sviderski, B., Brouwer, P. W., y Bergholtz, E. J. (2015). Quantum transport in Dirac materials: Signatures of tilted and anisotropic Dirac and Weyl cones. *Physical Review B*, 91(11), 115135. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.115135>.
- Visnovsky, S. (2006). *Optics in magnetic multilayers and nanostructures*. CRC Press.
- Wehling, T. O., Black-Schaffer, A. M., y Balatsky, A. V. (2014). Dirac materials. *Advances in Physics*, 63(1), 1–76. <https://doi.org/10.1080/00018732.2014.927109>.
- Wei, Y., Wang, S., Pang, K., Xu, X., Ngeywo, T. K., Ying, T., Yang, J., Li, X., Li, W., Jiang, Y., y Tian, W. Q. (2021). Giant and anisotropic second harmonic generation of V–V binary phosphorene derivative with permanent dipole. *Journal of Materials Chemistry C*, 9(20), 6544–6552. <https://doi.org/10.1039/D0TC05607C>.
- Winkler, R. (2003). *Spin—Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*. Springer.
- Wunderlich, J., Kaestner, B., Sinova, J., y Jungwirth, T. (2005). Experimental observation of the spin-hall effect in a two-dimensional spin-orbit coupled semiconductor system. *Physical Review Letters*, 94(4), 047204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.047204>.
- Yang, Z. K., Wang, J. R., y Liu, G. Z. (2018). Effects of Dirac cone tilt in a two-dimensional Dirac semimetal. *Physical Review B*, 98(19), 195123. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.195123>.
- Žutić, I., Fabian, J., y Sarma, S. D. (2004). Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of modern physics*, 76(2), 323. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.76.323>.

Anexo

En este anexo se muestran las integrales necesarias para obtener los tensores de conductividad del modelo anisotrópico de Rashba, tanto las correspondientes a k , como las respectivas a θ . Debido a que el procedimiento es muy similar, solamente se indican los pasos intermedios para una de cada tipo, mientras que se omitirán para el resto.

Comenzando por los integrandos referentes al vector de onda, se observa que presentan factores que pueden ser separados mediante fracciones parciales, por ejemplo

$$\frac{1}{d(k)} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d)^2} = \frac{1}{(\hbar\omega)^2} \left[\frac{1}{d(k)} + \frac{1}{\hbar\omega - 2d(k)} - \frac{1}{\hbar\omega + 2d(k)} \right],$$

donde $d(k) = \sqrt{\alpha^2 k^2 g^2(\theta) + \Delta^2}$, de modo que las integrales se descomponen en otras más sencillas como

$$\int dk \frac{k}{d(k)} \quad \text{y} \quad \int dk \frac{k}{\hbar\omega \pm 2d(k)}.$$

Estas integrales pueden resolverse fácilmente mediante cambios de variable como $u = d(k)$ y $v = \hbar\omega \pm 2d(k)$, de manera que

$$\begin{aligned} \int \frac{k}{d(k)} &= \frac{1}{\alpha^2 g^2(\theta)} \int du \\ &= \frac{u}{\alpha^2 g^2(\theta)}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int dk \frac{k}{\hbar\omega \pm 2d(k)} &= \frac{1}{4\alpha^2 g^2(\theta)} \int dv \left(1 - \frac{\hbar\omega}{v} \right) \\ &= \frac{1}{4\alpha^2 g^2(\theta)} (v - \ln|v|), \end{aligned}$$

y, por lo tanto,

$$\int dk \frac{k}{d(k)} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(k))^2} = \frac{1}{4\alpha^2 g^2(\theta)} \frac{1}{\hbar\omega} \ln \left| \frac{\hbar\omega + 2d(k)}{\hbar\omega - 2d(k)} \right|. \quad (250)$$

Las demás integrales de interés están dadas por

$$\int dk \frac{k^3}{d(k)} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(k))^2} = \frac{1}{4\alpha^4 g^4(\theta)} \left\{ \frac{\hbar\omega}{4} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{\hbar\omega + 2d(k)}{\hbar\omega - 2d(k)} \right| - d(k) \right\}, \quad (251)$$

$$\int dk \frac{k^3}{d^3(k)} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(k))^2} = \frac{1}{4\alpha^4 g^4(\theta)} \left\{ \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{1}{d(k)} + \frac{1}{\hbar\omega} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right] \ln \left| \frac{\hbar\omega + 2d(k)}{\hbar\omega - 2d(k)} \right| \right\}, \quad (252)$$

$$\int dk \frac{k^5}{d^3(k)} \frac{1}{(\hbar\omega)^2 - (2d(k))^2} = \frac{1}{4\alpha^6 g^6(\theta)} \left\{ \frac{\hbar\omega}{4} \left[1 - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \right]^2 \ln \left| \frac{\hbar\omega + 2d(k)}{\hbar\omega - 2d(k)} \right| - d(k) - \left(\frac{2\Delta}{\hbar\omega} \right)^2 \frac{\Delta^2}{d(k)} \right\}. \quad (253)$$

Se ha omitido la constante de integración por simplicidad, además de que en el cálculo de los tensores de conductividad se toman en cuenta límites de integración.

Se dirige ahora la atención a las integrales en el ángulo θ . Al igual que la integral en (158) para el GE2D crecido a lo largo de una dirección arbitraria, las integrales angulares encontradas en el modelo anisotrópico de Rashba pueden resolverse analíticamente en el plano complejo. Es posible escribir

$$g^2(\theta) = A + B \cos 2\theta + C \sin 2\theta, \quad (254)$$

donde

$$A = \frac{1}{2} \left(\frac{m_d}{m_x} + \frac{m_d}{m_y} \right)$$

$$B = \frac{1}{2} \left(\frac{m_d}{m_x} - \frac{m_d}{m_y} \right)$$

$$C = 0.$$

De este modo, una integral como

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)}$$

puede escribirse como

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{A + B \cos 2\theta + C \sin 2\theta} &= 2 \int_0^{\pi} \frac{d\theta}{A + B \cos 2\theta + C \sin 2\theta} \\ &= \int_0^{2\pi} d\theta \frac{1 + \cos \theta}{A + B \cos \theta + C \sin \theta}, \end{aligned}$$

donde se han hecho los cambios de variable $\theta \rightarrow \theta' = \theta - \pi$ y $\theta \rightarrow \theta' = 2\theta$. Ahora, utilizando las definiciones exponenciales $\sin \theta = (e^{i\theta} - e^{-i\theta})/2i$, $\cos \theta = (e^{i\theta} + e^{-i\theta})/2$ y considerando $z = e^{i\theta}$ se tiene

$$\frac{1}{2} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{A + B \cos \theta + C \sin \theta} = \frac{1}{i(B - iC)} \oint_C \frac{dz}{(z - z_-)(z - z_+)}, \quad (255)$$

donde la integral de línea es sobre el círculo unitario C ,

$$z_{\pm} = -\frac{A \mp \sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}}{B^2 + C^2} (B + iC) \quad (256)$$

son los polos del integrando, de los cuales z_+ reside dentro del círculo, mientras z_- se encuentra fuera. Por lo tanto, esta integral angular, así como las otras que surgen en el cálculo de los tensores de conductividad, pueden resolverse fácilmente mediante la fórmula de diferenciación de Cauchy

$$f^{(n)}(a) = \frac{n!}{2\pi i} \oint_{\gamma} \frac{f(z)}{(z-a)^{n+1}} dz, \quad (257)$$

de modo que

$$\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{g^2(\theta)} = \frac{2\pi}{\sqrt{A^2 - (B^2 + C^2)}} \quad (258)$$

$$= 2\pi, \quad (259)$$

pues en nuestro caso $C = 0$ y $A^2 - B^2 = 1$. Los resultados de algunas otras integrales necesarias son

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen}^2 \theta}{g^4(\theta)} = \pi \frac{m_d}{m_x} = \pi \sqrt{\frac{m_y}{m_x}}, \quad (260)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{cos}^2 \theta}{g^4(\theta)} = \pi \frac{m_d}{m_y} = \pi \sqrt{\frac{m_x}{m_y}}, \quad (261)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen} \theta \text{cos} \theta}{g^4(\theta)} = 0, \quad (262)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{cos}^4 \theta}{g^6(\theta)} = \frac{3\pi}{4} \frac{m_x^2}{m_d^2} = \frac{3\pi}{4} \frac{m_x}{m_y}, \quad (263)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen}^4 \theta}{g^6(\theta)} = \frac{3\pi}{4} \frac{m_y^2}{m_d^2} = \frac{3\pi}{4} \frac{m_y}{m_x}, \quad (264)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen}^2 \theta \text{cos}^2 \theta}{g^6(\theta)} = \frac{\pi}{4}, \quad (265)$$

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen}^3 \theta}{g^4(\theta)} = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{cos}^3 \theta}{g^4(\theta)} = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen}^2 \theta \text{cos} \theta}{g^4(\theta)} = \int_0^{2\pi} d\theta \frac{\text{sen} \theta \text{cos}^2 \theta}{g^4(\theta)} = 0. \quad (266)$$