

## Dispersión dependiente del espín de paquetes de ondas de huecos en hilos cuánticos

R. Cuan, L. Diago-Cisneros<sup>a</sup>

Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba. [rcuan@fises.fisica.uh.cu](mailto:rcuan@fises.fisica.uh.cu),

a) Departamento de Física Aplicada, Facultad de Física, Universidad de La Habana. Cuba. [ldiago@fisica.uh.cu](mailto:ldiago@fisica.uh.cu).

Recibido el 25/05/10. Aprobado en versión final el 08/09/10.

**Sumario.** Se estudia la dispersión de un paquete de huecos en el régimen de bandas desacopladas, en presencia de interacción espín-órbita tipo Rashba, en un sistema semiconductor cuasi-unidimensional. Para la descripción de la evolución temporal de paquetes de onda gaussianos de huecos espín-polarizados, bajo acoplamiento espín-órbita tipo Rashba, usamos el método de diferencias finitas. Tal como esperábamos, se observa el desdoblamiento de los coeficientes de transmisión, respecto del caso en que no hay efecto Rashba. En este límite, nuestros resultados coinciden con las predicciones teóricas ampliamente conocidas. Se verifica la regla probabilística que deben satisfacer los coeficientes de dispersión resueltos por el espín. Mostramos el fenómeno de precesión del espín a través de la simulación de la variación de sus componentes. Adicionalmente se muestra la evolución temporal del proceso de dispersión del paquete de huecos, bajo efecto Rashba para casos particulares de la energía incidente.

**Abstract.** We study scattering processes for holes, in the presence of Rashba spin orbit interaction, through quasi-one-dimensional semiconductor systems in the absence of band mixing. The corresponding Schrödinger equation was numerically solved by finite differences method describing the holes with a spin-polarized Gaussian wave-packet. For finite Rashba effect, we have obtained a different behavior of the kinetic coefficients as expected. For the case when Rashba coupling is disregarded, our results agree with widely known theoretical predictions. Spin-resolved dispersion coefficients follow the standard probabilistic rule. The spin vector precession phenomenon was simulated, *via* the analysis of its components variation. In addition we show a time-line of the dispersion process under Rashba effect for particular cases of the incoming energy.

**Palabras clave.** spin-orbit coupling 71.70.Ej, spin polarized transport in semiconductors 72.25.Dc, spin field effect transistors 85.75.Hh.

### 1 Introducción

El reciente interés en el espín del electrón y su manipulación ha abierto un campo de investigación de frontera en las nanociencias, denominado Espintrónica.

La inyección de electrones espín-polarizados en semiconductores, fue propuesta en el estudio del tunelaje usando electrodos ferromagnéticos<sup>1</sup>. Sin embargo, no fue hasta 1992 que se observó el tunelamiento de electrones

espín-polarizados de un ferromagnético (*Ni*) a un semiconductor (*GaAs*)<sup>2</sup>, comprobándose que la inyección de espín en semiconductores era en efecto posible. En 1999 fue demostrado que los electrones espín-polarizados pueden mantener su coherencia a escalas de tiempos de nanosegundos en el *GaAs*<sup>3</sup> lo que implica desplazamientos del orden de un centenar de micras.

Uno de los mecanismos físicos de mayor interés, y recurrentes para la manipulación de las corrientes de

electrones con espines polarizados, es el acoplamiento del momento magnético intrínseco de los electrones con su grado de libertad traslacional. En 1984, Y. A. Bychkov y E.I. Rashba<sup>4</sup> establecieron un modelo que describe apropiadamente el acoplamiento mencionado, esto es, la interacción espín-órbita (SOI: *spin-orbit interaction*, en inglés), que tiene su origen en la asimetría de inversión estructural (SIA: *structure inversion asymmetry*, en inglés). Este fenómeno es ampliamente conocido como "efecto Rashba", y es el responsable del desdoblamiento en el vector de onda de los estados de espín, en gases electrónicos bidimensionales, confinados por potenciales con un gradiente finito en su perfil.

Entre las formas para crear gases cuasi-bidimensionales (Q2D: *quasi-two-dimensional*, en inglés), se utiliza el *dopaje modulado*. Una vez que las impurezas aceptoras, de Si liberan huecos en la capa de AlAs, (vea Fig.1(a)), estos migran hacia el material intrínseco (GaAs), cuyo borde de la banda de valencia, se encuentra más bajo en energía respecto del material dopado (vea Fig.1(b)). Como resultado, tendremos un potencial triangular que confina al gas Q2D de huecos en la dirección z. Por otro lado, las cargas desequilibradas remanentes en el material dopado, son fuente de un campo eléctrico efectivo externo  $\vec{F}$ , colineal con el eje z (vea Fig.1(b)). Este se deriva de la SIA y se Lorentz transforma en un campo magnético efectivo<sup>5</sup>  $\vec{B}_{\text{eff}}$ . El campo  $\vec{B}_{\text{eff}} \sim \alpha[\vec{k} \times \vec{F}]$ , aparece como efecto relativista sobre un portador de carga con vector de onda  $\vec{k}$ , moviéndose en el campo  $\vec{F}$ , producto del acoplamiento SOI, y con independencia de la velocidad de los portadores en el material<sup>6</sup>. La acción  $\vec{B}_{\text{eff}}$ , sobre el espín de los portadores de carga confinados -que es menos obvia-, es en esencia el efecto SOI tipo Rashba (SOI-R), cuya fortaleza se representa por  $\alpha$  -que es una constante de acoplamiento dependiente del material-, conocida como parámetro de Rashba<sup>5</sup>.

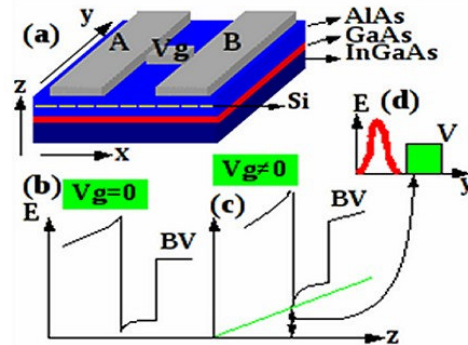
Algunos autores coinciden en opinar que, restringir la distribución angular de los portadores a un canal cuasi-unidimensional (Q1D: *quasi-one-dimensional*, en inglés), lleva a mejores resultados en la modulación de las corrientes de electrones con espín polarizado<sup>7</sup>. Muy recientemente, G. Bonfanti y L. Diago-Cisneros, aplicaron la inecuación de Heisenberg de tiempo y energía, al estudio de la evolución temporal de un paquete electrónico en un canal Q1D con SOI-R<sup>8</sup>, simulando un transistor de efecto de campo de espín<sup>9</sup> (SFET: *spin field effect transistor*, en inglés).

El modelo SOI-R para sistema Q2D de electrones está bien establecido en la literatura. Para sistemas Q-2D de huecos la situación es más complicada por la degeneración cuádruple de los estados  $\Gamma_8$  de valencia<sup>5</sup>. En 2005 A. Wong y F. Mireles<sup>10</sup>, utilizando el formalismo de la teoría  $\kappa \cdot p$  de masa efectiva dentro de la aproximación de la función envolvente y los modelos de Kane y Kohn-Luttinger extendido, obtuvieron la forma explícita de los

hamiltonianos que describen el SOI-R en huecos. En el caso de los huecos el fuerte acoplamiento SOI y la mezcla de bandas, implican un tiempo de relajación del espín más corto con respecto a los electrones, que puede ser compensado por una corta longitud de precesión, es decir, una SOI-R más eficiente<sup>11</sup>.

Se han reportado aplicaciones importantes de los huecos en la Espintrónica, sin embargo son pocos los estudios dedicados al transporte cuántico en presencia de interacción espín-órbita tipo Rashba. El propósito de este trabajo, es la simulación de los procesos dispersivos de paquetes de onda de huecos espín-polarizados, bajo SOI-R, y el análisis del comportamiento de los coeficientes de dispersión en sistemas Q1D.

Las partes restantes de este trabajo se han organizado como sigue: En la sección 2 se presenta el sistema físico y el experimento ideal que se ha visualizado. Más adelante se presenta brevemente el formalismo teórico y el método numérico que se va a implementar para el estudio de la dispersión del paquete de huecos. Finalmente, la sección 3 está dedicada a las conclusiones.



**Figura 1.** (a) Sistema físico. (b) Esquema del perfil de la banda de valencia. (c) Modificación del perfil de la banda de valencia en la zona del electrodo Vg. (d) Gedanken experiment.

## 2 Desarrollo teórico

**2.1 Sistema Físico.** Considérese una heteroestructura semiconductor III-V donde uno de sus compuestos se ha dopado tipo p, i.e. (Si)AlAs/GaAs/InGaAs (ver Fig.1 (a)). Un esquema del perfil de la banda de valencia (BV) se muestra en la Fig.1 (b). En el mínimo de energía que se forma debido al dopaje (interfaz de la heterojuntura AlAs/GaAs) queda confinado un gas de huecos Q2D en la dirección de crecimiento, dirección z, pero libre en el plano perpendicular [xy]. Para llevar este sistema a un gas de huecos cuasi-unidimensional (Q1DHG: *quasi-one-dimensional hole gas*, en inglés) se colocan dos barras metálicas A y B (potenciales repulsivos) sobre la heteroestructura, de manera que los huecos queden confinados en la dirección x (ver Fig.1 (a)). Tendremos entonces un sistema tipo hilo cuántico a lo largo de la dirección y (dirección de movimiento) cuya sección transversal se encuentra en el plano [xz]<sup>12,13,14</sup>.

Si a la mitad del sistema se coloca un tercer electrodo

Vg (ver Fig.1 (a)), el campo eléctrico modificará localmente el perfil de la banda de valencia como se muestra en la Fig.1 (c), de manera que los huecos encuentran un obstáculo dispersor, en su travesía a lo largo del hilo cuántico. En el presente estudio, simulamos el efecto de la manipulación electrostática (voltaje de compuerta Vg) del parámetro de Rashba, a través de una barrera de potencial estacionario (ver Fig.1 (d)) en la dirección de movimiento<sup>8</sup>.

En términos generales, cualquier modelo SOI, se puede derivar de la ecuación de Dirac tomando en cuenta los efectos relativistas hasta el orden  $(v/c)^2$ . Tal aproximación, conduce al término de Pauli que se describe por el hamiltoniano SOI<sup>5,15</sup>:

$$\hat{H}_{\text{SOI}} = \frac{\hbar}{(2m_0c)^2} \hat{\sigma} \cdot (\nabla V(r) \times \hat{p}), \quad (1)$$

donde  $m_0$  es la masa del electrón libre,  $V(r)$  es el potencial coulombiano del corazón atómico, considerando que la partícula es el electrón ligado al átomo de hidrógeno,  $\sigma$  es el vector de las matrices de Pauli y  $\hat{p}$  es el operador momentum. La ec.(1), representa la forma analítica más genérica de la SOI atómica<sup>5</sup>. Al llevar esta aproximación a un sólido cristalino constituido por átomos, llegamos a un acoplamiento SOI "efectivo" debido a la SIA, en el caso de los semiconductores tipo zincblenda y wurtzita.

La SOI-R es consecuencia de la asimetría del potencial de confinamiento debido al dopaje en la heteroestructura (ver Fig.1 (b) y (c)), lo que implica un gradiente de potencial distinto de cero -genéricamente expresado en la ec.(1)-, en la dirección  $z$  a lo largo de todo el hilo cuántico, siendo más fuerte en la zona donde se encuentra el electrodo Vg (ver Fig.1 (c)). El confinamiento debido a las barras metálicas A y B podemos considerarlo simétrico (parabólico o cuadrado), por lo que no constituye fuente de SOI-R<sup>12</sup>.

En resumen, los huecos se moverán en un hilo cuántico (canal Q1D) bajo SOI-R a lo largo de la dirección  $y$ , siendo adicionalmente dispersados por un obstáculo durante su travesía a través del canal Q1D (ver Fig.1 (d)). Para modelar este sistema físico, que se corresponde a un SFET tipo Datta-Das<sup>9</sup>, proponemos el siguiente *gedanken experiment*: simulamos paquetes de ondas gaussianos de huecos -en régimen de bandas desacopladas-, en el fondo de un pozo cuántico infinito de longitud  $L$  (dirección  $y$ ) con  $\alpha = 0$ , que son emitidos por una fuente y posteriormente inyectados con cierta polarización del espín, sin considerar explícitamente la fuente emisora y el mecanismo de inyección de los paquetes espín-polarizados<sup>8,16</sup>. A continuación, modelamos la propagación y posterior incidencia de paquetes QIDHG espín-polarizados, sobre una barrera de potencial estacionario  $V$ , de espesor  $W$  con  $\alpha \neq 0$ , que dispersa la corriente de probabilidad de flujo incidente. La intensidad de la SOI-R (valor de  $\alpha$ ), se manipula electrostáticamente mediante el electrodo Vg<sup>17,18</sup>.

**2.2 Modelo teórico.** Para la descripción de la dinámica de los huecos usaremos el modelo  $\kappa\mathbf{p}$  de Kohn-

Luttinger (KL) despreciando la mezcla de huecos (vector de onda transversal  $\kappa_T = 0$ )<sup>19</sup>:

$$\hat{H}_{\text{KL}}^{\text{hh}} = B_{\text{hh}} \hat{k}_y^2 + V(y) \quad \hat{H}_{\text{KL}}^{\text{lh}} = B_{\text{lh}} \hat{k}_y^2 + V(y), \quad (2)$$

donde  $B_{\text{hh}} = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)$ ,  $B_{\text{lh}} = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2)$  y  $V(y)$

es el potencial estacionario de interacción en la dirección de movimiento (barrera de potencial en la Fig.1 (d)).

La parte correspondiente a la SOI-R en el caso de huecos ligeros y pesados la derivamos a partir de los términos obtenidos por Wong y Mireles<sup>10</sup>:

$$\hat{H}_{\text{R}}^{\text{hh}} = -i\alpha_{\text{hh}} \left[ \frac{\hat{k}_-^2}{\hat{k}_+} \sigma_+ - \frac{\hat{k}_+^2}{\hat{k}_-} \sigma_- \right] - i\beta_{\text{hh}} \left[ \hat{k}_-^3 \sigma_+ - \hat{k}_+^3 \sigma_- \right],$$

$$\hat{H}_{\text{R}}^{\text{lh}} = i\alpha_{\text{lh}} \left[ \hat{k}_- \sigma_+ - \hat{k}_+ \sigma_- \right] \text{ con: } \begin{cases} \hat{k}_{\pm} = (\hat{k}_x \pm i\hat{k}_y) \\ \sigma_{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y) \end{cases}.$$

Tomando la aproximación para altas concentraciones<sup>10</sup> (para  $n \geq 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  el término lineal en  $\hat{k}$  es dominante en  $\hat{H}_{\text{R}}^{\text{hh}}$ ) las expresiones anteriores llevadas al caso Q1D quedan:

$$\hat{H}_{\text{R}}^{\text{hh}} = \alpha_{\text{hh}} \sigma_x \hat{k}_y \quad \hat{H}_{\text{R}}^{\text{lh}} = \alpha_{\text{lh}} \sigma_x \hat{k}_y. \quad (3)$$

El parámetro  $\alpha$ , además de depender del material, es diferente para cada especie de huecos<sup>10</sup>.

El hamiltoniano total para huecos pesados y ligeros estará dado entonces por:

$$\hat{H}^{\text{hh/lh}} = \begin{pmatrix} B_{\text{hh/lh}} \hat{k}_y^2 + V(y) & \alpha_{\text{hh/lh}} \hat{k}_y \\ \alpha_{\text{hh/lh}} \hat{k}_y & B_{\text{hh/lh}} \hat{k}_y^2 + V(y) \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Nótese que ambos hamiltonianos tienen la misma forma por lo que en lo adelante obviaremos los índices hh/lh.

En la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\hat{H} |\Psi(y, t)\rangle = \frac{i\hbar \partial}{\partial t} |\Psi(y, t)\rangle, \quad (5)$$

donde  $|\Psi(y, t)\rangle$  es un espinor de la forma

$$|\Psi(y, t)\rangle = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

el hamiltoniano  $\hat{H}$  no depende explícitamente del tiempo, por tanto la ecuación de evolución temporal es:

$$|\Psi(y, t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}} |\Psi(y, t_0)\rangle. \quad (7)$$

Procedemos ahora a resolver el sistema de ecuaciones en diferencias finitas.

**2.3 Ecuación de Shrödinger en diferencias finitas.** Para pasar a diferencias finitas, discretizamos los términos de la ecuación de onda. La ecuación de evolución temporal (10) toma la forma:

$$\Psi_j^{n+1} = e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t H_j^n} \Psi_j^n, \quad (8)$$

con  $y \rightarrow j\delta y$  y  $t \rightarrow n\delta t$  para todo  $j=0,1,2,\dots,J$  y  $n=0,1,2,\dots,N$  donde  $\delta y$  y  $\delta t$  representan el ancho de las particiones, siendo  $J$  y  $N$  el número total de particiones en el espacio y tiempo, respectivamente. Sustituimos

el operador de evolución temporal por la aproximación de Cayley<sup>20</sup>:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\delta t H_j^n} \approx \left( \frac{2}{I_2 + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} H_j^n} - I_2 \right), \quad (9)$$

siendo  $I_2$  la matriz identidad (2x2). Sustituyendo la expresión (12) en (11) tenemos:

$$\Psi_j^{n+1} = \frac{2}{I_2 + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} H_j^n} \Psi_j^n - \Psi_j^n. \quad (10)$$

Reescribamos la expresión anterior como:

$$\Psi_j^{n+1} = \Phi_j^{n+1} - \Psi_j^n, \quad (11)$$

donde hemos definido la función auxiliar  $\Phi_j^{n+1}$  como:

$$\Phi_j^{n+1} = \frac{2}{I_2 + \frac{i}{2} \frac{\delta t}{\hbar} H_j^n} \Psi_j^n. \quad (12)$$

La expresión (11) significa que teniendo  $\Psi_j^n$  ( $\Psi_j^0$  es la condición inicial en diferencias finitas) y calculando la función auxiliar  $\Phi_j^{n+1}$ , podemos obtener la función de onda en el instante posterior  $\Psi_j^{n+1}$ .

Para calcular  $\Phi_j^{n+1}$  reescribamos (12) como:

$$2 \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{pmatrix}_j^n = \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}_j^{n+1} + \frac{i\delta t}{2\hbar} H_j^n \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}_j^{n+1}. \quad (13)$$

Puesto que el hamiltoniano del sistema (4) no es diagonal, la expresión (13) supone un sistema de ecuaciones acopladas en las variables  $\Phi_1$  y  $\Phi_2$  debido a la SOI-R. Para desacoplar el sistema proponemos el cambio de variables:

$$\Upsilon_j^{n+1} = \mathbf{U} \Phi_j^{n+1} \text{ con : } \mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Sustituyendo en (13) y premultiplicando por  $\mathbf{U}$  queda:

$$2\mathbf{U}\Psi_j^n = \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger \Upsilon_j^{n+1} + \frac{i\delta t}{2\hbar} \mathbf{U}H_j^n \mathbf{U}^\dagger \Upsilon_j^{n+1}. \quad (15)$$

Teniendo en cuenta que  $\mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = I_2$  y

$$\mathbf{U}H_j^n \mathbf{U}^\dagger = \begin{pmatrix} B\hat{k}_y^2 + V + \alpha\hat{k}_y & 0 \\ 0 & B\hat{k}_y^2 + V - \alpha\hat{k}_y \end{pmatrix}_j,$$

podemos escribir el sistema de ecuaciones (13), ahora desacoplado en la nueva variable, esto es:

$$\sqrt{2} (\Psi_1 + \Psi_2)_j^n = \Upsilon_{1j}^{n+1} + \frac{i\delta t}{2\hbar} \left\{ -B \left[ \frac{\partial^2 \Upsilon_1}{\partial y^2} \right]_j^{n+1} + V_j^n \Upsilon_{1j}^{n+1} - i\alpha \left[ \frac{\partial}{\partial y} \Upsilon_1 \right]_j^{n+1} \right\}, \quad (16)$$

$$\sqrt{2} (\Psi_1 - \Psi_2)_j^n = \Upsilon_{2j}^{n+1} + \frac{i\delta t}{2\hbar} \left\{ -B \left[ \frac{\partial^2 \Upsilon_2}{\partial y^2} \right]_j^{n+1} + V_j^n \Upsilon_{2j}^{n+1} + i\alpha \left[ \frac{\partial}{\partial y} \Upsilon_2 \right]_j^{n+1} \right\}. \quad (17)$$

Se ha sustituido la forma explícita del operador cuasimomentum  $\hat{k}_y = -i \frac{\partial}{\partial y}$ . Las expresiones entre corchetes,

representan los operadores diferenciales en diferencias finitas que se pueden obtener desarrollando en serie de Taylor  $\Upsilon$  en un entorno de  $j+1$  y  $j-1$ , sumando o restando convenientemente y despreciando los términos mayores que  $\delta y^2$ :

$$\left[ \frac{\partial^2 \Upsilon_{1,2}}{\partial y^2} \right]_j^{n+1} = \frac{1}{\delta y^2} (\Upsilon_{1,2(j+1)}^{n+1} + \Upsilon_{1,2(j-1)}^{n+1} - 2\Upsilon_{1,2j}^{n+1}) \quad (18a)$$

$$\left[ \frac{\partial \Upsilon_{1,2}}{\partial y} \right]_j^{n+1} = \frac{1}{\delta y} (\Upsilon_{1,2(j+1)}^{n+1} - \Upsilon_{1,2j}^{n+1}). \quad (18b)$$

Las ecuaciones diferenciales (16)-(17) se transforman, con ayuda de (18), en ecuaciones algebraicas recurrentes. Es fácil obtener  $\Upsilon_{j+1}^{n+1}$  en función de  $\Upsilon_j^{n+1}$  y  $\Psi_j^{n+1}$  teniendo en cuenta que  $\Psi_0^n = 0$  es una de las condiciones de frontera de la caja infinita donde se encuentra el sistema y  $\Upsilon_0^{n+1} = 0$  de las expresiones (12) y (14). Conociendo  $\Upsilon_j^{n+1} \forall j$  podemos recuperar  $\Phi_j^{n+1}$  con la transformación inversa  $\mathbf{U}^\dagger$  y hacer evolucionar el sistema a partir de (11).

**2.4 Resultados numéricos.** Considerando que tenemos –por cada especie de huecos–, una ecuación algebraica recurrente para cada componente del espino  $|\Psi(y, t)\rangle$ , es posible evaluarlas por separado.

Si definimos  $\xi$  como el vector de polarización, para las condiciones iniciales y de frontera en la caja de dimensión  $L$  tendremos lo siguiente:

$$|\Psi(y, 0)\rangle = \sqrt{\frac{2\pi}{\Delta y}} e^{\frac{(y-y_0)^2}{2\Delta y^2}} e^{ik_y(y-y_0)} \xi \quad (19)$$

$$|\Psi(0, t)\rangle = |\Psi(L, t)\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (20)$$

Con las expresiones en diferencias de las condiciones (19)-(20), aplicadas a las ecuaciones (16)-(17) y posteriormente a (11), encontramos entonces el espino  $\Psi_j^n$  para todo tiempo y posición, que no es más que la solución del problema planteado.

Los resultados que mostramos a continuación corresponden al caso de huecos pesados para una concentración  $n_s = 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  lo que equivale a un valor de  $\alpha_{hh} = 0.4 \text{ eV}\text{\AA}$ , este valor depende en general de la concentración de portadores y del voltaje aplicado en Vg. El caso de huecos ligeros exhibe un comportamiento similar, menos

marcado por la SOI-R debido a que  $\alpha_{lh}=0.0019 \text{ eV\AA}$  a la misma concentración y no lo mostramos en el presente artículo. De tomarse otro valor del parámetro de Rashba, se declara en la figura correspondiente. Los restantes parámetros usados son: espesor de la barrera  $W = 15 \text{ \AA}$ , potencial de la barrera  $V= 0.3 \text{ eV}$  –lo asumimos arbitrariamente<sup>8</sup>-, longitud del sistema  $L=1200 \text{ \AA}$ , y polarización del paquete incidente  $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ .

Para el caso de un flujo de partículas –donde no se ha considerado el espín-, que se propaga desde el infinito con energía  $E$ , interactuando posteriormente con una barrera de potencial rectangular  $V$ , el coeficiente de transmisión se obtiene como<sup>15</sup>:

$$D(E) = \begin{cases} \left[ 1 + \frac{V^2}{4E(E-V)} \sin^2(2ka) \right]^{-1} & (E > V) \\ \left[ 1 + \frac{V^2}{4E(V-E)} \sinh^2(2ka) \right]^{-1} & (E < V) \end{cases}, \quad (21)$$

$$\text{donde } k = (2m|E-V|/\hbar)^{1/2}.$$

Por otro lado en nuestro modelo, los coeficientes de transmisión ( $D$ ) y reflexión ( $R$ ) para cada componente del paquete ( $\Psi_1$  y  $\Psi_2$ ) son calculados a partir de las expresiones:

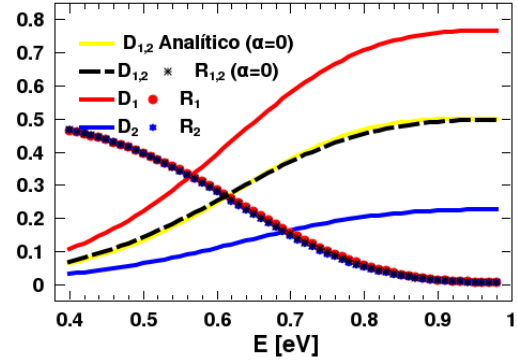
$$D_{1,2} = \frac{\int_{x_R+W}^L |\Psi_{1,2}(x, t = \infty)|^2 dx}{\int_0^L |\Psi_1(x, t = 0)|^2 + |\Psi_2(x, t = 0)|^2 dx}, \quad (22)$$

$$R_{1,2} = \frac{\int_0^{x_R} |\Psi_{1,2}(x, t = \infty)|^2 dx}{\int_0^L |\Psi_1(x, t = 0)|^2 + |\Psi_2(x, t = 0)|^2 dx}, \quad (23)$$

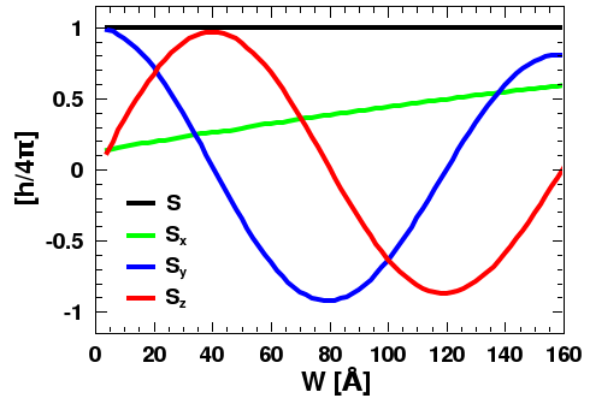
donde  $t = \infty$  implica considerar un tiempo tal que, el paquete se haya alejado suficientemente de la barrera.

En aras de validar nuestro modelo en el límite cuando no existe SOI-R ( $\alpha = 0$ ), hacemos una comparación en la Fig.2, entre los coeficientes de transmisión (21), caso: analítico (línea continua amarilla) y (22), caso: numérico (línea discontinua negra), donde las expresiones correspondientes han sido evaluadas en el límite de  $\alpha = 0$ . Se puede observar, que nuestros resultados ajustan bien al caso descrito por (21), el rango seleccionado de parámetros. Si consideramos ahora  $\alpha \neq 0$ , podemos observar que el coeficiente de transmisión se comporta diferente para cada componente del espinor (6):  $D_1$  corresponde a la componente  $\Psi_1$  (línea continua roja) y  $D_2$  corresponde a la componente  $\Psi_2$  (línea continua azul). Esto sólo puede ser causado por el desdoblamiento en el vector de onda de los estados de espín, y no debe ser interpretado como un proceso de filtro de espín del potencial dispersor bajo SOI-R. El *gedanken experiment* que analizamos, no presupone rupturas de simetrías para condicionar el mencionado efecto. Por otro lado, sobre

bases generales, se conoce que  $\Psi_1 \neq \Psi_2$  bajo  $\alpha \neq 0$ ,<sup>21</sup> por tanto en nuestro caso es de esperar que  $D_1 \neq D_2$ , en el rango analizado de la energía incidente. Aunque no lo mostramos aquí, hemos observado que el mismo comportamiento, se evidencia para los coeficientes de reflexión ( $R_1 \neq R_2$ ), bajo otros valores de  $\alpha$ . Es importante señalar que  $D_{1,2}$  y  $R_{1,2}$  fueron calculadas independientemente a partir de (22) y (23), respectivamente -y como era de esperar-, comprobamos que satisfacen correctamente la regla probabilística  $D_1 + D_2 + R_1 + R_2 \equiv 1$ , como reflejo de la ley de conservación del flujo de probabilidades.



**Figura 2.** Coeficientes de transmisión  $D_{1,2}$  y reflexión  $R_{1,2}$  en función de la energía  $E$  del paquete incidente para cada componente ( $\Psi_1$  y  $\Psi_2$ ) del espinor, con  $W = 15 \text{ \AA}$ ,  $V= 0.3 \text{ eV}$ ,  $L=1200 \text{ \AA}$ ,  $\xi = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ .



**Figura 3.** Valor esperado de las componentes del espín en función del espesor de la barrera (zona con SOI-R). Potencial de la barrera  $V=0.3 \text{ eV}$ , energía del paquete incidente  $0.5 \text{ eV}$ ,  $L=1200 \text{ \AA}$ , y  $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ . Nótese que  $S = \sqrt{S_x^2 + S_y^2 + S_z^2} \equiv \hbar/2$

Consideramos útil tener una idea del proceso de precesión del espín durante la transmisión a través de la barrera. Ese es el propósito de la Fig.3, donde mostramos el valor esperado de cada una de las componentes del espín, en función del espesor de la barrera  $W$ , calculado a través de las expresiones:

$$S_i = \frac{\hbar}{2} \langle \Psi | \sigma_i | \Psi \rangle \quad \text{con: } i = x, y, z. \quad (24)$$



La polarización inicial  $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ , es en realidad

la autofunción normalizada, correspondiente a uno de los autovalores  $\langle \Psi | \sigma_y | \Psi \rangle = \pm i$ , a lo largo de la dirección positiva del eje  $y$ . En este caso –dado que no se toman otras contribuciones al vector  $\vec{S}$ –, la componente  $S_y$  es máxima en el instante inicial, y está dirigida en el sentido de propagación del Q1DHG (dirección positiva del eje  $y$  (vea la Fig.4). La configuración de la polarización inicial, cambia a medida que el paquete evoluciona en la barrera, como resultado de la precesión del espín. La simulación de este proceso, se muestra en la Fig.4.

En la Fig.3, es evidente que la amplitud de la componente  $S_x$  (línea azul) aumenta con el espesor de la barrera, mientras que las amplitudes de las componentes  $S_y$  (línea verde) y  $S_z$  (línea roja) oscilan amortiguadamente. Lo anterior sugiere una precesión del espín en torno al eje  $x$ , que se corresponde adecuadamente con la orientación de campo magnético efectivo  $\vec{B}_{\text{eff}}$ . El proceso de precesión del espín, se observa claramente en la Fig.4, donde se ha simulado la evolución de la orientación del vector  $\vec{S}$  –dado por las componentes que se muestran en la Fig.3–, en la medida que cambiamos el espesor de la barrera.

En la Fig. 5 mostramos los cuatro instantes relevantes de  $|\Psi_{1,2}|^2$  –usualmente considerados en la literatura–,<sup>22</sup> para simular la evolución temporal (*time-line*) del paquete Q1DHG a través de un hilo cuántico, en el marco del *gedanken experiment* enunciado anteriormente. Mostramos los casos de transmisión ( $E > V$ ) y tunelaje ( $E < V$ ), siendo  $E$  la energía del paquete incidente. Las líneas discontinuas (color rojo) corresponden a la componente  $\Psi_1$  mientras que las líneas continuas (color azul) corresponden a la componente  $\Psi_2$ . Nótese que en ambos casos, luego de la interacción con la barrera con  $\alpha \neq 0$ , los paquetes transmitidos exhiben claramente el desdoblamiento por efecto de la SOI-R, no siendo así para los paquetes reflejados. Aunque no lo mostramos aquí, hemos observado evidencias del desdoblamiento producto de la SOI-R para los paquetes reflejados, bajo una selección deferente de los parámetros considerados.

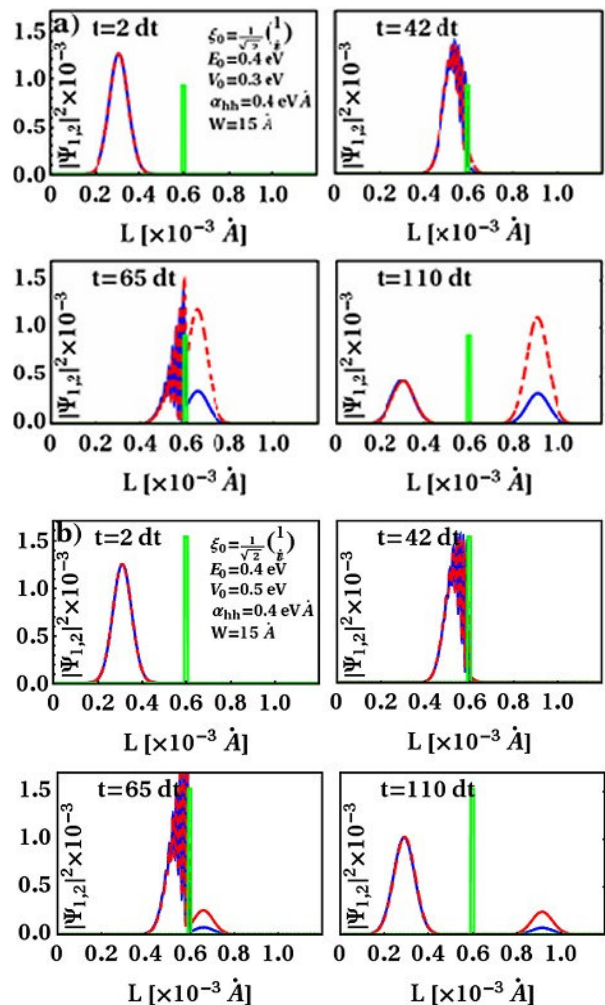
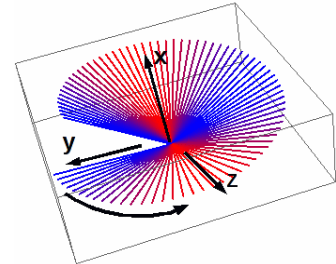
### 3 Conclusiones

En el presente trabajo presentamos un modelo para el régimen de bandas desacopladas, que describe la dispersión de huecos a lo largo de un hilo cuántico, en presencia de interacción espín-orbita tipo Rashba seccionalmente localizada.

El método de simulación numérica empleado, ajusta bien con resultados analíticos conocidos, en el límite cuando no existe efecto Rashba. Al considerar este último con un valor finito en una sección del hilo cuántico, observamos –tal como esperábamos–, el desdoblamiento de los coeficientes de transmisión y verificamos que se sa-

tisface la ley de conservación del flujo de probabilidades. Es posible una percepción más detallada del fenómeno de precesión del espín, durante la transmisión a lo largo del canal Q1D, a través del análisis de la variación de los valores esperados de sus componentes. Conjeturamos que este proceso, se puede asociar al comportamiento de los coeficientes cinéticos de las componentes de los espinoros.

**Figura 4.** Simulación de la precesión del vector  $\vec{S}$ , cuyas componentes se muestran en la Fig.3.



**Figura 5.** *Time line* del  $|\Psi_{1,2}|^2$  correspondiente a un paquete Q1DHG en el marco del *gedanken experiment* bajo estudio, para huecos pesados sin mezcla de bandas. (a) Transmisión ( $E > V$ ). (b) Tunelaje ( $E < V$ ). Particiones de la red temporal  $dt = 2$  fs.

En el presente estudio no consideramos la contribución cúbica al hamiltoniano Rashba para huecos pesados,<sup>5,10</sup> ni la mezcla de las sub-bandas de huecos pesados y ligeros –que aún no ha sido incluida en los modelos teóricos actuales. Nuestra percepción, es que esta fenomenología podría implicar modificaciones relevantes a la transmisión bajo SOI-R, y por tanto los huecos serían candidatos atractivos en la implementación de un SFET u otro dispositivo que funcione bajo el mismo principio. El trabajo futuro está orientado en esa dirección.

## Referencias

1. D. R. Scifres, B. A. Huberman, R. M. White, and R. S. Bauer, "A new scheme for measuring itinerant spin polarizations", *Solid State* 13, 1615 (1973).
2. S. F. Alvarado y P. Renaud, "Observation of spin-polarized-electron tunneling from a ferromagnet into GaAs", *Phys. Rev. Lett.* 68, 1387 (1992).
3. D. D. Awschalom, M. E. Flatté, "Challenges for semiconductor spintronics", *Nature* 3, 153 (2007).
4. Y. A. Bychkov y E. I. Rashba, "Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carrier in inversion layers", *J. Phys C* 17, 6039 (1984).
5. Roland Winkler, "Spin-orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems", Springer-Verlag, Heidelberg, Berlin 2003.
6. I. A. Shelykh, N. G. Galkin, and N. T. Bagraev, "Quantum splitter controlled by Rashba spin-orbit coupling", *Phys. Rev. B* 72, 235316 (2005).
7. A. Bornel, P. Dollfus, P. Bruno, P. Hesto, "Spin-dependent transport phenomena in a HEMT", *Physica B* 272, 331 (1999).
8. G. Bonfanti "Inecuación de Heisenberg entre tiempo y energía: Interpretaciones, Falacias y Aplicaciones", Cap. 3, tesis de Ingeniería Física, Universidad Iberoamericana-Facultad de Física UH (2008).
9. S. Datta y B. Das, "Electronic analog of the electro-optic modulator", *Appl. Phys. Lett.* 56, 665, (1990).
10. A. Wong López, Acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras semiconductoras, Tesis de Maestría en Ciencias e Ingeniería de Materiales, UNAM-Ensenada, (2005).
11. M. G. Pala, M. Governale, J. König and U. Zülicke, "Universal Rashba spin precession of two-dimensional electrons and holes", *Europhys. Lett.* 65, 850 (2004).
12. A. V. Moroz and C. H. W. Barnes, "Effect of the spin-orbit interaction on the band structure and conductance of quasi-one-dimensional systems", *Phys. Rev. B* 60, 14272 (1999).
13. F. Mireles and G. Kirczenow, "Ballistic spin-polarized transport and Rashba spin precession in semiconductor nanowires", *Phys. Rev. B* 64, 24426 (2001).
14. J. Schliemann, C. Egues and D. Loss, "Variational study of the  $\nu=1$  quantum Hall ferromagnet in the presence of spin-orbit interaction", *Phys. Rev. B* 67, 085302 (2003).
15. M. de Dios Leyva, "Mecánica Cuántica", Editorial Felix Varela, La Habana, 2006.
16. L. Diago-Cisneros and F. Mireles, "Spin interference in quantum rings manipulated with quantum points contact" in March Meeting Proc., Pittsburgh, USA (2009).
17. S. J. Papadakis, E. P. De Poortere, H. C. Manoharan, M. Shayegan, R. Winkler, "The Effect of Spin Splitting on the Metallic Behavior of a Two-Dimensional System", *Science* 283, 2056 (1999).
18. J. Nitta, T. Akasaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, "Conductance properties in spin field-effect transistors", *Phys. Rev. Lett.* 78, 1335 (1997).
19. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez, "Hole subband structure in semiconductor quantumwell revisited", *Rev. Mex. Fis.* 46, 337 (2000).
20. A. Goldberg, H. M. Schey, "Computer-generated motion picture of one-dimensional quantum-mechanical transmission and reflection phenomena", *Am. J. Phys.* 35, 177 (1967).
21. D. I. Blokhintsev, "Quantum Mechanics", Editorial Combinado Poligráfico E.R. Curbelo, La Habana Cuba, 1986.
22. P. Pereyra, H. Simanyuntak, "Time evolution of electromagnetic wave packets through superlattices: Evidence for superluminal velocities", *Phys. Rev. E* 75, 05660 (2007).