



UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Departamento Física

Efectos de la interacción espín-órbita en impurezas hidrogenoides en semiconductores

Tesis presentada para optar al título de Doctor de la Universidad de
Buenos Aires en el área de Física

Ober Lizardo Hernández Rosero

Director de Tesis: Dr. **Pablo Ignacio Tamborenea**

Director Asistente: Dr. **Juan Ignacio Melo**

Consejero de Estudios: Dr. **Diego Wisniacki**

Lugar de Trabajo: Departamento de Física, FCEyN, UBA

Buenos Aires, 2019

*A mi Familia y
en especial afecto a **Rosa Rosero, Manuel Hernández[†] y Fabricio Cominotto***

“Nada en la vida es para ser temido, es sólo para ser comprendido. Ahora es el momento de entender más, de modo que podamos temer menos”. Marie Curie (1867 - 1934)

Agradecimientos

A través de estas líneas quiero expresar mi más sincero agradecimiento a todas las personas que con su soporte científico y humano han colaborado en la realización de este trabajo de investigación. A todos aquellos que han contribuido a la culminación de ésta tesis doctoral.

En primer lugar, quiero agradecer al doctor **Pablo Tamborenea**, mi más amplio agradecimiento por haber sido mi director de tesis, y mi maestro desde hace varios años. Fue el primero que creyó en este proyecto, me apoyó de manera personal e institucional y me alentó para que concluyera esta investigación. Por su invaluable tiempo, esfuerzo y paciencia ante mi inconsistencia, además de su dedicación y apoyo por esclarecer dudas en el plano científico. Sus conocimientos en el campo de la investigación han sido imprescindibles para llevar a término el presente trabajo. También por las innumerables charlas de ámbito social no tan académico, haciendo que cada reunión me enriquecieran aún más en la formación. Trabajar con él ha sido más que enriquecedor y gratificante.

En segundo lugar a mi director asistente de tesis, doctor **Juan Melo**, por ser un apoyo fundamental en sus críticas constructivas y hacer de las charlas y recomendaciones un espacio de disertación y de conocimiento. Por la acertada orientación, el soporte y discusión crítica que me permitió un buen aprovechamiento en éste trabajo realizado, y que ésta tesis llegara a su buen término. Gracias por su excelente paciencia y por las respuestas a las preguntas y por las preguntas a las respuestas.

A mi familia, todo esto nunca hubiera sido posible sin el amparo incondicional que me otorgaron y el cariño que me inspiraron. A todos y cada uno de mis hermanos por su imponderable e incondicional apoyo, tantas veces necesario. Que a pesar de la distancia siempre estuvieron a mi lado para saber cómo iba mi proceso. Por estar presente en los momentos más importantes desde la distancia y entendieron mis ausencias y mis malos momentos. A mi madre **Rosa**, por su amor incondicional, por enseñarme la disciplina de hacer las cosas. A mi Padre **Manuel**, porque aunque ya hace parte de este universo maravilloso, su templanza y tenacidad para hacer las cosas han sido su mayor legado. Las palabras nunca serán suficientes para testimoniar mi aprecio y mi agradecimiento.

A mis amigos, por ser parte esencial en el proceso de formación y de esta aventura, que en muchas ocasiones son el sostén emocional, quienes, con su mirada crítica por fuera del plano ortodoxo de la academia, brindaron un especial estímulo en este proceso. A *Claudia Marcela*, una mujer admirable por su temple y calidez humana, que me enseñó que una sonrisa puede ser la mejor forma de comenzar el día, tiene la capacidad de convertir los pequeños detalles en grandes momentos. A *María Magdalena*, una amiga y cómplice, una compañera de estudios desde que comenzamos esta aventura, proceso que nunca terminará, una confidente como ninguna otra, donde una pequeña charla a cualquier hora es un motivo de alegría. A *Pablo Javier*, por el apoyo incondicional, por su amistad verdadera, por sus consejos y comentarios, y porque el final de ésta tesis se debe en gran parte a su apoyo total, gracias por estar ahí!

Quiero agradecer de manera especial a la universidad de Buenos Aires (UBA) y al departamento de Física (FCEyN), por brindarme el espacio y el lugar de investigación. Por último, al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), por la ayuda financiera recibida; a los proyectos. UBACYT 2014-2017 y CONICET PIP.

A todos ustedes, mi mayor reconocimiento y gratitud!

Efectos de la interacción espín-órbita en impurezas hidrogenoides en semiconductores

Resumen

En esta tesis estudiamos los efectos de la interacción espín-órbita en los estados electrónicos de impurezas hidrogenoides en materiales semiconductores con estructuras cristalinas zincblenda y wurtzita. Nos concentramos en los niveles de energía de la capa $n = 2$. Para ambos tipos de materiales tenemos en cuenta la interacción espín-órbita intrínseca (o de *Dresselhaus*) y extrínseca (o de *Rashba*). Los cálculos de los niveles de energía de las impurezas se realizan en toda esta tesis mediante las aproximaciones de función envolvente (*envelope-function approximation* o EFA).

En primer lugar, estudiamos el efecto de la interacción intrínseca o de Dresselhaus de la banda de conducción para la estructura zincblenda, cuyo Hamiltoniano es cúbico en k . En este caso mostramos que los elementos de matriz del Hamiltoniano de Dresselhaus en los estados de la impureza hidrogenoide se anulan debido a la simetría del material y la paridad de las funciones de onda. En consecuencia, la interacción espín-órbita intrínseca en las redes zincblenda no contribuye a la energía de la capa $n = 2$ de las impurezas.

En segundo lugar consideramos la interacción extrínseca o de Rashba, que es análoga a la interacción espín-órbita en el átomo de hidrógeno y es debida al potencial Coulombiano de la impureza donora. Las correcciones a primer orden de la energía de la capa $n = 2$ de la impureza hidrogenoide se hacen mediante un cálculo análogo al desarrollado en las correcciones de espín-órbita en el átomo de hidrógeno. Los parámetros de

radio efectivo a^* y de la constante de acoplamiento efectiva λ^* , característicos de cada material, son los relevantes para el análisis de las energías. La interacción extrínseca produce correcciones no nulas al nivel de energía; y por lo tanto para este tipo de estructuras cristalinas sólo hay correcciones a la energía del nivel $n = 2$ debidas a este tipo de interacción espín-orbita.

Luego hacemos un análisis similar para semiconductores tipo wurtzita. En primer lugar estudiamos la interacción intrínseca, la cual, además de un término cúbico en k (de diferente forma que el de zincblenda), presenta uno lineal, propio de la wurtzita. Para este caso, a diferencia de la zincblenda, sí se encuentran correcciones a la energía debido a la interacción espín-órbita intrínseca. En segundo lugar consideramos la interacción espín-órbita extrínseca de Rashba. Las correcciones a primer orden de la energía de la capa $n = 2$ de la impureza hidrogenoide, también se hacen mediante un cálculo análogo al anterior; es decir al de la zincblenda. La diferencia en este caso es que la constante efectiva de acoplamiento, λ^* , para este tipo de estructuras cristalinas no estaba desarrollada; por lo que desarrollamos en esta tesis una expresión para esta constante de acoplamiento, que es muy importante para el cálculo de las energías. Para ello seguimos el procedimiento basado en la transformación de Foldy-Wouthuysen, análogo al utilizado en la literatura para semiconductores de tipo zincblenda; y obtenemos una ecuación efectiva, restringida a la banda de conducción, para los estados del electrón en presencia de la impureza. De ese modo, pudimos encontrar una expresión para la constante de acoplamiento λ^* para la wurtzita y utilizando esta expresión calculamos las contribuciones a la energía del nivel $n = 2$, debida a la interacción espín-órbita extrínseca.

Por último, después de haber analizado los splittings de energía causados por las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca por separado, estudiamos la situación real en la que ambas interacciones se presentan juntas para obtener una descripción completa del problema. Se observa, que, debido a la combinación de las interacciones, hay un mayor rompimiento de la degeneración, además de correcciones mayores que en los casos anteriores a la energía del nivel $n = 2$.

Palabras claves: Impureza hidrogenoide, interacción espín-órbita, interacción intrínseca y extrínseca, semiconductores tipo zincblenda y wurtzitas, método $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$, modelo de Kane.

Effects of the spin-orbit interaction on hydrogenic impurities in semiconductors

Abstract

In this thesis we study the effects of the spin-orbit interaction in the electronic states of hydrogenic impurities in semiconducting materials with zincblende and wurtzite crystal structures. We concentrate on the energy levels of the $n = 2$ shell. For both types of materials we take into account the intrinsic (or *Dresselhaus*) and the extrinsic (or *Rashba*) spin-orbit interactions. The calculations of the energy levels of the impurities are done throughout this thesis in the *envelope function approximations* (EFA).

First, we study the effect of the intrinsic or Dresselhaus interaction of the conduction band for the zincblende structure, whose Hamiltonian is cubic in k . In this case we show that the matrix elements of the Dresselhaus Hamiltonian in the states of the hydrogenic impurity are canceled out due to the symmetry of the material and the parity of the wave functions. Consequently, the intrinsic spin-orbit interaction in the zincblende lattice is shown not to contribute to the energy of the $n = 2$ shell of the impurities.

Secondly, we consider the extrinsic or Rashba interaction, which is analogous to the spin-orbit interaction in the hydrogen atom and is related to the Coulomb potential of the donor impurity. The first-order corrections to the energy of the shell $n = 2$ of the hydrogenic impurity are calculated like the spin-orbit corrections in the hydrogen atom; the parameters of effective radius a^* and the effective spin-orbit coupling constant λ^* , characteristics of each material, are the relevant ones for the analysis of the energy splittings. The extrinsic interaction produces non-zero corrections to the energy level,

and therefore for this type of crystalline structures there are corrections to the energy level $n = 2$ due to only this type of spin-orbit interaction.

Then we do a similar study for wurtzite-type semiconductors. In first place we study the intrinsic interaction, which, in addition to a cubic term in k (with a different functional dependence than in zincblende), presents a linear one, typical of wurtzite and analogous to the original Rashba coupling in quantum wells. For this case, unlike zincblende, corrections to energy are found due to the intrinsic spin-orbit interaction. Secondly, we consider the extrinsic spin-orbit interaction and calculate the first-order corrections to the energy of the hydrogenic impurity following the same method used for zincblende materials. In this case the difference is that the effective coupling constant, λ^* , for this type of crystalline structures was not available in the literature; in this thesis we find an expression for the said coupling constant. Following the procedure based on the Foldy-Wouthuysen transformation, analogous to that used in the literature for zincblende type semiconductor, we get an effective equation, restricted to the conduction band, for the states of the electron in the presence of the impurity. So, we find an expression for the coupling constant λ^* for wurtzite materials; using this expression we evaluate the contribution of the extrinsic spin-orbit interaction to the $n = 2$ energy level.

Finally, after having analyzed the energy splittings caused by the intrinsic and extrinsic spin-orbit interactions individually, we study the real situation where both interactions are present in order to obtain a complete description of the problem. It is observed that due to the combination of these interactions there is a greater break of the degeneracy, in addition to greater corrections than in the previous cases to the energy level $n = 2$.

Keywords: Hydrogenic impurity, spin-orbit interaction, intrinsic and extrinsic interaction, zincblende and wurtzite crystal structures, $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ method, Kane model.

Indice

1	Introducción	3
2	Preliminares	7
2.1	Estructura cristalina tipo zincblenda	7
2.2	Estructura cristalina tipo wurtzita	8
2.3	Impurezas hidrogenoides	10
2.4	Acoplamiento espín-órbita en semiconductores	13
2.5	Hamiltoniano de la interacción espín-órbita intrínseca	15
2.6	Hamiltoniano de la interacción espín-órbita extrínseca	16
2.7	Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$	17
2.8	Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y acoplamiento espín-órbita en sólidos	19
3	Efectos de la interacción espín-órbita en impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina zincblenda	23
3.1	Efectos del acoplamiento espín-órbita intrínseco	24
3.2	Correcciones al nivel de energía $2p$ de la impureza hidrogenoide debidas al acoplamiento espín-órbita extrínseco	28

4	Impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina wurtzita: acoplamiento espín-órbita extrínseco	33
4.1	Expresión del acoplamiento espín-órbita extrínseco	34
4.2	Correcciones al nivel de energía $2p$ de la impureza hidrogenoide debidas al acoplamiento espín-órbita extrínseco	39
5	Impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina wurtzita: acoplamiento espín-órbita intrínseco	45
5.1	Hamiltoniano del acoplamiento espín-órbita intrínseco	46
6	Interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca combinadas para semiconductores con estructura cristalina tipo wurtzita	51
6.1	Planteamiento del problema y solución analítica	52
6.2	Ejemplos de las correcciones a la energía del nivel E_2 para materiales GaN, ZnO, InN y AlN	55
7	Conclusiones	63
A	Desarrollo Perturbativo de H_{so}	67
B	Cálculo de elemento de matriz del acoplamiento espín-órbita intrínseco en zincblenda	70

Capítulo 1

Introducción

Los dispositivos de estado sólido, electrónicos u optoelectrónicos, reconocen un punto de partida en el año 1945, cuando en los laboratorios Bell, los físicos Shockley, Bardeen y Brattain inventaron el transistor de contacto, utilizando el germanio como material semiconductor. Luego este material fue reemplazado por el silicio, debido a sus mejores características físicas, para dar inicio a la electrónica de estado sólido. Los estudios teóricos sobre materiales juegan un rol importante en el desarrollo de estas tecnologías, ya que aportan información y nuevas ideas sobre sus propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y magnéticas. Dichas propiedades pueden ser luego utilizadas por los experimentalistas en el desarrollo, crecimiento y manipulación de nuevos materiales, lo que a su vez puede repercutir en la fabricación de nuevos dispositivos o en su mejor rendimiento.

En las últimas tres décadas ha tomado gran relevancia la investigación de los fundamentos físicos y el desarrollo de aplicaciones de la espintrónica [1–4]. La espintrónica es una nueva rama de la electrónica que comparte sus mismos objetivos: proveer métodos eficientes de almacenamiento y procesamiento de la información. Su diferencia con la electrónica tradicional consiste en que, además de utilizar la carga y los grados de libertad orbitales de los portadores de carga, se propone utilizar también el grado

de libertad de espín de los mismos. Desde la fundamental propuesta del transistor espintrónico de Datta y Das [5] cobró gran dinamismo la investigación básica de las propiedades de espín en sistemas de semiconductores de baja dimensionalidad. Una tecnología particular en la que el grado de libertad de espín podría resultar importante es la de la manipulación de información cuántica. Dicha información se almacena en sistemas de bits cuánticos o qubits, que pueden ser naturalmente representados por los estados fermiónicos de espín $1/2$. Por lo tanto, un electrón o un hueco confinado en un sistema cero-dimensional constituye una plataforma promisoría para la implementación de qubits. Sistemas nanoestructurados de semiconductores pueden proveer el deseado confinamiento. Los puntos cuánticos (quantum dots) y las impurezas constituyen opciones ideales que ya se encuentran disponibles en el laboratorio.

El espín del electrón interactúa en un medio sólido de tres maneras: con otros espines electrónicos a través de la interacción dipolar magnética, con los núcleos atómicos a través de la interacción hiperfina, y con los grados de libertad orbitales propios a través de la interacción espín-órbita. La primera de esas interacciones es mucho más débil que las otras y puede ser despreciada en general. Las dos restantes pueden ser importantes en sistemas espintrónicos y deben ser tenidas en cuenta en general. La interacción hiperfina es relevante en sistemas con muchos puntos cuánticos o impurezas, y dado que nosotros nos concentraremos en la descripción de una sola impureza no la incluiremos en nuestro estudio. Por lo tanto, el mecanismo de interacción que tendremos en cuenta aquí es la interacción espín-órbita, que, como veremos, tiene dos manifestaciones importantes en los semiconductores. Precisamente, entonces, el objetivo de esta tesis será estudiar el efecto de la interacción espín-órbita en los niveles de energía de una impureza donora dentro de semiconductores binarios con redes cristalinas de tipo zincblenda y wurtzita.

La mayoría de los semiconductores binarios formados con elementos de los grupos III y V y los grupos II y VI cristalizan en las estructuras cristalinas zincblenda y wurtzita [6]. Estas estructuras tienen diferentes simetrías que se reflejan en la interacción espín-órbita. Por esta razón, en esta tesis estudiaremos los efectos de la interacción espín-

órbita en las impurezas donoras en ambos tipos de redes. Ejemplos importantes de semiconductores binarios con estructura zincblenda son el GaAs y el InAs. El primero tiene un gap de energía importante, cercano al espectro visible, mientras que el segundo tiene un gap estrecho. Esa diferencia determina que la interacción espín-órbita sea en general más “fuerte” en el InAs que en el GaAs. Como ejemplo de compuestos binarios que adoptan la estructura wurtzita podemos citar al GaN y al ZnO, ambos materiales con gap directo y grande. Esta característica los hace fundamentales en las aplicaciones de dispositivos ópticos.

La información y la computación cuánticas requieren sistemas cuánticos formados por muchos “qubits” (bits cuánticos) que puedan interactuar entre sí. Los puntos cuánticos proveen una posible plataforma para la implementación de qubits. En particular, dichos qubits podrían ser implementados con el espín de un electrón confinado en el punto cuántico. En la misma línea de razonamiento, una impureza con un electrón ligado a ella podría ser considerada como un caso de extremo de “punto cuántico” debido a que presenta el máximo grado de confinamiento en un sólido. Este tipo de “qubits” ya ha sido propuesto en la literatura utilizando distintos tipos de impurezas. Por ejemplo, han recibido mucha atención en años recientes las impurezas donoras de fósforo en silicio [7,8], y los centros NV (nitrógeno-vacancia) en diamante [9].

En esta tesis nos proponemos explorar la influencia de la interacción espín-órbita en la estructura electrónica de las impurezas donoras en los compuestos semiconductores con estructuras cristalinas zincblenda y wurtzita. El objetivo final de esta línea de investigación es explorar el uso del grado de libertad de espín de electrones confinados en las impurezas más elementales que pueden introducirse en ellos. Para ello, damos un primer paso estableciendo una descripción detallada de cómo se modifican los niveles de energía de las impurezas donoras debido a la interacción espín-órbita presente en estos materiales.

Capítulo 2

Preliminares

En este Capítulo vamos a revisar los conceptos fundamentales que usaremos en el desarrollo de esta tesis. Comenzaremos describiendo las estructuras cristalinas de zincblenda y wurtzita, propias de los semiconductores que nos interesan. Luego recordaremos la física de las impurezas hidrogenoides en semiconductores, con especial énfasis en su estructura electrónica. Será sobre estos sistemas que incluiremos en esta tesis los efectos de las interacciones espín-órbita propias de los semiconductores. A continuación, repasaremos las expresiones matemáticas del acoplamiento espín-órbita intrínseco para las estructuras cristalinas zincblenda y wurtzita, y discutiremos la situación para la interacción extrínseca en ambos tipos de redes. Por completitud, daremos finalmente una introducción al método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, con el cual se obtiene la forma efectiva de la interacción espín-órbita extrínseca utilizada para el estudio de los efectos de espín-órbita en nanoestructuras (como nuestras impurezas hidrogenoides).

2.1 Estructura cristalina tipo zincblenda

La estructura de la zincblenda o *esfalerita* es similar a la estructura cristalina del diamante. La red cristalina tipo diamante consiste en dos redes de Bravais cúbicas cen-

tradas en la cara (FCC) interpenetradas, desplazadas a lo largo de la diagonal del cuerpo de la celda cúbica por un cuarto de la longitud de la diagonal. Puede ser considerada como una cúbica centrada en las caras con dos puntos en la base 0 y $(a/4)(\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$ [10]. El número de coordinación es 4 como se muestra en la Fig. 2.1, recordando que la red de diamante no es una red de Bravais. La diferencia entre diamante y zincblenda es que la primera posee un solo tipo de átomo mientras que la segunda tiene dos iones distintos en las dos redes FCC interpenetradas. Ejemplos importantes de la estructura zincblenda son el GaAs y el ZnS (del cual toma su nombre), ver Fig. 2.2. Los átomos en su forma iónica están coordinados de tal manera que cada átomo tiene cuatro átomos vecinos del otro tipo, formando tetraedros. Si un átomo de azufre (S), está en $(0, 0, 0)$, un átomo de zinc (Zn) estará en $(1/4, 1/4, 1/4)$, como se muestra en la Fig. 2.2. Muchos semiconductores tipo III/V como InP, GaAs, InAs y InSb cristalizan en este tipo de estructura. Estos compuestos son muy relevantes tecnológicamente hoy en día, y con ellos se pueden fabricar interesantes nanoestructuras como pozos cuánticos (*quantum wells*), nanohilos (*quantum wires*) y puntos cuánticos (*quantum dots*) [11].

Cabe destacar que semiconductores con este tipo de red cristalina presentan en general un gap de energía directo, porque su mínimo en la banda de conducción coincide con su máximo en la banda de valencia, en el valor de $k = 0$. En cambio, el germanio (Ge) y el silicio (Si) son semiconductores de gap de energía indirecto porque sus extremos energéticos en las bandas de conducción y valencia no coinciden en el espacio recíproco. Esta característica tiene importancia en las propiedades ópticas de dichos materiales.

2.2 Estructura cristalina tipo wurtzita

Esta estructura pertenece al sistema cristalino hexagonal y consiste en dos redes de Bravais HCP (hexagonal close packed) intercaladas, como se muestra en la Fig. 2.3. Un compuesto representativo es el GaN, que contiene átomos de galio y de nitrógeno. Cada

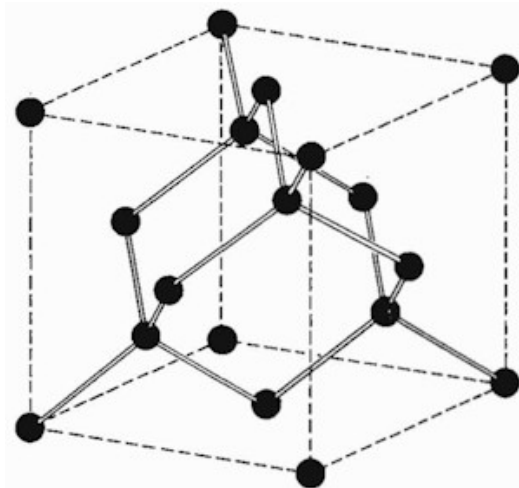


Fig. 2.1: Estructura cristalina tipo diamante.

tipo de átomo ocupa una red HCP (apilados según la secuencia ABABAB) y ambas redes HCP están desplazadas de modo que cada átomo tiene coordinación tetraédrica con cuatro átomos del otro tipo [12]. Otros compuestos típicos de este tipo de estructuras son: ZnO, ZnSe, BeO, CdS, MnS, entre otros. Su estructura se halla estrechamente relacionada con la de la lonsdalita, el diamante hexagonal. Típicamente los cristales de wurtzita son pirámides de seis caras donde el «hemimorfismo», los cristales muestran un aspecto distinto vistos desde arriba que desde abajo, es fácilmente observable, culminando la parte superior del cristal en un punto mientras que la parte inferior es la base de la pirámide. El eje “z”, a lo largo del cual están desplazadas las dos redes HCP, se denomina c , y representa una dirección “especial” de la estructura, diferenciada de las direcciones contenidas en el plano “xy”. La estructura wurtzita pertenece al sistema cristalino hexagonal y presenta por lo tanto una asimetría que no está presente en la estructura zincblenda, por pertenecer ésta a la familia de redes cúbicas.



Fig. 2.2: Estructura cristalina tipo zincblenda.

2.3 Impurezas hidrogenoides

Es bien conocido que el dopaje con impurezas tipo aceptoras o donoras modifica notablemente las propiedades eléctricas de los semiconductores tanto en bulk como en sistemas de baja dimensionalidad. En concreto, se sabe que la presencia de impurezas de tipo hidrogenoides en estos sistemas incrementa la conductividad eléctrica en varios órdenes de magnitud, especialmente a baja temperatura. Por esta razón, muchas investigaciones se han centrado en el estudio del espectro energético de diferentes tipos de sistemas hidrogenoides [13]. Las impurezas que contribuyen a la densidad de portadores de un semiconductor son llamadas donoras si ellas proveen electrones adicionales a la banda de conducción, y aceptoras si ellas contribuyen con huecos adicionales (i.e., captura de electrones) a la banda de valencia. Las impurezas donoras son átomos que tienen una mayor valencia química que los átomos del material puro; mientras que las aceptoras tienen una valencia química más baja.

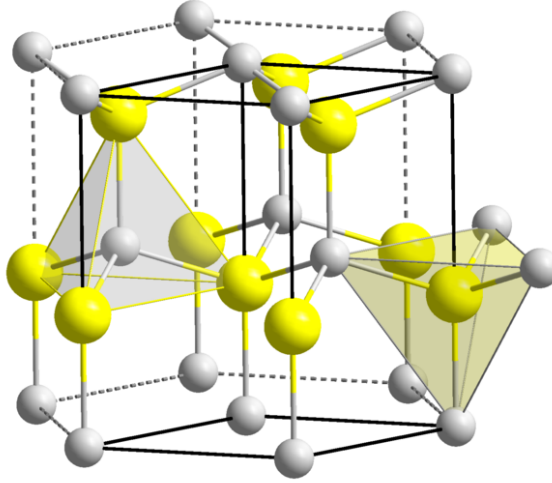


Fig. 2.3: Estructura cristalina tipo wurtzita.

Todos los tipos de semiconductores mencionados hasta el momento, es decir, los que tienen estructura diamante, zincblenda y wurtzita, pueden ser dopados para lograr diferentes efectos deseados en experimentos o dispositivos electrónicos. Sin embargo, en esta tesis, estudiaremos las impurezas donoras hidrogenoides en zincblenda y wurtzita específicamente. Esta elección se debe a que aquí estudiaremos los efectos de la interacción espín-órbita sobre los niveles de energía de las impurezas hidrogenoides (en la capa $n = 2$) y la interacción espín-órbita en estos tipos de redes es mucho más fuerte que en el caso de la red diamante.

A continuación repasaremos la teoría general de impurezas donoras en semiconductores [10]. Una impureza donora sustitucional actúa como un sistema hidrogenoide con un centro fijo atractivo de carga $+e$, alrededor del cual orbita un electrón adicional de carga $-e$. Si la impureza no estuviera embebida en el semiconductor (si estuviera en el vacío), la energía de enlace del electrón sería el primer potencial de ionización de la im-

pureza. Sin embargo, ya que la impureza está en el interior del material semiconductor, esta energía de enlace se reduce enormemente, y esto sucede por dos razones:

- El potencial eléctrico generado por la impureza ionizada es reducido por la constante dieléctrica estática ϵ del semiconductor. Los valores de la constante dieléctrica son bastante grandes, típicamente entre 10 y 20, pero en algunos casos pueden llegar 100 o más. El valor de la constante dieléctrica está relacionado con el tamaño del gap de energía en el material. Si no hubiera energía del gap, el cristal sería un metal en vez de ser un semiconductor, y la constante dieléctrica sería infinita debido al fuerte apantallamiento que pueden realizar los electrones libres del metal. Si la energía del gap no es cero, pero es pequeña, entonces la constante dieléctrica no será infinita, pero puede ser bastante grande, reflejando el caso relativo en el cual la distribución espacial de los electrones puede ser deformada produciendo un apantallamiento parcial.
- Un electrón moviéndose en medio de un semiconductor debe ser descrito no por la relación entre el momento y la energía en el espacio libre, sino por la relación semiclásica $\epsilon(k) = \epsilon_c(k)$, donde $\hbar k$ es el momento cristalino electrónico, y $\epsilon_c(k)$ es la relación momento-energía de la banda de conducción, i.e.. El electrón adicional introducido por la impureza debe pensarse como una superposición de los niveles de la banda de conducción del material puro anfitrión, que está apropiadamente alterado por la carga adicional localizada $+e$ representando la impureza. El electrón puede minimizar esta energía usando sólo niveles cerca de la parte inferior de la banda de conducción, para lo cual la aproximación cuadrática es válida. El electrón entonces se comportaría como un electrón libre, pero con una masa efectiva m^* que difiere de la masa libre del electron m_0 . Más generalmente, la relación del vector de onda de energía será alguna función cuadrática anisotrópica de k . En cualquiera de los casos, sin embargo, en primera aproximación, podemos representar al electrón como si se moviera en el espacio libre pero con masa efectiva

dada por m^* apropiadamente definida. En general, esta masa será más pequeña que la masa libre del electrón, a menudo por un factor de 0.1 o incluso menos.

Estas dos observaciones sugieren que podemos representar un electrón en presencia de una impureza donora de carga $+e$ en medio del semiconductor, como una partícula de carga $-e$ y masa m^* moviéndose en el espacio libre en presencia de un centro atractivo de carga e/ϵ ; donde ϵ es la constante dieléctrica del material. Éste es precisamente el problema del átomo de hidrogeno, excepto que el producto $-e^2$ de la carga electrónica y nuclear puede ser reemplazadas por $-e^2/\epsilon$, y la masa libre del electrón m_0 por m^* . Así el radio de la primera órbita de Bohr, $a_0 = \hbar^2/me^2$, se convierte en:

$$a^* = \frac{m_0}{m^*} \epsilon a_0, \quad (2.1)$$

y la energía de enlace del estado base, $me^4/2\hbar^2 = 13.6$ eV, se transforma en:

$$\epsilon = \frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon^2} \times 13.6 \text{ eV}. \quad (2.2)$$

2.4 Acoplamiento espín-órbita en semiconductores

La interacción espín-órbita en semiconductores puede ser clasificada según su origen en dos tipos distintos, *intrínseca* y *extrínseca*. La primera aparece como consecuencia de la ruptura de simetría de inversión espacial en el bulk del material (*bulk-inversion symmetry* o BIA en inglés). La segunda se origina por la introducción de potenciales adicionales al potencial cristalino, debidos, por ejemplo, a impurezas, defectos y confinamientos nanoscópicos. Una descripción más detallada de los dos tipos de interacción requiere una incursión en los fundamentos físicos del acoplamiento espín-órbita en semiconductores [14].

El Hamiltoniano general de la interacción espín-órbita de un electrón en presencia de un potencial total, $V_{\text{tot}}(\mathbf{r})$, se obtiene a partir de la ecuación de Dirac [15,16] realizando

la aproximación no-relativista a orden $1/c^2$:

$$H_{so,vac} = \lambda_{vac} \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{k} \times \nabla V_{tot}(\mathbf{r})], \quad (2.3)$$

donde $\lambda_{vac} = -\hbar^2/4m_e^2c^2 \approx -3.7 \times 10^{-6} \text{\AA}^2$ en el vacío, m_e es la masa del electrón, c la velocidad de la luz, $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli, y $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. Cuando $V_{tot}(\mathbf{r})$ es un potencial central, o sea que sólo depende de $|\mathbf{r}|$, el acoplamiento espín-órbita toma la forma conocida, proporcional a $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}/r^3$.

En el caso de materiales semiconductores es conveniente expresar el potencial total como $V_{tot}(\mathbf{r}) = V_{per}(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})$, donde $V_{per}(\mathbf{r})$ es el potencial periódico cristalino y $V(\mathbf{r})$ es la componente no-periódica que incluye los potenciales debidos a impurezas, defectos, confinamiento, bordes y campos eléctricos externos. Se supone que $V(\mathbf{r})$ varía suavemente en comparación con el parámetro de red. Dentro de un tratamiento del tipo *envelope-function approximation* [17], el Hamiltoniano de un electrón en la banda de conducción de un semiconductor con simetría cúbica (como las redes zincblenda y diamante) toma la forma [18]:

$$H_{eff} = \epsilon_k + V(\mathbf{r}) + H_{int} + H_{ext}, \quad (2.4)$$

$$H_{int} = \mathbf{b}(\mathbf{k}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (2.5)$$

$$H_{ext} = \lambda^* \boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{k} \times \nabla V(\mathbf{r})], \quad (2.6)$$

donde \mathbf{k} es el vector de onda cristalino, $\epsilon_k = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ y m^* es la masa efectiva en la banda en consideración. H_{int} y H_{ext} son los acoplamientos espín-órbita intrínseco y extrínseco, respectivamente. En la literatura se conoce también al acoplamiento intrínseco como de Dresselhaus [19]. Por otro lado, el acoplamiento que aquí llamamos extrínseco suele denominarse término de Rashba, aunque dicho autor se refería en sus trabajos originales a la interacción espín-órbita que aparece en sistemas quasi-2D con asimetría de inversión [20, 21]. La función $\mathbf{b}(\mathbf{k})$ que aparece en H_{int} depende del tipo de estructura cristalina y será explicitada más adelante para las redes zincblenda y wurtzita. La forma funcional de la constante de acoplamiento efectiva de la interacción

espín-órbita extrínseca, λ^* , depende del tipo de red (si es zincblenda o wurtzita); su valor también depende del material específico. La expresión de λ^* para zincblenda es conocida [18], pero para wurtzita no lo es. Esta constante es deducida por primera vez en esta tesis, siendo de gran relevancia para el estudio del acoplamiento espín-órbita extrínseco. Además, para wurtzita, la Ec. (2.6) requiere una modificación adicional, que será obtenida en el Capítulo 4. Es interesante notar que la constante efectiva λ^* puede ser varios órdenes de magnitud más grande que la constante λ_{vac} , como, por ejemplo, en el caso del material GaAs [18].

2.5 Hamiltoniano de la interacción espín-órbita intrínseca

Dresselhaus obtuvo un Hamiltoniano espín-órbita efectivo para electrones en la banda de conducción de semiconductores con redes cristalinas de tipo zincblenda [19]. Se puede ver que dicho término de interacción sólo está presente si la red cristalina carece de simetría de inversión; o, dicho de otra manera, si tiene asimetría de inversión del bulk (BIA). Por este motivo, no existe una interacción de Dresselhaus en la red diamante doptada por el Si y el Ge, pero sí en las redes zincblenda y wurtzita. En esta tesis llamamos también a la interacción de Dresselhaus interacción espín-órbita *intrínseca*, ya que existe en el bulk del material, independientemente de la presencia o ausencia de potenciales adicionales a nivel mesoscópico. Más específicamente, Dresselhaus mostró que para *zincblenda* H_{int} (Ec. (2.5)) toma la forma [19]

$$H_{\text{int}} = \gamma_z [k_x(k_y^2 - k_z^2)\sigma_x + k_y(k_z^2 - k_x^2)\sigma_y + k_z(k_x^2 - k_y^2)\sigma_z], \quad (2.7)$$

donde γ_z es una constante de acoplamiento que depende del material.

Por otra parte, para los materiales con estructura cristalina *wurtzita*, Fu y Wu [22] obtuvieron la correspondiente expresión del Hamiltoniano H_{int} :

$$H_{\text{int}} = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \gamma_w (b k_z^2 - k_{\parallel}) (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \quad (2.8)$$

Esta expresión se obtiene utilizando el método de partición de Löwdin [23], tal como se describe en la Ref. [22]. Debemos remarcar que la interacción espín-órbita intrínseca en *wurtzita* tiene dos términos, uno lineal y otro cúbico en k . Es común en la literatura llamar a estos dos términos, de Rashba y de Dresselhaus, respectivamente. Sin embargo, como ya indicamos, nosotros llamamos a todo este Hamiltoniano intrínseco o de Dresselhaus, y no utilizaremos la otra nomenclatura en esta tesis para evitar confusiones. Finalmente, mencionamos que el término lineal en Ec. (2.8) había sido obtenido con anterioridad por Lew Yan Voon *et al.* [24]. Una característica importante de esta interacción para la *wurtzita* es que no es isotrópica, como puede apreciarse observando los distintos roles de las componentes de \mathbf{k} en la Ec. (2.8).

2.6 Hamiltoniano de la interacción espín-órbita extrínseca

Campos eléctricos aplicados externamente en el semiconductor conducen a las contribuciones extrínsecas del acoplamiento espín-órbita. En particular, el campo eléctrico de una impureza hidrogenoide conduce a una contribución de este tipo de interacción. Esta interacción extrínseca, generada por los potenciales Coulombianos de las impurezas, es la que vamos a considerar en esta tesis.

Como mencionamos anteriormente, la interacción espín-órbita extrínseca en semiconductores con redes cúbicas está dada por la Ec. (2.6). Para derivar la constante efectiva de acoplamiento λ^* es suficiente restringirnos al Hamiltoniano de Kane de 8×8 ; no es necesario ir a un orden mayor, debido a que bandas más altas darán contribuciones

mas pequeñas que no son relevantes en este cálculo. Se obtiene [25, 26]:

$$\lambda^* \approx \frac{P^2}{3} \left[\frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right], \quad (2.9)$$

donde $P = (-i\hbar/m_0)\langle S|p_z|Z\rangle$ es el elemento de matriz que acopla el estado S y el estado Z , Δ_0 es la llamada energía de *split-off* de las bandas de valencia, y E_0 es la energía del gap.

Cabe destacar que la Ec. (2.6) tiene la misma forma analítica que la ecuación del acoplamiento espín-órbita del vacío (Ec. (2.3)); esto es porque las dos, la ecuación de Dirac y el Hamiltoniano simple de Kane (para zincblenda), tienen simetría esférica y porque tanto la ecuación de Pauli como la Ec. (2.6) se obtuvieron en una expansión a baja energía. Esta constante de acoplamiento efectiva, λ^* , para algunos materiales puede ser seis órdenes de magnitud más grande que en el vacío; dos ejemplos típicos son el GaAs con $\lambda \approx 5.3 \text{ \AA}^2$ y InAs $\lambda \approx 120 \text{ \AA}^2$. Esta intensificación del acoplamiento espín-órbita es potencialmente útil para la implementación de dispositivos espintrónicos.

En el caso de los materiales con red wurtzita, la constante λ^* debe ser recalculada debido a la menor simetría de la wurtzita comparada con la de la red zincblenda. Además, la Ec. (2.6) debe ser modificada por la misma razón. Dichos cálculos son presentados en el Capítulo 4.

2.7 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$

El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [27], se usa para realizar cálculos de las bandas de energías cerca de un \mathbf{k}_0 dado, por lo general un mínimo, que para nosotros coincide con el centro de la primera zona de Brillouin. Usando éste método se puede obtener expresiones analíticas de la dispersión de bandas y masas efectivas alrededor de puntos de alta simetría. Nosotros lo utilizaremos en esta tesis para obtener la constante de acoplamiento efectiva de la interacción espín-órbita extrínseca. Este formalismo puede ser deducido a partir de la

ecuación de Schrödinger para un electrón en una red cristalina,

$$H_0\psi = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \psi = E\psi, \quad (2.10)$$

si expresamos la función de onda ψ en la forma indicada por el teorema de Bloch:

$$\psi = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.11)$$

donde $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ tiene la periodicidad de $V(\mathbf{r})$, \mathbf{k} se toma en la primer zona de Brillouin y n es el índice de la banda de interés.

Teniendo en cuenta que $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$, tenemos:

$$\mathbf{p} [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = -i\hbar\nabla [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = \underbrace{\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\hbar)\nabla u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})}_{\Omega}, \quad (2.12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{p}[\Omega] &= \hbar\mathbf{k} [\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\hbar\nabla)u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] + \\ &\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\hbar\nabla)u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(-i\hbar\nabla)(-i\hbar\nabla)u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.13)$$

por lo tanto podemos escribir $\mathbf{p}^2 [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})]$ como:

$$\mathbf{p}^2 [e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})] = \hbar^2 k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + 2\hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \mathbf{p}^2 u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.14)$$

reemplazando la Ec. (2.14) en la Ec. (2.10) tenemos:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.15)$$

Es decir que hemos expresado la ecuación de autoenergías en función de la parte periódica de los autoestados de Bloch. Esta transformación es conveniente porque nos permite tratar el término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ como una perturbación, ya sea usando teoría de perturbaciones degeneradas o no degeneradas. Este método para calcular la dispersión de una banda de energía alrededor de un punto del espacio recíproco se conoce como método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

2.8 Método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y acoplamiento espín-órbita en sólidos

La ecuación de Schrödinger para un electrón en la red con interacción espín-órbita está dada por:

$$[H_0 + H_{\text{so}}]\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

donde el Hamiltoniano sin interacción espín-órbita está dado por:

$$H_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.17)$$

y el acoplamiento espín-órbita está dado por la Ec. (2.6). En términos de \mathbf{p} se expresa como:

$$H_{\text{so}} = \frac{\hbar}{4m^2c^4} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (2.18)$$

y por lo tanto nuestra ecuación de Schrödinger queda:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{\hbar}{4m^2c^4} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + V(\mathbf{r}) \right] \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (2.19)$$

Ahora, reemplazando la función de onda de Bloch $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ por la Ec. (2.11); haciendo las respectivas derivadas y reorganizando términos llegamos a:

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar}{4m^2c^4} (\nabla V \times \mathbf{p}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\hbar^2}{4m^2c^4} (\nabla V \times \mathbf{k}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \right] u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{n\mathbf{k}}^* u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.20)$$

con

$$E_{n\mathbf{k}}^* = E_{n\mathbf{k}} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (2.21)$$

donde al operador entre corchetes podemos identificarlo como un nuevo Hamiltoniano H , que está dado por $H = H_0 + H_{\text{so}} + H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$. Los términos H_0 y H_{so} ya fueron definidos anteriormente y $H_{\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}$ contiene un término de interacción espín-órbita dependiente de \mathbf{k} (en lugar de \mathbf{p}) y otro proporcional a $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$.

A continuación desearíamos diagonalizar el nuevo Hamiltoniano H . Para nuestros propósitos es suficiente trabajar con el método de Kane de 8 bandas [26,27]. Los estados

que Kane utiliza para diagonalizar el Hamiltoniano de la Ec. (2.20) son:

$$\begin{aligned}
& |iS \downarrow\rangle, \quad |iS \uparrow\rangle, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \uparrow\rangle, \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \downarrow\rangle, \\
& |Z \downarrow\rangle, \quad |Z \uparrow\rangle, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle, \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle.
\end{aligned}$$

Los primeros dos estados son de tipo s y pertenecen a la banda de conducción, mientras que los seis restantes son de tipo p y pertenecen a las bandas de valencia. Teniendo en cuenta que

$$\begin{aligned}
H_0|iS \downarrow(\uparrow)\rangle &= E_s|iS \downarrow(\uparrow)\rangle, \\
H_0|W\rangle &= E_p|W\rangle,
\end{aligned}$$

donde $|W\rangle$, representan todos los anteriores estados de valencia. Con esta condición y el hecho de que los operadores actúan bajo las condiciones de simetría del grupo de rotación tetrahédrico (Td) [26], entonces muchos elementos de la matriz se anulan, y sólo sobreviven aquéllos que cumplen:

$$\frac{\hbar}{m} \langle -iS \downarrow | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | Z \downarrow \rangle = -\frac{i\hbar}{m} k \langle S | pz | Z \rangle = kP, \quad (2.22)$$

donde se define

$$P \equiv -\frac{i\hbar}{m} \langle S | pz | Z \rangle. \quad (2.23)$$

Esto sería sólo el análisis para la contribucion del término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$. Ahora hacemos el mismo análisis para el término de acoplamiento espín-órbita. Aquí aparece el vector de matrices de Pauli $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z), \quad (2.24)$$

donde las componentes están dadas por:

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.25)$$

Teniendo en cuenta que las matrices de Pauli actúan sobre los autoestados de σ_z de la siguiente forma:

$$\sigma_x|\eta\rangle = |\bar{\eta}\rangle, \quad \sigma_y|\eta\rangle = i\eta|\bar{\eta}\rangle, \quad \sigma_z|\eta\rangle = \eta|\eta\rangle, \quad (2.26)$$

donde $\bar{\eta} = -\eta$, con $\eta = \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$.

Vemos que muchos elementos de matriz se anulan por la ortogonalidad de los autoestados de σ_z ; es decir $\langle\downarrow|\uparrow\rangle = \langle\uparrow|\downarrow\rangle = 0$. Sólo sobreviven los términos que contienen $\langle\downarrow|\downarrow\rangle, \langle\uparrow|\uparrow\rangle \neq 0$, que tienen la siguiente forma:

$$\frac{1}{2}\langle X + iY|\nabla V \times \mathbf{p}|X - iY\rangle = \frac{1}{2}\left\langle X + iY \left| \frac{\partial V}{\partial x}p_y - \frac{\partial V}{\partial y}p_x \right| X - iY \right\rangle. \quad (2.27)$$

Si llamamos

$$O_{xy} \equiv \frac{\partial V}{\partial x}p_y - \frac{\partial V}{\partial y}p_x, \quad (2.28)$$

se puede ver que:

$$\frac{1}{2}\langle X + iY|O_{xy}|X - iY\rangle = \frac{1}{2}\langle X|O_{xy}|Y\rangle. \quad (2.29)$$

A partir de este elemento de matriz del operador O_{xy} definimos la siguiente energía que caracteriza la interacción espín-órbita en la estructura de bandas:

$$\Delta_0 = \frac{3\hbar i}{4m^2c^4}\langle X|O_{xy}|Y\rangle, \quad (2.30)$$

comúnmente llamada energía de *split-off*, que aparece en la Ec. (2.9). Esta energía, que es básicamente un elemento de matriz del acoplamiento espín-órbita, es muy importante en describir correctamente la estructura de bandas y las propiedades de espín de los materiales. El método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ y el acoplamiento espín-órbita serán elementos esenciales en el desarrollo de esta tesis.

Capítulo 3

Efectos de la interacción espín-órbita en impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina zincblenda

Las interacciones espín-órbita, como se lo mencionó en el capítulo anterior (Capítulo. 2), pueden ser clasificadas de dos maneras según su origen en el material: las de tipo *extrínseco* y las de tipo *intrínseco*. En este capítulo estudiaremos ambos acoplamientos espín-órbita en los niveles de energía de las impurezas hidrogenoides donoras, para el caso de semiconductores con estructura cristalina zincblenda. Consideraremos primero el caso intrínseco que presenta características específicas para la estructura cristalina zincblenda. Luego veremos el acoplamiento extrínseco que, como se verá, es más general y se puede aplicar de forma similar a la estructura cristalina wurtzita. Finalmente, presentamos resultados numéricos para algunos materiales específicos, como GaAs, InAs y InSb, que son de gran interés actual.

3.1 Efectos del acoplamiento espín-órbita intrínseco

La estructura cristalina con la cual vamos a iniciar nuestro estudio es la zincblenda. Según lo visto en el capítulo anterior, la interacción espín-órbita de Dresselhaus, también llamada *intrínseca* por estar presente en el seno o *bulk* del material, tiene para materiales con estructura zincblenda la expresión dada en la Ec. (2.7). Deseamos ahora aplicar este acoplamiento efectivo a un electrón que se encuentra bajo la influencia del potencial atractivo del ión de una impureza donora que ha cedido un electrón al material. Ya conocemos el Hamiltoniano de la impureza y sus autoestados en ausencia de esta interacción espín-órbita: que son análogos a los del átomo de hidrógeno, como describimos en el capítulo anterior. Ahora queremos considerar el acoplamiento de Dresselhaus como un Hamiltoniano espín-órbita efectivo para un electrón ligado a la impureza donora ionizada (en esta situación el electrón tiene la masa efectiva m^* , asociada a la banda de conducción del material). Esto se logra considerando a los vectores de onda \mathbf{k} que aparecen en la Ec. (2.7) como operadores de momento, es decir, como \mathbf{p}/\hbar , obteniéndose

$$H_{\text{int}} = \frac{\gamma_z}{\hbar^3} \left[p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x + p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y + p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z \right]. \quad (3.1)$$

El conjunto de bases de funciones de onda que vamos a usar para resolver nuestro problema $\{|n, l, m_l\rangle\}$, son las mismas funciones de onda del átomo de hidrógeno, asociadas al subespacio de $n = 2$ [28]. Con el fin de hallar las correcciones a la energía debidas a la presencia del Hamiltoniano H_{int} utilizaremos teoría de perturbaciones independientes del tiempo a primer orden. Para esto, escribiremos la matriz de H_{int} en la base del subespacio mencionado y la diagonalizaremos.

Estas funciones de onda con $n = 2$ son:

$$\psi_{200\eta} = \left(\frac{1}{32\pi a^{*3}} \right)^{1/2} \left(2 - \frac{r}{a^*} \right) e^{-r/2a^*} \eta = C_{200} \left(2 - \frac{r}{a^*} \right) e^{-r/2a^*} \eta, \quad (3.2)$$

$$\psi_{210\eta} = \left(\frac{1}{32\pi a^{*3}} \right)^{1/2} \frac{z}{a^*} e^{-r/2a^*} \eta = C_{210} z e^{-r/2a^*} \eta, \quad (3.3)$$

$$\psi_{21-1\eta} = \left(\frac{1}{64\pi a^{*3}}\right)^{1/2} \frac{1}{a^*} (x - iy)e^{-r/2a^*} \eta = C_{21-1}(x - iy)e^{-r/2a^*} \eta, \quad (3.4)$$

$$\psi_{211\eta} = -\left(\frac{1}{64\pi a^{*3}}\right)^{1/2} \frac{1}{a^*} (x + iy)e^{-r/2a^*} \eta = C_{211}(x + iy)e^{-r/2a^*} \eta, \quad (3.5)$$

donde $\eta = \{+1, -1\} = \{\uparrow, \downarrow\}$ representa los estados de polarización del espín en la dirección z . Necesitamos calcular los elementos de matriz $\langle \psi_{nlm_l\eta} | H_{\text{int}} | \psi_{n'l'm'_l\eta'} \rangle$, es decir

$$\frac{\gamma_z}{\hbar^3} \langle \psi_{nlm_l\eta} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x + p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y + p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{n'l'm'_l\eta'} \rangle, \quad (3.6)$$

teniendo en cuenta que $(n, n' = 2)$, $(l, l' = 0, 1)$, y $(m_l, m'_l = -1, 0, 1)$. Notamos que en cada término (sumando) la dependencia de espín se factoriza y podemos analizarla por separado:

$$\langle \psi_{nlm_l\eta} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x | \psi_{n'l'm'_l\eta'} \rangle = \langle n l m_l | p_x(p_y^2 - p_z^2) | n' l' m'_l \rangle \langle \eta | \sigma_x | \eta' \rangle, \quad (3.7)$$

$$\langle \psi_{nlm_l\eta} | p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y | \psi_{n'l'm'_l\eta'} \rangle = \langle n l m_l | p_y(p_z^2 - p_x^2) | n' l' m'_l \rangle \langle \eta | \sigma_y | \eta' \rangle, \quad (3.8)$$

$$\langle \psi_{nlm_l\eta} | p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{n'l'm'_l\eta'} \rangle = \langle n l m_l | p_z(p_x^2 - p_y^2) | n' l' m'_l \rangle \langle \eta | \sigma_z | \eta' \rangle. \quad (3.9)$$

Para analizar la parte de espín utilizamos las relaciones de la Ec. (2.26) y obtenemos

$$\begin{aligned} \langle \eta | \sigma_x | \eta' \rangle &= \delta_{\bar{\eta}\eta'}, \\ \langle \eta | \sigma_y | \eta' \rangle &= i\eta' \delta_{\eta\bar{\eta}'}, \\ \langle \eta | \sigma_z | \eta' \rangle &= \eta \delta_{\eta\eta'}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Por otra parte, para calcular la parte espacial de los elementos de matriz utilizamos los operadores de momento lineal $p_j = i\hbar\partial_j$, (con $j = x, y, z$). Por ejemplo, el primero de los elementos de matriz espaciales, Ec. (3.7), es:

$$\langle n l m_l | p_x(p_y^2 - p_z^2) | n' l' m'_l \rangle = -i\hbar^3 \int d\mathbf{r} \varphi_{nlm_l}^*(\mathbf{r}) \partial_x (\partial_y^2 - \partial_z^2) \varphi_{n'l'm'_l}(\mathbf{r}). \quad (3.11)$$

Para escribir la matriz de H_{int} ordenamos las funciones de la base de la siguiente forma: $\{|200 \uparrow\rangle, |200 \downarrow\rangle, |211 \uparrow\rangle, |211 \downarrow\rangle, |210 \uparrow\rangle, |210 \downarrow\rangle, |21-1 \uparrow\rangle, |21-1 \downarrow\rangle\}$.

Como una manera de ilustración calculamos el elemento de matriz para los estados $|211 \uparrow\rangle$, $|21 - 1 \downarrow\rangle$, utilizando la Ec. (3.6), por tanto tenemos:

$$\begin{aligned}
H_{211\uparrow,21-1\downarrow} &= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} \langle \psi_{211\uparrow} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x + p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y + p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{21-1\downarrow} \rangle, \\
&= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} [\langle \psi_{211\uparrow} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x | \psi_{21-1\downarrow} \rangle + \langle \psi_{211\uparrow} | p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y | \psi_{21-1\downarrow} \rangle \\
&\quad + \langle \psi_{211\uparrow} | p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{21-1\downarrow} \rangle]. \tag{3.12}
\end{aligned}$$

Teniendo en cuenta las Ecs. (3.10), nuestro elemento de matriz se reduce a:

$$H_{211\uparrow,21-1\downarrow} = \frac{\gamma_z}{\hbar^3} [\langle \varphi_{211} | p_x(p_y^2 - p_z^2) | \varphi_{21-1} \rangle - i \langle \varphi_{211} | p_y(p_z^2 - p_x^2) | \varphi_{21-1} \rangle]. \tag{3.13}$$

Finalmente, con las Ecs. (3.4), (3.5), (3.11), el elemento de matriz queda:

$$\begin{aligned}
H_{211\uparrow,21-1\downarrow} &= -i\gamma_z C_{211} C_{21-1} \left[\int d\mathbf{r} (x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_x (\partial_y^2 - \partial_z^2) (x - iy) e^{-r/2a^*} \right. \\
&\quad \left. - i \int d\mathbf{r} (x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_y (\partial_z^2 - \partial_x^2) (x - iy) e^{-r/2a^*} \right]. \tag{3.14}
\end{aligned}$$

Vamos a analizar este elemento de matriz para ver como influye en él la paridad de las funciones de onda y la del operador involucrado. Para ello tomamos sólo el primer miembro de la Ec. (3.14), ya que el otro término es completamente análogo para los cálculos. Partiendo de:

$$\int d\mathbf{r} (x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_x (\partial_y^2 - \partial_z^2) (x - iy) e^{-r/2a^*}, \tag{3.15}$$

luego de aplicar las derivadas en la Ec. (3.15), multiplicamos por la función del lado izquierdo $(x + iy)e^{-r/2a^*}$, y obtenemos:

$$\begin{aligned}
& \int d\mathbf{r} (x + iy)e^{-r/2a^*} \partial_x(\partial_y^2 - \partial_z^2)(x - iy)e^{-r/2a^*} = \\
& \frac{1}{2a^*} \int d\mathbf{r} e^{-r/a^*} \left(-\frac{2iyx^2}{r^3} - \frac{3y^2x^3}{r^5} + \frac{xy^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^3}{a^*r^4} + \frac{iy^3x^2}{a^*r^4} - \frac{3iyx^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^3}{2a^*r^4} \right. \\
& + \frac{iy^3x^2}{2a^*r^4} - \frac{y^2x^3}{4a^{*2}r^3} + \frac{iy^3x^2}{4a^{*2}r^3} - \frac{xz^2}{r^3} - \frac{xz^2}{2a^*r^2} + \frac{3x^3z^2}{r^5} - \frac{ix^2yz^2}{a^*r^4} + \frac{x^3z^2}{a^*r^4} + \frac{iyx^2}{2a^*r^2} \\
& - \frac{iyx^2z^2}{2a^*r^4} + \frac{x^3z^2}{2a^*r^4} - \frac{iyx^2z^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{x^3z^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{3y^2x}{r^3} + \frac{iy^3}{r^3} - \frac{3y^4x}{r^5} + \frac{iy^3}{2a^*r^2} - \frac{iy^3x^2}{a^*r^4} \\
& - \frac{y^4x}{a^*r^4} + \frac{3y^2x}{2a^*r^2} + \frac{ix^2y}{2a^*r^2} - \frac{iy^3x^2}{2a^*r^4} - \frac{y^4x}{2a^*r^4} - \frac{iy^3x^2}{4a^{*2}r^3} - \frac{y^4x}{4a^{*2}r^3} - \frac{iyz^2}{r^3} - \frac{iyz^2}{2a^*r^2} \\
& + \frac{3xy^2z^2}{r^5} + \frac{xy^2z^2}{a^*r^4} + \frac{ix^2yz^2}{a^*r^4} - \frac{y^2x}{2a^*r^2} - \frac{ix^2y}{2a^*r^2} + \frac{y^2xz^2}{2a^*r^4} + \frac{ix^2yz^2}{2a^*r^4} + \frac{y^2xz^2}{4a^{*2}r^3} \\
& \left. + \frac{ix^2yz^2}{4a^{*2}r^3} \right). \tag{3.16}
\end{aligned}$$

Aquí podemos ver que cada uno de los términos del integrando es una función impar en alguna de las coordenadas cartesianas (x, y, z) , ya que en todos los términos aparece una potencia impar en alguna de las coordenadas. Entonces, como se realiza una integración entre $-\infty$ y ∞ en las tres coordenadas, todas las integrales son nulas. Lo mismo ocurre con el segundo miembro de la Ec. (3.14). Por lo tanto todo el elemento de matriz Ec. (3.14), es nulo. Este mismo comportamiento ocurre con todos los elementos de matriz dentro de las subcapas ($l = 0$ o $l = 1$), y con los elementos de matriz intersubcapa con espines opuestos.

Nos resta analizar los elementos de matriz $H_{200\uparrow,210\uparrow}$, $H_{200\downarrow,210\downarrow}$. Consideremos el primero:

$$\begin{aligned}
H_{200\uparrow,210\uparrow} &= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} \langle \psi_{200\uparrow} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x + p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y + p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{210\uparrow} \rangle \\
&= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} \langle \psi_{200\uparrow} | p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{210\uparrow} \rangle \\
&= i\gamma_z C_{200} C_{210} \int d\mathbf{r} \left(2 - \frac{r}{a^*} \right) e^{-r/2a^*} \partial_z(\partial_x^2 - \partial_y^2) z e^{-r/2a^*}. \tag{3.17}
\end{aligned}$$

Lo cual nos queda:

$$\begin{aligned}
& \int d\mathbf{r} \left(2 - \frac{r}{a^*} \right) e^{-r/2a^*} \partial_z (\partial_x^2 - \partial_y^2) z e^{-r/2a^*} = \\
& \frac{1}{a^*} \int d\mathbf{r} e^{-r/a^*} \left(-\frac{3x^2 z^2}{r^5} - \frac{x^2 z^2}{2a^* r^4} + \frac{x^2}{2a^* r^2} - \frac{x^2 z^2}{a^* r^4} - \frac{x^2 z^2}{4a^{*2} r^3} + \frac{3y^2 z^2}{r^5} \right. \\
& + \frac{y^2 z^2}{2a^* r^4} - \frac{y^2}{2a^* r^2} + \frac{y^2 z^2}{a^* r^4} + \frac{y^2 z^2}{4a^{*2} r^3} + \frac{3x^2 z^2}{2a^* r^4} + \frac{x^2 z^2}{4a^{*2} r^3} - \frac{x^2}{4a^{*2} r} + \frac{x^2 z^2}{2a^{*2} r^3} \\
& \left. + \frac{x^2 z^2}{8a^{*3} r^2} - \frac{3y^2 z^2}{2a^* r^4} - \frac{y^2 z^2}{4a^{*2} r^3} + \frac{y^2}{4a^{*2} r} - \frac{y^2 z^2}{2a^{*2} r^3} - \frac{y^2 z^2}{8a^{*3} r^2} \right). \quad (3.18)
\end{aligned}$$

Aquí vemos que los términos individuales no se cancelan por paridad como en los casos anteriores, sino que la cancelación se produce de a pares de términos que sólo difieren en un intercambio de las variables x e y . Lo mismo ocurre para el elemento de matriz $H_{200\downarrow, 210\downarrow}$. En conclusión, toda la matriz es nula, por lo tanto la interacción espín-órbita intrínseca en las redes zincblenda no contribuye en la capa $n = 2$ que estamos estudiando.

3.2 Correcciones al nivel de energía $2p$ de la impureza hidrogenoide debidas al acomplamiento espín-órbita extrínseco

Como se ha venido mencionando, la impureza hidrogenoide en un semiconductor es, en primera aproximación, completamente análoga al átomo de hidrógeno. La diferencia entre ambos radica en que en la impureza hidrogenoide la masa del electrón es sustituida por la masa efectiva m^* y la interacción coulombiana es modificada por la constante dieléctrica ϵ del material. La masa efectiva está asociada a la banda de energía correspondiente, es decir, a la banda de conducción en el caso de impurezas donoras y la banda de valencia para impurezas aceptoras. Aquí estamos tratando el caso de im-

purezas donoras, es decir cobra de gran relevancia el uso de la masa efectiva dentro del potencial.

El potencial

$$V(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\epsilon r} \quad (3.19)$$

de la impureza donora da lugar a estados hidrogénicos centrados en la impureza. La anisotropía de la red cristalina wurtzita induce una anisotropía uniaxial, de alrededor del diez por ciento (10%), en la masa efectiva y las constantes dieléctricas. Nosotros despreciaremos la pequeña deformación resultante en los estados hidrogénicos, y adoptaremos los estados estándar isotrópicos de la capa $n = 2$, cuya energía es $E_2 = -Ry^*/4$, donde $Ry^* = (m^*/m_0)(1/\epsilon^2)Ry$.

Para efectos de análisis, en este capítulo solo nos limitaremos a mostrar la expresión del Hamiltoniano de acoplamiento de espín-órbita extrínseco, ya para un análisis más minucioso en el siguiente capítulo lo analizamos con más detalle. El Hamiltoniano H_{ext} de la interacción espín-órbita extrínseca debida al potencial Coulombiano de la impureza donora es:

$$H_{\text{ext}} = \xi^*(\mathbf{r}) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (3.20)$$

donde

$$\xi^*(\mathbf{r}) = \frac{e^2 \lambda^*}{\epsilon \hbar^2 r^3} = \frac{\xi_0^*}{r^3}, \quad (3.21)$$

con

$$\xi_0^* = \frac{e^2 \lambda^*}{\epsilon \hbar^2}. \quad (3.22)$$

A continuación calcularemos las correcciones a primer orden de la energía de la capa $n = 2$ de la impureza hidrogenoide debidas a H_{ext} . Este cálculo es análogo al desarrollo de las correcciones de espín-órbita en el átomo de hidrógeno [16]. Primero planteamos el cálculo de los elementos de matriz de H_{ext} en la base de autoestados de $\{\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{L}^2$ y $S_z\}$:

$$\left\langle n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}, m'_l, m'_s \left| \xi^*(\mathbf{r}) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \right| n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}, m_l, m_s \right\rangle. \quad (3.23)$$

Integrando la parte radial del elemento de matriz obtenemos

$$\xi_{2p}^* \left\langle l = 1; s = \frac{1}{2}, m'_l, m'_s \left| \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \right| l = 1; s = \frac{1}{2}, m_l, m_s \right\rangle, \quad (3.24)$$

donde $\xi^*(\mathbf{r})$ es:

$$\xi_{2p}^* = \xi_0^* \int_0^\infty \frac{1}{r^3} |R_{21}(\mathbf{r})|^2 r^2 dr. \quad (3.25)$$

Además, tenemos en cuenta que $R_{21}(\mathbf{r}) = \sqrt{1/24a^{*5}} e^{-r/2a^*}$, por lo tanto la integral de la Ec. (3.25) nos queda:

$$\xi_{2p}^* = \frac{\xi_0^*}{24a^{*3}} \quad (3.26)$$

Ahora el problema se reduce a la diagonalización del operador $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, que actúa sólo sobre las variables orbitales angulares y de espín. Para ello introducimos el momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, y la base de autoestados de $\{\mathbf{L}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{L}^2, J_z\}$, $\{|j, l, s, m_j\rangle\}$. En esta base el Hamiltoniano espín-órbita es diagonal. Los autovalores de $\xi_{2p}^* \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, dependen sólo de j (no de m_j) [16].

Entonces tenemos que: para para $j = 1/2$ es igual a:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \left[\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = -\xi_{2p}^* \hbar^2, \quad (3.27)$$

y para $j = 3/2$ es:

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \left[\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \hbar^2 \quad (3.28)$$

Reemplazando ξ_{2p}^* , las energías ε_1 y ε_2 , quedan expresadas en función de las constantes básicas del sistema, así:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -\frac{e^2 \lambda^*}{12 \epsilon a^{*3}}, \\ \varepsilon_2 &= \frac{e^2 \lambda^*}{24 \epsilon a^{*3}}; \end{aligned} \quad (3.29)$$

y también pueden ser expresadas en términos de Rydberg:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -\frac{\lambda^* a_0}{6 \epsilon a^{*3}} \text{Ry} \equiv -2\beta, \\ \varepsilon_2 &= \frac{\lambda^* a_0}{12 \epsilon a^{*3}} \text{Ry} \equiv \beta. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Aquí hemos definido la constante β , como una constante que define una escala característica de energía de la interacción espín-órbita extrínseca y que será utilizada nuevamente en el (Capítulo 6), para el caso de ambas interacciones de espín-órbita combinadas. Las

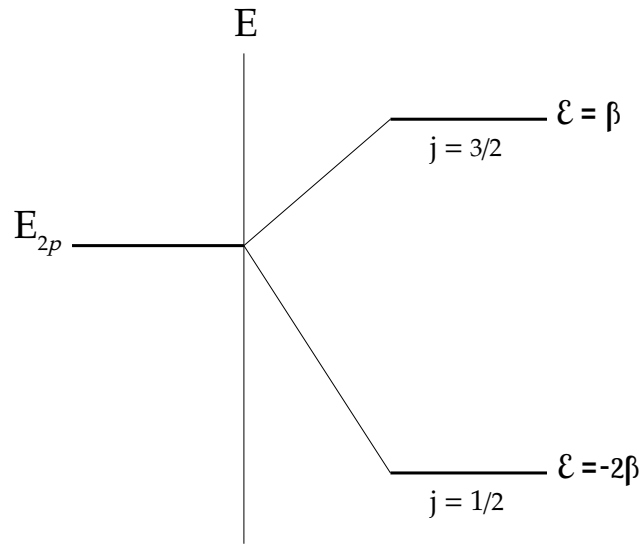


Fig. 3.1: Correcciones a la energía a primer orden.

correcciones ϵ_1 y ϵ_2 son ilustradas en la Fig. 3.1, en relación a la energía del nivel $2p$. Este gráfico es análogo al que se presenta usualmente para el átomo de hidrógeno. Aquí designamos con ϵ_1 a la corrección de la energía del estado con $j = 1/2$ y con ϵ_2 a la del estado con $j = 3/2$. En la Fig. 3.1, se ilustra el caso en que $\epsilon_1 < \epsilon_2$, para todos los materiales tipo zincblenda que aquí estudiamos.

En la Tabla 3.1, se muestran los diferentes parámetros usados para calcular las constantes de acoplamiento efectivas de los materiales zincblenda (Ec. (2.9)), y los diferentes valores de energía del nivel $2p$.

Los valores numéricos de ε_1 y ε_2 son presentados en la Tabla 3.2, junto con los parámetros de radio efectivo a^* y constante de acoplamiento efectiva λ^* , necesarios para el calculo de las energías.

	a^* [Å]	ϵ	E_g [eV]	Δ_0 [eV]	P [eVÅ]	m^*/m_0
GaAs	99.39	12.4	1.519	0.341	10.493	0.066
InAs	335.79	14.6	0.418	0.380	9.197	0.023
InSb	728.39	17.9	0.237	0.810	9.641	0.013

Tabla 3.1: Parametros de la estructura de bandas de diferentes materiales tipo zincblenda [26]. Las masas efectivas y las constantes dieléctricas son fundamentales para la impureza hidrogenoide.

	a^* [Å]	λ^* [Å ²]	ϵ	ε_1 [μeV]	ε_2 [μeV]	E_2^* [μeV]
GaAs	99.39	5.297	12.4	-0.532	0.265	-1449.41
InAs	335.79	117.092	14.6	-0.259	0.129	-366.86
InSb	728.39	521.981	17.9	-0.0923	0.0462	-137.94

Tabla 3.2: Correcciones por interacción espín-órbita extrínseca a la energía del nivel $2p$ de impurezas donoras hidrogenoides en diferentes semiconductores tipo zincblenda, con sus respectivos parámetros. Las masas efectivas y las constantes dieléctricas [26], que se utilizaron se encuentran en el Tabla 3.1.

Capítulo 4

Impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina wurtzita: acoplamiento espín-órbita extrínseco

Por un lado tenemos que la interacción espín-órbita en semiconductores es descrita por el acoplamiento que aquí llamaremos *intrínseco*, que comunmente nos referimos como acoplamiento de Dresselhaus [19]. Por otro lado, potenciales adicionales introducidos en el cristal por medio de compuertas de voltaje, impurezas u otras nanoestructuras generan un acoplamiento espín-órbita adicional que llamaremos *extrínseco*.

En el capítulo anterior estudiamos los efectos de estos acoplamientos espín-órbita en los niveles de energía de las impurezas hidrogenoides donoras para el caso de semiconductores con estructura cristalina zincblenda. En este capítulo consideraremos dichos efectos para el caso de semiconductores con estructura cristalina wurtzita; procederemos en varias etapas. En primer lugar consideraremos la teoría general del acoplamiento extrínseco; luego la del intrínseco, y en tercer lugar estudiaremos el efecto combinado de

ambos en las impurezas hidrogenoides. Finalmente, presentamos resultados numéricos para cuatro materiales específicos, a saber, GaN, ZnO, InN y el AlN, que son de gran interés actual.

4.1 Expresión del acoplamiento espín-órbita extrínseco

Como ya se mencionó anteriormente el Hamiltoniano espín-órbita de un electrón en el vacío en presencia de un potencial $V_0(\mathbf{r})$ está dado por la Ec. (2.6)

$$H_{\text{so}} = \lambda \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{k} \times \nabla V_0(\mathbf{r})]. \quad (4.1)$$

Como vimos en el capítulo anterior, cuando el electrón se encuentra inmerso en un semiconductor tipo zincblenda en presencia de un potencial mesoscópico adicional $V(\mathbf{r})$, el Hamiltoniano espín-órbita efectivo toma la forma

$$H_{\text{ext}} = \lambda^* \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot [\mathbf{k} \times \nabla V(\mathbf{r})], \quad (4.2)$$

donde λ^* es una constante de acoplamiento efectiva. En esta Sección obtendremos una expresión análoga a la constante de acoplamiento de la estructura cristalina zincblenda, es decir, una constante de acoplamiento para el caso de semiconductores tipo wurtzita.

Como punto de partida tomamos el Hamiltoniano del método $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ [27]:

$$H = H_0 + H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} + H_{\text{so}} \quad (4.3)$$

donde

$$\begin{aligned} H_0 &= \frac{P^2}{2m} + U(r), \\ H_{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} &= \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \\ H_{\text{so}} &= \frac{\lambda}{\hbar} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{p} \times \nabla U, \end{aligned} \quad (4.4)$$

y U es el potencial periódico del cristal. Los autoestados comunes de H_0 , L_z y S_z son los siguientes:

$$\begin{aligned}
u_1 &= |iS \uparrow\rangle, \\
u_2 &= |iS \downarrow\rangle, \\
u_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \uparrow\rangle, \\
u_4 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \downarrow\rangle, \\
u_5 &= |Z \uparrow\rangle, \\
u_6 &= |Z \downarrow\rangle, \\
u_7 &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle, \\
u_8 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle.
\end{aligned} \tag{4.5}$$

Donde u_1 y u_2 son estados tipo s de la banda de conducción con energía E_c y los restantes son estados tipo p de la banda de valencia con energía E_v . El gap de energía está dado por $E_g = E_c - E_v$. Los elementos de matriz de H no-nulos provenientes del término $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ pueden ser agrupados de la siguiente forma:

$$\frac{\hbar}{m} \langle -iS \downarrow | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | Z \downarrow \rangle = -i \frac{\hbar}{m} k_z \langle S | p_z | Z \rangle \equiv k_z P_1,$$

$$\frac{\hbar}{m} \langle -iS \downarrow | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | Y \downarrow \rangle = -i \frac{\hbar}{m} k_y \langle S | p_y | Y \rangle \equiv k_y P_2,$$

$$\frac{\hbar}{m} \langle -iS \downarrow | \mathbf{k} \cdot \mathbf{p} | X \downarrow \rangle = -i \frac{\hbar}{m} k_x \langle S | p_x | X \rangle \equiv k_x P_2. \tag{4.6}$$

La diagonalización del Hamiltoniano Ec. (4.3) resulta más sencilla si éste es representado en la base de autoestados comunes de H_0 y J_z dados por

$$\begin{aligned}
v_1 &= |iS \uparrow\rangle \\
v_2 &= |iS \downarrow\rangle \\
v_3 &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |(X + iY) \uparrow\rangle \\
v_4 &= -\frac{1}{\sqrt{6}} [|(X + iY) \downarrow\rangle - 2|Z \uparrow\rangle] \\
v_5 &= \frac{1}{\sqrt{6}} [|(X - iY) \uparrow\rangle + 2|Z \downarrow\rangle] \\
v_6 &= \frac{1}{\sqrt{2}} |(X - iY) \downarrow\rangle \\
v_7 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} [|(X + iY) \downarrow\rangle + |Z \uparrow\rangle] \\
v_8 &= -\frac{1}{\sqrt{3}} [|(X - iY) \uparrow\rangle - |Z \downarrow\rangle].
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Calculando los elementos de matriz $H_{ij} = \langle v_i | H | v_j \rangle$, donde $\{i, j = 1, 2, \dots, 8\}$, obtenemos la forma matricial del Hamiltoniano

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} E_c & 0 & \frac{-1}{\sqrt{2}} P_2 k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} P_1 k_z & \frac{1}{\sqrt{6}} P_2 k_- & 0 & \frac{-1}{\sqrt{3}} P_1 k_z & \frac{-1}{\sqrt{3}} P_2 k_- \\ 0 & E_c & 0 & \frac{-1}{\sqrt{6}} P_2 k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} P_1 k_z & \frac{1}{\sqrt{2}} P_2 k_- & \frac{-1}{\sqrt{3}} P_2 k_+ & \frac{1}{\sqrt{3}} P_1 k_z \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} P_2 k_- & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P_1 k_z & \frac{-1}{\sqrt{6}} P_2 k_- & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{6}} P_2 k_+ & \sqrt{\frac{2}{3}} P_1 k_z & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} P_2 k_+ & 0 & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} P_1 k_z & \frac{-1}{\sqrt{3}} P_2 k_- & 0 & 0 & 0 & 0 & E_v - \Delta_0 & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{3}} P_2 k_+ & \frac{1}{\sqrt{3}} P_1 k_z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & E_v - \Delta_0 \end{pmatrix} \tag{4.8}$$

donde $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$ y $\Delta_0 = \frac{\hbar}{4m^2 c^4} \langle X | \frac{\partial U}{\partial x} P_y - \frac{\partial U}{\partial y} P_x | Y \rangle$ da el splitting de las bandas de valencia debido a la interacción espín-órbita microscópica.

Ahora introducimos el potencial $V(\mathbf{r})$ de la impureza, que varía lentamente en la escala de longitudes típica dada por el parámetro de red. Los elementos de matriz de este potencial en la base $\{v_i\}$ se pueden considerar diagonales debido a la ortogonalidad de la base y a la lenta variación de este potencial. Esta aproximación se denomina, en inglés, envelope function approximation [17,26]. La matriz de $H + V$ se puede expresar de una forma más compacta haciendo uso de las matrices \mathbf{T} utilizadas habitualmente en teoría de grupos [26]:

$$T_x = \frac{1}{3\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad (4.9)$$

$$T_y = \frac{-i}{3\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad (4.10)$$

$$T_z = \frac{\sqrt{2}}{3} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

Entonces usando las matrices T_i , $\{i = x, y, z\}$, la matriz \bar{H} se reduce a:

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} (E_c + V)\mathbb{I}_{2 \times 2} & \sqrt{3}P_1\mathbf{T} \cdot \mathbf{k}_\alpha & \frac{-1}{\sqrt{3}}P_1\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_\alpha \\ \sqrt{3}P_2\mathbf{T}^\dagger \cdot \mathbf{k}_\alpha & (E_v + V)\mathbb{I}_{4 \times 4} & 0 \\ \frac{-1}{\sqrt{3}}P_1\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_\alpha & 0 & (E_v - \Delta_0 + V)\mathbb{I}_{2 \times 2} \end{pmatrix}, \quad (4.12)$$

donde $\mathbf{k}_\alpha = (\alpha k_x, \alpha k_y, k_z)$ y $\alpha = P_2/P_1$; donde α , es un parámetro de renormalización propio para éste tipo de estructura cristalina.

Siguiendo el procedimiento basado en la transformación de Foldy-Wouthuysen, análogo al utilizado por Winkler para semiconductores de tipo zincblenda [26], obtenemos una ecuación efectiva, restringida a la banda de conducción, para los estados del electrón en presencia de la impureza:

$$\left[\mathbf{T} \cdot \mathbf{k}_\alpha \frac{3P_1^2}{E - V + E_g} \mathbf{T}^\dagger \cdot \mathbf{k}_\alpha + \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_\alpha \frac{P_1^2}{3(E - V + E_g)} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{k}_\alpha \right] \psi_c = (E - V)\psi_c. \quad (4.13)$$

En el segundo término de la ecuación anterior, y considerando la relación $(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{B}) = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} + i\hat{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{B})$, obtenemos dos términos, uno de los cuales corresponde a la interacción espín-órbita efectiva en la banda de conducción:

$$H_{\text{ext}} = \frac{\epsilon P_1^2}{3} \left[\frac{2}{E_g^2} - \frac{1}{(E_g + \Delta_0)^2} \right] \hat{\sigma} \cdot (\mathbf{k}_\alpha \times \nabla_\alpha V). \quad (4.14)$$

donde $\nabla_\alpha = (\alpha \frac{\partial}{\partial x}, \alpha \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})$. Para obtener esta expresión se realizó la aproximación $E_g \gg E - V$, como se describe en el Apéndice . Ahora podemos identificar la constante de acoplamiento espín-órbita efectiva para semiconductores de tipo wurtzita.

$$\lambda^* = \frac{\epsilon P_1^2}{3} \left[\frac{2}{E_g^2} - \frac{1}{(E_g + \Delta_0)^2} \right] \quad (4.15)$$

De esta forma obtuvimos una expresión del acoplamiento espín-órbita efectivo en la banda de conducción para la wurtzita, análoga a la expresión Ec. (2.9) para zincblenda. Notar que en la expresión para la wurtzita Ec. (4.15), aparece el factor $\alpha = P_2/P_1$ que refleja la anisotropía de la red cristalina. Además, el mismo potencial V de la impureza hidrogenoide carece de simetría esférica en el caso de la wurtzita debido a la anisotropía de la constante dieléctrica ϵ . En lo que sigue, sin embargo, ignoraremos este efecto de anisotropía que es del orden del 10% en las componentes del tensor dieléctrico [29].

En la Tabla 4.1 presentamos los valores de λ^* para los materiales GaN, ZnO, InN y el AlN, que son de gran interés en la actualidad. Se muestran también los parámetros necesarios de cada material, para el cálculo de Ec. (4.15).

	m^*/m_0^a	ϵ^a	E_g [eV]	Δ_0 [meV]	λ^* [10^{-2} \AA^2]
GaN	0.32	9.53	3.51	72.9	5.95
ZnO	0.32	8.62	3.44	43	3.08
InN	0.26	7.39	0.78	40	1.33
AlN	0.38	4.27	5.4	-58.5	-1.04

Tabla 4.1: Constante de acoplamiento espín-órbita efectivo λ^* y sus respectivos parámetros.

^a Tomado de [29]

4.2 Correcciones al nivel de energía $2p$ de la impureza hidrogenoide debidas al acoplamiento espín-órbita extrínseco

La impureza hidrogenoide en un semiconductor es, en primera aproximación, completamente análoga al átomo de hidrógeno. La diferencia entre ambos radica en que en la impureza hidrogenoide la masa del electrón es sustituida por la masa efectiva m^* y la interacción coulombiana es modificada por la constante dieléctrica ϵ del material. La masa efectiva está asociada a la banda de energía correspondiente, es decir, a la banda de conducción en el caso de impurezas donoras y la banda de valencia para impurezas aceptoras. Aquí estamos tratando el caso de impurezas donoras.

El potencial

$$V(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (4.16)$$

de la impureza donora da lugar a estados hidrogénicos centrados en la impureza. La anisotropía de la red cristalina wurtzita induce una anisotropía uniaxial, de alrededor del diez por ciento, tanto en la masa efectiva como en las constantes dieléctricas [29]. Nosotros despreciaremos la pequeña deformación resultante en los estados hidrogénicos,

[30] y adoptaremos los estados estándar isotrópicos de la capa $n = 2$, cuya energía es $E_n = -Ry^*/4$, donde $Ry^* = (m^*/m_0)(1/\epsilon^2)Ry$.

Utilizando las Ecs. (4.14), (4.15) y (4.16) obtenemos el Hamiltoniano de la interacción espín-órbita extrínseca debida al potencial Coulombiano de la impureza donora

$$H_{ext} = \xi^*(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}, \quad (4.17)$$

donde

$$\xi^*(r) = \frac{e^2 \lambda^*}{\epsilon \hbar^2 r^3} = \frac{\xi_0^*}{r^3}. \quad (4.18)$$

A continuación calcularemos las correcciones a primer orden de la energía de la capa $n = 2$ de la impureza hidrogenoide debidas a H_{ext} . Este cálculo es análogo al desarrollo de las correcciones de espín-órbita en el átomo de hidrógeno [16]. Primero planteamos el cálculo de los elementos de matriz de H_{ext} en la base de autoestados de $\{\mathbf{L}^2, L_z, \mathbf{S}^2$ y $S_z\}$:

$$\left\langle n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}, m'_l, m'_s \left| \xi^*(r) \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \right| n = 2; l = 1; s = \frac{1}{2}, m_l, m_s \right\rangle. \quad (4.19)$$

Integrando la parte radial del elemento de matriz obtenemos

$$\xi_{2p}^* \left\langle l = 1; s = \frac{1}{2}, m'_l, m'_s \left| \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \right| l = 1; s = \frac{1}{2}, m_l, m_s \right\rangle, \quad (4.20)$$

donde

$$\xi_{2p}^* = \xi_0^* \int_0^\infty \frac{1}{r^3} |R_{21}(r)|^2 r^2 dr. \quad (4.21)$$

Además, teniendo en cuenta que $R_{21}(r) = \sqrt{1/24a^{*5}} e^{-r/2a^*}$, tenemos

$$\xi_{2p}^* = \frac{\xi_0^*}{24a^{*3}} \quad (4.22)$$

Ahora el problema se reduce a la diagonalización del operador $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, que actúa sólo sobre las variables orbitales angulares y de espín. Para ello introducimos el momento angular total $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$, y la base de autoestados de $\{\mathbf{J}^2, \mathbf{L}^2, \mathbf{S}^2, J_z\}$, $\{|j, l, s, m_j\rangle\}$.

En esta base el Hamiltoniano espín-órbita es diagonal. Los autovalores de $\xi_{2p}^* \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$ dependen sólo de j (no de m_j), y son iguales a [16]:

$$\varepsilon_1 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \left[\frac{3}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = -\xi_{2p}^* \hbar^2 \quad (4.23)$$

para $j = 1/2$, y

$$\varepsilon_2 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \left[\frac{15}{4} - 2 - \frac{3}{4} \right] \hbar^2 = \frac{1}{2} \xi_{2p}^* \hbar^2 \quad (4.24)$$

para $j = 3/2$. Reemplazando ξ_{2p}^* , las energías quedan expresadas en función de las constantes básicas del sistema como:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -\frac{e^2 \lambda^*}{12 \epsilon a^{*3}} \\ \varepsilon_2 &= \frac{e^2 \lambda^*}{24 \epsilon a^{*3}}, \end{aligned} \quad (4.25)$$

y también pueden ser expresadas en términos del Rydberg:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= -\frac{\lambda^* a_0}{6 \epsilon a^{*3}} \text{Ry} \equiv -2 \beta \\ \varepsilon_2 &= \frac{\lambda^* a_0}{12 \epsilon a^{*3}} \text{Ry} \equiv \beta, \end{aligned} \quad (4.26)$$

donde hemos definido la constante β que define una escala característica de energía de la interacción espín-órbita extrínseca y que será utilizada nuevamente en el (Capítulo. 6), cuando estudiaremos el caso de ambas interacciones de espín-órbita combinadas. Las correcciones ε_1 y ε_2 son ilustradas en la Fig. 4.1, en relación a la energía del nivel $2p$. Este gráfico es análogo al que se presenta usualmente para el átomo de hidrógeno. Aquí designamos con ε_1 a la corrección de la energía del estado con $j = 1/2$ y con ε_2 a la del estado con $j = 3/2$. En la Fig. 4.1 se ilustra el caso en que $\varepsilon_1 < \varepsilon_2$, pero como veremos enseguida, esta relación no se cumple para todos los materiales tipo wurtzita. Los valores numéricos de ε_1 y ε_2 son presentados en la Tabla 4.2 junto con los parámetros necesarios para su evaluación. En la última columna de la Tabla 4.2, se muestra el porcentaje de la variación de energía, $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/E_2^*$, que indica la importancia

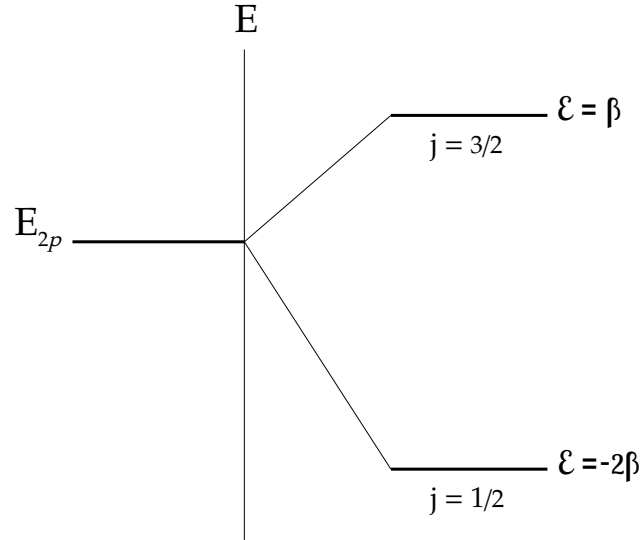


Fig. 4.1: Correcciones a la energía a primer orden.

relativa del splitting causado por la interacción espín-órbita extrínseca en la impureza hidrogenoide. Vemos que el splitting es unos 4 órdenes de magnitud menor que la energía del nivel $2p$ no perturbado. Este ratio es pequeño pero no es despreciable ya que, de hecho, es similar al obtenido para el átomo de hidrógeno, que es igual a 0.00133 % [16]. Vale la pena enfatizar que esta similitud no estaba garantizada a priori, ya que la renormalización del coeficiente λ es muy marcada (6 órdenes de magnitud) y podría haber producido resultados cualitativamente diferentes a los del átomo de hidrógeno.

Como se mencionó anteriormente, en la Tabla 4.2 vemos que hay un material, el nitruro de aluminio (AlN), para el cual se invierte la relación entre ε_1 y ε_2 . Esta singularidad proviene de las características de la estructura electrónica del AlN, que determinan que el coeficiente efectivo λ^* sea negativo (ver Tabla 4.1).

	a^* [Å]	λ^* [10^{-2} Å ²]	E_2^* [meV]	ε_1 [μeV]	ε_2 [μeV]	$(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/E_2^*$ [%]
GaN	15.8	5.95	11.97	-1.94	0.968	0.0243
ZnO	14.1	3.08	14.65	-1.56	0.779	0.0159
InN	15.2	1.33	16.2	-0.625	0.313	0.0057
AlN	5.9	-1.04	70.85	14.50	-7.25	-0.0307

Tabla 4.2: Correcciones por interacción espín-órbita extrínseca a la energía del nivel $2p$ de impurezas donoras hidrogenoides en diferentes semiconductores tipo wurtzita, con sus respectivos parámetros. Las masas efectivas y las constantes dieléctricas utilizadas se encuentran en la Tabla 4.1

Capítulo 5

Impurezas hidrogenoides donoras en semiconductores con estructura cristalina wurtzita: acoplamiento espín-órbita intrínseco

En el Capítulo anterior estudiamos los efectos del acoplamiento espín-órbita extrínseco en los niveles de energía de las impurezas hidrogenoides donoras para el caso de semiconductores con estructura cristalina wurtzita. Dicha descripción es incompleta debido a la presencia de la interacción espín-órbita intrínseca o de Dresselhaus [19]. Esta interacción es propia de nuestro sistema de impureza hidrogenoide por estar inmerso en la estructura cristalina del material semiconductor. Desarrollaremos el formalismo necesario para estudiar esta interacción en los materiales con red cristalina wurtzita y lo aplicaremos a los mismos materiales analizados en el Capítulo anterior (GaN, ZnO, InN y el AlN) con el fin de comparar la importancia relativa de ambas interacciones espín-órbita.

En el Capítulo 3, vimos que la interacción espín-órbita intrínseca no produce correcciones a la energía de las impurezas en los materiales con red de tipo zincblenda. Esta situación no se repite para la red wurtzita debido al rompimiento de la simetría cúbica que en ella ocurre.

5.1 Hamiltoniano del acoplamiento espín-órbita intrínseco

Para comenzar el estudio del caso intrínseco, tomamos la expresión del Hamiltoniano de la interacción espín-órbita intrínseca o de Dresselhaus de estructuras cristalinas tipo wurtzita [13,22,31] Donde el término $\alpha_w \hat{\Omega}^{(1)}(\mathbf{k})$ es lineal en k y el término $\gamma_w \hat{\Omega}^{(3)}(\mathbf{k})$ es cúbico en k , y α_w y γ_w son parámetros específicos de cada material. Estos parámetros son obtenidos experimentalmente o por medio de cálculos ab-initio. La dependencia en \mathbf{k} de H_{int} viene dada por:

$$\hat{\Omega}^{(1)}(\mathbf{k}) = (k_y, -k_x, 0), \quad (5.1)$$

$$\hat{\Omega}^{(3)}(\mathbf{k}) = (b k_z^2 - k_{\parallel}^2)(k_y, -k_x, 0). \quad (5.2)$$

Aquí b es un parámetro específico para cada material con estructura cristalina wurtzita, aunque su valor ronda a 4 para todos los materiales (ver Tabla 5.1). Además, $k_{\parallel}^2 = (k_x^2 + k_y^2)$. Entonces tenemos:

$$H_{\text{int}} = \alpha_w (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \gamma_w (b k_z^2 - k_{\parallel}^2)(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \quad (5.3)$$

Nuestro objetivo es calcular las correcciones a la energía del nivel E_2 producidas por este Hamiltoniano. Como en capítulos anteriores, utilizaremos la teoría de perturbaciones a primer orden. Para este cálculo, es conveniente expresar el Hamiltoniano H_{int} en la

base de autoestados de $\{L^2, L_z, S^2, S_z\}$ de la impureza hidrogenoide, dado por:

$$\begin{aligned}
\psi_{200\eta} &= \left(\frac{1}{32\pi a^{*3}}\right)^{\frac{1}{2}} \left(2 - \frac{r}{a^*}\right) e^{-r/2a^*} |\eta\rangle \\
\psi_{211\eta} &= \frac{1}{a^*} \left(\frac{1}{64\pi a^{*3}}\right)^{\frac{1}{2}} (x + iy) e^{-r/2a^*} |\eta\rangle \\
\psi_{210\eta} &= \frac{1}{a^*} \left(\frac{1}{32\pi a^{*3}}\right)^{\frac{1}{2}} z e^{-r/2a^*} |\eta\rangle \\
\psi_{21-1\eta} &= -\frac{1}{a^*} \left(\frac{1}{64\pi a^{*3}}\right)^{\frac{1}{2}} (x - iy) e^{-r/2a^*} |\eta\rangle,
\end{aligned} \tag{5.4}$$

donde $\eta = \{\uparrow, \downarrow\}$. Los elementos de matriz en estos estados del término lineal en k de H_{int} son nulos, de modo que sólo contribuye el término cúbico. De este modo obtenemos la matriz de H_{int} en el subespacio $n = 2$; los vectores están ordenados de la siguiente forma: $|200 \uparrow\rangle$, $|200 \downarrow\rangle$, $|211 \uparrow\rangle$, $|211 \downarrow\rangle$, $|210 \uparrow\rangle$, $|210 \downarrow\rangle$, $|21 - 1 \uparrow\rangle$ y $|21 - 1 \downarrow\rangle$, por tanto la matriz es:

$$\bar{H}_{\text{int}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.5}$$

donde A y B son

$$\begin{aligned}
A &= \frac{\gamma_w}{32\sqrt{2} a^{*3}} \left(\frac{14}{15}b + \frac{133}{60}\right) \\
B &= \frac{\gamma_w}{32\sqrt{2} a^{*3}} \left(\frac{62}{15}b + \frac{433}{60}\right).
\end{aligned} \tag{5.6}$$

Para encontrar los autovalores de \bar{H}_{int} planteamos $\det(\bar{H}_{\text{int}} - \varepsilon \bar{I}) = 0$, y la ecuación de autovalores queda

$$\varepsilon^4 - \varepsilon^2(A^2 + B^2) + (A - B)^2 = 0. \quad (5.7)$$

Los autovalores son $\varepsilon_{1,2} = \pm A$ y $\varepsilon_{3,4} = \pm B$. Los autoestados correspondientes a estos autovalores son:

$$|\chi_1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_{200\uparrow}\rangle + \psi_{211\downarrow}\rangle] \quad (5.8)$$

$$|\chi_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|\psi_{200\uparrow}\rangle + \psi_{211\downarrow}\rangle] \quad (5.9)$$

$$|\chi_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [|\psi_{200\downarrow}\rangle + \psi_{21-1\uparrow}\rangle] \quad (5.10)$$

$$|\chi_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [-|\psi_{200\downarrow}\rangle + \psi_{21-1\uparrow}\rangle] \quad (5.11)$$

Los autovalores ε_5 hasta ε_8 son degenerados e iguales a 0. El subespacio asociado a este autovalor nulo es generado por los cuatro estados siguientes: $\{|\psi_{211\uparrow}\rangle, |\psi_{210\uparrow}\rangle, |\psi_{210\downarrow}\rangle, |\psi_{21-1\downarrow}\rangle\}$, que no aparecen en la expresión de los autoestados anteriores, {(5.8)..(5.11)}.

Es interesante notar que H_{int} y J_z conmutan, es decir:

$$[H_{\text{int}}, J_z] = 0. \quad (5.12)$$

Para verificar esta relación, modificamos ligeramente la Ec. (5.3) usando que $S_i = \frac{\hbar}{2}\sigma_i$ y $k_i = \frac{\hbar}{i}p_i$, con $i = x, y, z$. De este modo obtenemos

$$H_{\text{int}} = -2i\alpha_w(S_x p_y - S_y p_x) + 2i\hbar\gamma_w(b p_z^2 - p_{\parallel}^2)(S_x p_y - S_y p_x) \quad (5.13)$$

y con esta expresión se puede demostrar que $[H_{\text{int}}, L_z + S_z] = 0$. El hecho de que H_{int} y J_z conmuten quiere decir que es posible encontrar una base de autoestados comunes a ambos. Vemos que los autoestados $\{\chi_i, i = 1 \dots 8\}$ dados arriba son, en efecto, autoestados de J_z . Notamos, sin embargo, que dentro del subespacio degenerado con autovalor nulo, uno podría elegir los autoestados de H_{int} de manera que no sean autoestados de J_z .

En la Tabla 5.1 presentamos los valores de estas correcciones a primer orden para los cuatro materiales estudiados anteriormente, junto con los parámetros γ_w y b de cada uno de ellos.

	γ_w [meVÅ ³]	b	$\varepsilon_{1,2}$ [μeV]	$\varepsilon_{3,4}$ [μeV]	E_2^* [meV]	$2A/E_2^*$ [%]	$2B/E_2^*$ [%]
GaN	400	3.954	± 13.24	± 52.79	11.97	0.2212	0.8820
ZnO	320	3.855	± 14.67	± 58.39	14.65	0.2002	0.7971
InN	345	4.885	± 14.71	± 59.49	16.20	0.1816	0.7344
AlN	6.45	3.7674	± 3.98	± 15.81	70.86	0.0112	0.0446

Tabla 5.1: Correcciones por interacción espín-órbita intrínseca a la energía del nivel $2p$ de impurezas donoras hidrogenoides en diferentes semiconductores tipo wurtzita, con sus respectivos parámetros. Las masas efectivas y las constantes dieléctricas utilizadas para calcular E_2^* se encuentran en la Tabla 4.1

.

En la Tabla 5.1 consignamos el cociente entre $\varepsilon_1 - \varepsilon_2 = 2A$, $\varepsilon_3 - \varepsilon_4 = 2B$ y E_2^* para indicar splittings típicos causados por la interacción intrínseca. Las correcciones a la energía de la interacción espín-órbita intrínseca son aproximadamente un orden de magnitud más grandes que las de la interacción extrínseca, como puede verse en la última columna de las Tablas (4.2) y (5.1). Además, remarcamos que la interacción intrínseca produce un mayor rompimiento de la degeneración que la extrínseca.

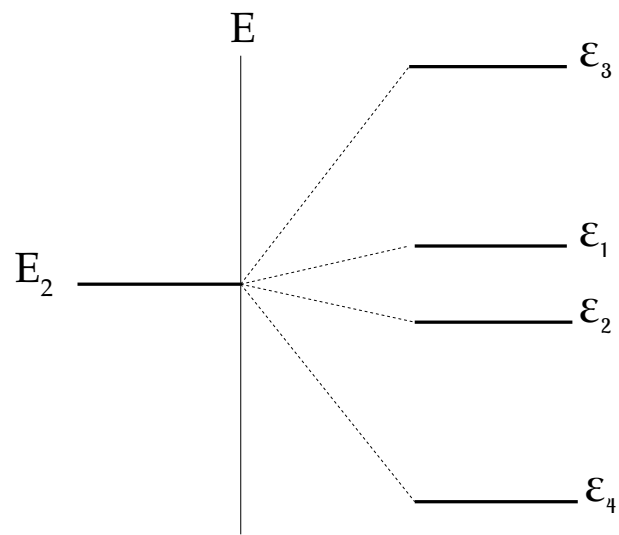


Fig. 5.1: Representación esquemática de las correcciones a la energía del nivel $n = 2$ de la impureza hidrogenoide a primer orden en la interacción espín-órbita intrínseca.

Capítulo 6

Interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca combinadas para semiconductores con estructura cristalina tipo wurtzita

En los capítulos anteriores hemos analizado por separado los splittings de energía causados por las interacciones espín-órbita extrínseca (Capítulo 4) e intrínseca (Capítulo 5). Vimos que la interacción intrínseca produce splittings más grandes y mayor rompimiento de la degeneración del nivel E_2 de la impureza hidrogenoide. En realidad, vimos que mientras que la interacción extrínseca sólo acopla los estados de la subcapa $2p$, la interacción intrínseca mezcla los estados de las dos subcapas, $2s$ y $2p$. Las descripciones anteriores fueron útiles para comprender los efectos de los dos tipos de acoplamiento espín-órbita individualmente. Sin embargo, para obtener una descripción completa del problema es necesario estudiar la situación real en la que ambas interacciones se pre-

sentan juntas. En este caso, esperamos un acoplamiento de todos los estados del nivel E_2 , y un mayor rompimiento de la degeneración.

6.1 Planteamiento del problema y solución analítica

Ahora consideramos el caso combinado de las interacciones espín-órbita extrínseca e intrínseca. El Hamiltoniano efectivo completo de la impureza hidrogenoide en el bulk es:

$$H = H_0^* + H_{\text{ext}} + H_{\text{int}}, \quad (6.1)$$

donde

$$H_0^* = \frac{P^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}), \quad (6.2)$$

donde $V(\mathbf{r})$ es el potencial de la impureza donora dado en la Ec. (4.16). H_{ext} es la interacción espín-órbita extrínseca y fue dada en la Ec. (4.2) con la Ec. (4.15). La interacción espín-órbita intrínseca, H_{int} , fue dada en la Ec. (5.3). $H_{\text{ext}} + H_{\text{int}}$ representa la perturbación espín-órbita completa de la impureza. Nuevamente realizaremos un tratamiento perturbativo a primer orden en el Hamiltoniano de espín-órbita. Para ello expresaremos el acoplamiento espín-órbita en la base desacoplada del nivel E_2 , $\{|l, s; m_l, m_s\rangle\}$, la misma que utilizamos en el análisis de H_{int} en el Capítulo 5. Con el fin de calcular los elementos de matriz de H_{ext} en los estados de esta base, utilizaremos su expresión en la base acoplada, $\{|l, s, j, m_j\rangle\}$ (autoestados de J^2 y J_z) (ver Capítulo 4) y haremos un cambio de base. Dicho cambio de base se realiza utilizando los coeficientes de Clebsch-Gordan (C_{j,m_j}):

$$|l, s; m_l, m_s\rangle = \sum_{j,m_j} C_{j,m_j} |l, s, j, m_j\rangle. \quad (6.3)$$

Con lo cual vamos a escribir la base desacoplada $\{|l, s; m_l, m_s\rangle\}$ en términos de la base acoplada $\{|l, s, j, m_j\rangle\}$ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
|l=0, s=\frac{1}{2}; m_l=0, m_s=+\frac{1}{2}\rangle &= |l=0, s=\frac{1}{2}, j=\frac{1}{2}, m_j=\frac{1}{2}\rangle \\
|0, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}\rangle &= |0, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; 1, +\frac{1}{2}\rangle &= |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; -1, +\frac{1}{2}\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}}|1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle \\
|1, \frac{1}{2}; -1, -\frac{1}{2}\rangle &= |1, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle.
\end{aligned} \tag{6.4}$$

La matriz del Hamiltoniano espín-órbita completo incluyendo ambas interacciones intrínseca y extrínseca en la base desacoplada es:

$$H_{\text{ext}} + H_{\text{int}} = \begin{pmatrix} -\varepsilon & 0 & 0 & A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & \beta - \varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A & 0 & 0 & -\beta - \varepsilon & \sqrt{2}\beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\beta & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\varepsilon & \sqrt{2}\beta & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\beta & -\beta - \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \beta - \varepsilon \end{pmatrix} \tag{6.5}$$

donde β fue definido en la Ec. (4.26) y A y B fueron definidas en las Ecs. (5.6). El polinomio característico que resuelve el problema del acoplamiento intrínseco y extrínseco es:

$$\varepsilon^2(\varepsilon - \beta)^2(\varepsilon\beta + \varepsilon^2 - A^2 - 2\beta^2)(\varepsilon\beta + \varepsilon^2 - B^2 - 2\beta^2) = 0. \quad (6.6)$$

Sus autovalores son:

$$\varepsilon^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{1,2} = 0, \quad (6.7)$$

$$(\varepsilon - \beta)^2 = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{3,4} = \beta, \quad (6.8)$$

$$\varepsilon^2 + \varepsilon\beta - (A^2 + 2\beta^2) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{5,6} = -\frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4}\beta^2 + A^2}, \quad (6.9)$$

$$\varepsilon^2 + \varepsilon\beta - (B^2 + 2\beta^2) = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{7,8} = -\frac{\beta}{2} \pm \sqrt{\frac{9}{4}\beta^2 + B^2}. \quad (6.10)$$

Cabe destacar que las soluciones de las Ecs. (6.7) a (6.10) contienen los dos casos anteriores de interacción espín-órbita. Tomando $A = B = 0$ se recupera el caso extrínseco (Ec. (4.26)), mientras que con $\beta = 0$ se obtiene el caso intrínseco (Ec. (5.7)).

Los autoestados correspondientes a estos autovalores, expandidos en la base desacoplada, son:

$$|\chi_1\rangle = -\frac{\sqrt{2}\beta}{A} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.11)$$

$$|\chi_2\rangle = -\frac{\sqrt{2}\beta}{B} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.12)$$

$$|\chi_3\rangle = \left| 1, \frac{1}{2}; 1, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.13)$$

$$|\chi_4\rangle = \left| 1, \frac{1}{2}; -1, -\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.14)$$

$$|\chi_5\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}\beta} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle - \frac{\beta - \Omega_A}{2\sqrt{2}\beta} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.15)$$

$$|\chi_6\rangle = \frac{A}{\sqrt{2}\beta} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{-\beta - \Omega_A}{2\sqrt{2}\beta} \left| 1, \frac{1}{2}; 1, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; 0, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.16)$$

$$|\chi_7\rangle = \frac{B(\Omega_B + \beta)}{2\omega_B} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{B(\Omega_B + \beta)}{\sqrt{2}\omega_B} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; -1, +\frac{1}{2} \right\rangle \quad (6.17)$$

$$|\chi_8\rangle = \frac{B(\beta - \Omega_B)}{2\omega_B} \left| 0, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{B(\beta - \Omega_B)}{\sqrt{2}\omega_B} \left| 1, \frac{1}{2}; 0, -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| 1, \frac{1}{2}; -1, +\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (6.18)$$

Hemos llamado $\Omega_A = \sqrt{9\beta^2 + 4A^2}$, $\Omega_B = \sqrt{9\beta^2 + 4B^2}$ y $\omega_B = 2\beta^2 + B^2$.

Como vimos en el Capítulo 5, el Hamiltoniano de la interacción espín-órbita intrínseca H_{int} (Ec. (5.3)), conmuta con J_z ; o sea $[H_{\text{int}}, J_z] = 0$. Por otra parte, se sabe que $[H_0^* + H_{\text{ext}}, J_z] = 0$ [16]. Con lo cual el Hamiltoniano completo también conmuta con J_z , es decir:

$$[H, J_z] = [H_0^* + H_{\text{ext}} + H_{\text{int}}, L_z + S_z] = 0. \quad (6.19)$$

Recordamos al lector que H_0^* está dado en la Ec. (6.2) y H_{ext} está dado en la Ec. (4.2) con Ec. (4.15). El hecho de que $[H, J_z] = 0$ implica que existe una base de autoestados comunes a los dos operadores. La base $\{\chi_i, i = 1 \dots 8\}$ es efectivamente una base común de ambos H y J_z , como puede verificarse calculando a simple vista el autovalor de J_z , $m_j = m_l + m_s$, para los estados $\{\chi_i\}$.

6.2 Ejemplos de las correcciones a la energía del nivel E_2 para materiales GaN, ZnO, InN y AlN

En esta sección mostramos resultados comparativos de la interacción espín-órbita combinada para los diferentes materiales semiconductores tipo wurtzita considerados en los dos capítulos anteriores. Obtendremos tanto los valores absolutos de los splittings de energía como los porcentajes de E_2 (energía no perturbada) que representan, con el fin de comparar su importancia relativa en los distintos materiales.

En primer lugar graficamos en forma esquemática los valores de ε_i de las Ecs. (6.7) - (6.10) y los presentamos en la Fig 6.1. En esta gráfica podemos apreciar cualitativamente el splitting de los autovalores de energía y se puede ver que hay un mayor rompimiento de la degeneración con los dos tipos de acoplamientos que en el caso de

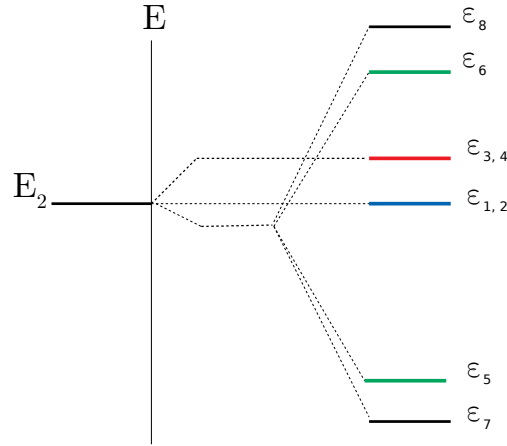


Fig. 6.1: Representación esquemática de las correcciones a la energía del nivel $n = 2$ de la impureza hidrogenoide a primer orden en las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca combinadas.

los acoplamientos por separado (Capítulos 4 y 5). De todos modos, se ve que la degeneración de los autoestados $\varepsilon_{1,2}$ y $\varepsilon_{3,4}$ aún permanece.

En segundo lugar, calculamos los autovalores ε_i usando los valores de A , B y β correspondientes a GaN, ZnO, InN y AlN (ver Capítulos 4 y 5); estos resultados los presentamos en la Tabla 6.1. Los autovalores $\varepsilon_{1,2}$ son cero para todos los materiales, es

	$\varepsilon_{3,4}$ [μeV]	ε_5 [μeV]	ε_6 [μeV]	ε_7 [μeV]	ε_8 [μeV]
GaN	0.23	-13.36	13.13	-54.71	54.48
ZnO	4.90	-49.39	44.94	-60.78	56.33
InN	0.76	-15.42	14.66	-61.31	60.63
AlN	-20.15	-20.44	40.58	-17.56	37.70

Tabla 6.1: Correcciones por las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca combinadas a la energía del nivel E_2 , en impurezas donoras hidrogenoides en diferentes materiales semiconductores de estructura cristalina tipo wurtzita.

decir no hay corrección a la energía de los estados correspondientes. Los autovalores $\varepsilon_{3,4}$ son positivos en los materiales GaN, ZnO y el InN; pero para el nitruro de aluminio (AlN) estos autovalores cambian de signo. Los motivos por los que se presenta una singularidad en el AlN están principalmente relacionados con los parámetros de su estructura electrónica: Δ_0 , γ_w y a^* . Este cambio de signo ya fue mencionado para el caso de la interacción extrínseca, ver Capítulo 4 en la Tabla (4.1). Para interpretar este cambio de signo mencionamos los aspectos mas relevantes, que son:

- La energía de *split-off* (Δ_0) es negativa en el AlN, mientras que para los otros materiales es positiva. Esto produce que la constante de acoplamiento extrínseco, λ^* , sea también negativa (ver Tabla 4.1), mientras que en los otros materiales es positiva. Esta es la razón mas importante del cambio de signo de $\varepsilon_{3,4}$ en AlN.
- El parámetro γ_w es menor por dos órdenes de magnitud respecto de los otros materiales (ver Tabla 4.1).
- El radio de Bohr efectivo, a^* , del AlN es mucho menor que en los demás compuestos (ver Tabla 4.1).

Por último, $\varepsilon_{3,4}$ sólo dependen de β ; es decir, están formados sólo por el acoplamiento espín-órbita extrínseco, Ec. (4.26). Los autovalores $\varepsilon_{5,6}$ dependen tanto de β como de A ; es decir dependen de ambos tipos de acoplamiento, Ec. (6.10). Los autovalores $\varepsilon_{7,8}$ también dependen de β ; pero en este caso de B en lugar de A , nuevamente hay una combinación de ambos acoplamientos, Ec. (6.10). Recordar que las constantes A y B involucradas vienen del acoplamiento espín-órbita intrínseco, como se muestra en la Ec. (5.7).

En la Fig. 6.2 presentamos un esquema a escala de los valores de las correcciones de la energía ε_i $\{i = 1 \dots 8\}$ del nivel E_2 debido a las interacciones espín-órbita intrínseca

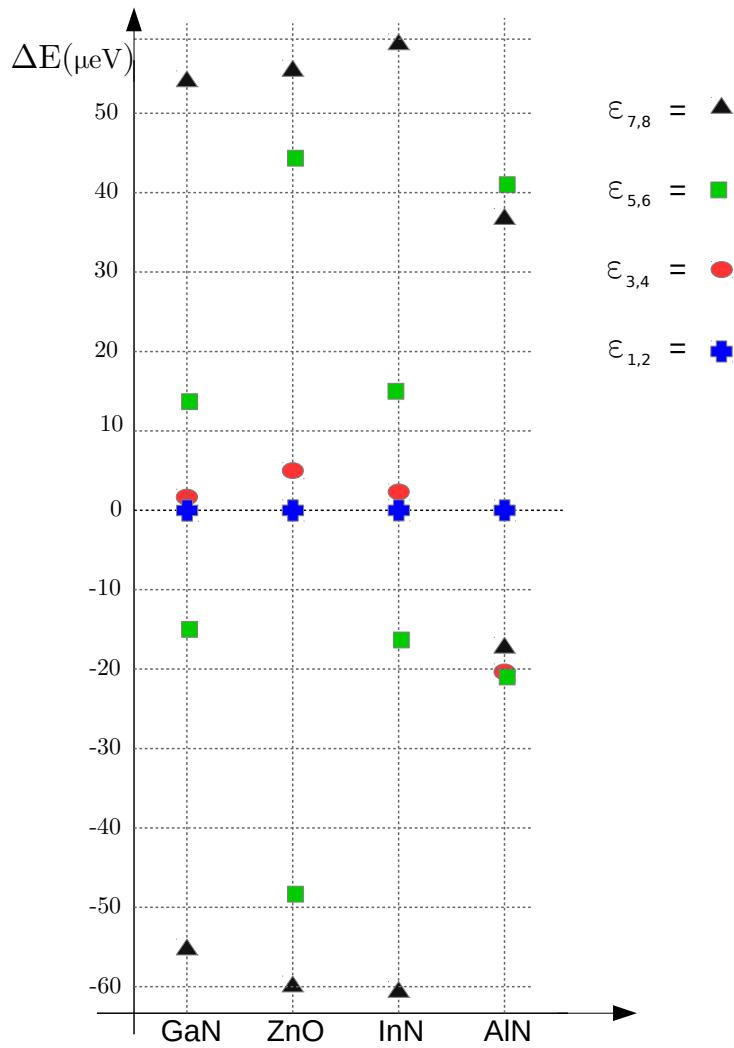


Fig. 6.2: GaN, ZnO, InN y AlN y sus correcciones a la energía del nivel $n = 2$, debido a las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca combinadas.

y extrínseca combinadas, donde se puede comparar el efecto del splitting para cada material. Podemos ver claramente que para $\varepsilon_{1,2}$ (cruces azules) no hay contribución a la energía E_2 ; o sea, no hay rompimiento de la degeneración. Los autovalores $\varepsilon_{3,4}$ (círculo rojo) rompen parcialmente la degeneración, ya que son no nulos pero iguales entre sí en todos los materiales. Los autovalores restantes rompen completamente la degeneración en todos los materiales.

En GaN, ZnO y AlN los autovalores $\varepsilon_{7,8}$ (triángulos negros) son los que tienen el mayor splitting para cada material, y además son cercanos en sus valores para los tres materiales. Cabe destacar, como ya mencionamos anteriormente, que los autovalores $\varepsilon_{7,8}$ dependen de β y de B . Por el contrario, en el nitruro de aluminio (AlN) estos autovalores no tienen el mayor splitting de energía; para este material el mayor splitting lo dan los autovalores $\varepsilon_{5,6}$ (cuadrados verdes). Comparado con el de los otros tres materiales, el splitting de los autovalores $\varepsilon_{7,8}$ para el AlN es sensiblemente menor.

Los autovalores $\varepsilon_{5,6}$ (cuadrados verdes) tiene un comportamiento variado para los distintos materiales. Para el GaN y el InN, sus splitting son similares, mientras que para el ZnO tiene un splitting sensiblemente mayor. Para el nitruro de aluminio (AlN) estos autovalores vienen a dar la mayor contribución a la energía E_2 debido a la interacción espín-órbita. Estos autovalores $\varepsilon_{5,6}$ dependen de β y de A .

Por otro lado, en la Fig. 6.3 mostramos los splittings de energía para cada material, utilizando el formato de la Fig. 6.1 y los valores de la Tabla 6.1. En la Fig. 6.3 seguimos el mismo código de colores que en las Figs. 6.1 y 6.2. Aquí mostramos de una manera más específica como es el splitting de energía de cada material (ver Tabla 6.2). Como ya vimos el AlN se sale del comportamiento de los otros semiconductores tipo wurtzita que hemos venido estudiando. El autovalor $\varepsilon_{3,4}$, que sólo depende de β , es negativo, algo que no ocurre con los otros materiales. El valor más bajo de energía corresponde

al autovalor ε_5 (que depende de β y A), mientras que para el resto de los materiales es ε_7 (que depende de β y B). Al igual que su máximo valor de energía corresponde al autovalor ε_6 (que depende de β y A), mientras que en los demás es ε_8 (que depende de β y B). En los otros materiales las relaciones entre sus autovalores se mantienen como se muestra en la Fig. 6.1.

Otra manera de ver como son los splittings de energía es calculando sus porcentajes con respecto a la energía del nivel no perturbado. En las dos últimas columnas de la Tabla 6.3 se muestran los porcentajes $(\varepsilon_6 - \varepsilon_5)/E_2^*$ y $(\varepsilon_8 - \varepsilon_7)/E_2^*$, que corresponden a la combinación de los dos tipos de acoplamiento e indican la importancia relativa del splitting causado por la interacción espín-órbita combinada de la impureza hidrogenoide. Para facilitar la comparación con el caso intrínseco puro se muestran también los mismos porcentajes cuando $\beta = 0$ en las columnas 4 y 5. Con $\beta = 0$ tenemos que $(\varepsilon_6 - \varepsilon_5)/E_2^* = 2A/E_2^*$ y $(\varepsilon_8 - \varepsilon_7)/E_2^* = 2B/E_2^*$. (Los valores de las correcciones, $2A/E_2^*$ y $2B/E_2^*$, son los mismos valores mostrados en la Tabla 5.1.) Además presentamos en la columna 3 los splitting relativos del caso extrínseco, que son iguales a $3\beta/E_2^*$. Se puede apreciar que los splittings son mayores en el caso combinado que en el intrínseco puro. De igual manera, al comparar el splitting con el caso extrínseco puro se ve que es mucho mayor el combinado. Además, como ya mencionamos, hay un rompimiento mayor de la degeneración en el caso combinado, que surge del hecho de que los dos tipos de acoplamiento rompen (parcialmente) la degeneración de diferente manera.

	E_2^* [meV]	$3\beta/E_2^*$ [%]	$2A/E_2^*$ [%]	$2B/E_2^*$ [%]	$(\varepsilon_6 - \varepsilon_5)/E_2^*$ [%]	$(\varepsilon_8 - \varepsilon_7)/E_2^*$ [%]
GaN	11.97	0.0057	0.2212	0.8820	0.2213	0.9122
ZnO	14.65	0.1003	0.2002	0.7971	0.6439	0.7994
InN	16.20	0.0141	0.1816	0.7344	0.1897	0.7527
AlN	70.86	0.0853	0.0112	0.0446	0.0861	0.0779

Tabla 6.2: Porcentajes de las correcciones por las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca individualmente y combinadas a la energía del nivel E_2 de impurezas donoras hidrogenoides en diferentes semiconductores tipo wurtzita.

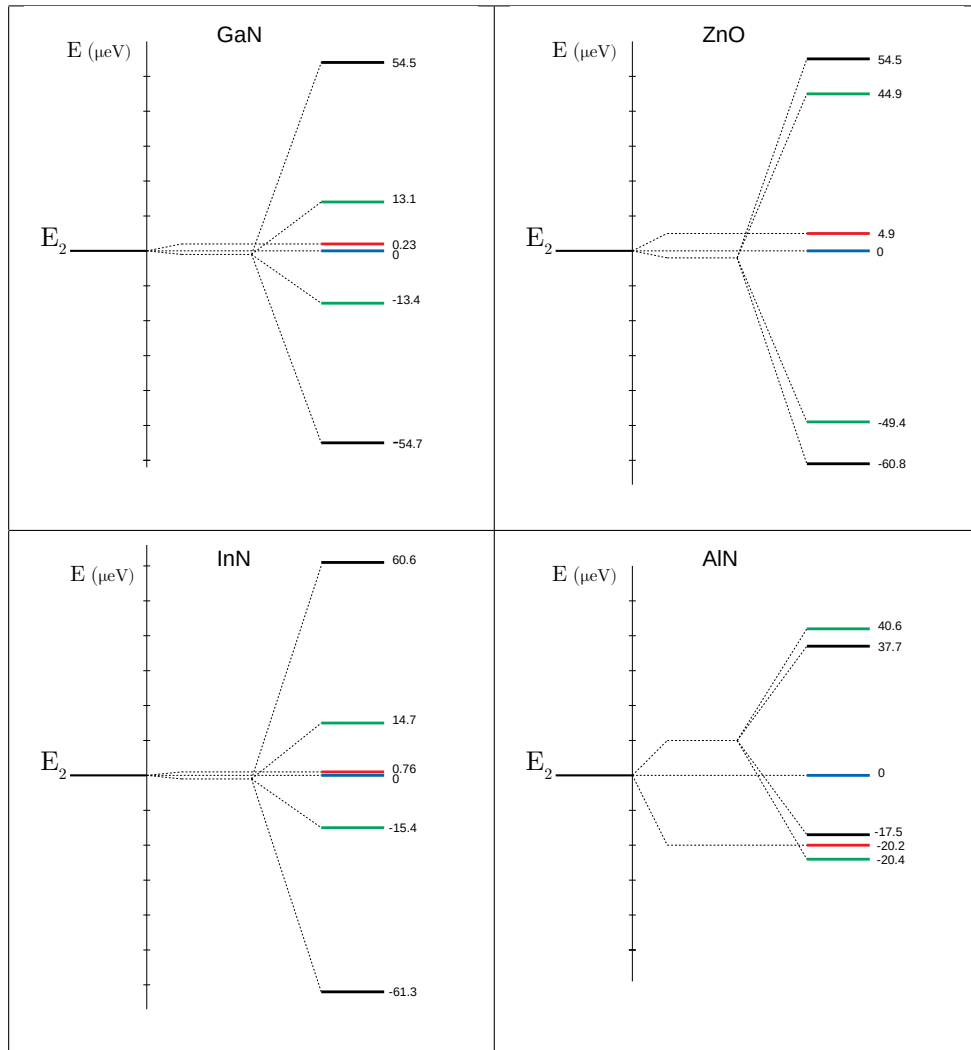


Fig. 6.3: Correcciones de la energía del nivel $n = 2$ de la impureza hidrogenoide a primer orden en las interacciones espín-órbita intrínseca y extrínseca, para cada uno de diferentes materiales semiconductores tipo wurtzita.

Capítulo 7

Conclusiones

En el estudio de una impureza hidrogenoide en un sólido, más precisamente la interacción espín-órbita en semiconductores con estructuras cristalinas tipo zincblenda y wurtzita, encontramos que este tipo de interacción contribuye de diferente manera a la energía del nivel E_2 . En especial, vimos que la interacción intrínseca (Dresselhaus) para la zincblenda no contribuye a la energía E_2 , mientras que para la wurtzita sí. En cambio, observamos que la interacción extrínseca sí contribuye a la energía E_2 para los dos tipos de estructuras cristalinas. A continuación detallamos los efectos de ambos tipos de interacción espín-órbita en una impureza hidrogenoide en semiconductores con estructura cristalina zincblenda y wurtzita.

Para los semiconductores con estructura cristalina zincblenda, estudiamos en primer lugar el acoplamiento espín-órbita intrínseco o de Dresselhaus. Este tipo de estructura cristalina posee simetría cúbica; el Hamiltoniano de Dresselhaus en este caso tiene términos que son cúbicos en k , simétricos en cada una de sus componentes. Al calcular sus elementos de matriz en los estados de la impureza hidrogenoide de la capa $n = 2$,

vimos que muchos de los términos del integrando tienen alguna función impar por lo menos en una de sus coordenadas cartesianas (x, y, z) . Entonces, tras la integración en todo el espacio entre $-\infty$ y ∞ en las tres coordenadas dichos términos no contribuyen al elemento de matriz. Este mismo comportamiento ocurre con la mayoría de los elementos de matriz dentro de las subcapas $l = 0$ o $l = 1$, y con los elementos de matriz intersubcapa con espines opuestos.

Por otro lado tenemos que los elementos de matriz $H_{200\uparrow,210\uparrow}$, $H_{200\downarrow,210\downarrow}$, no se cancelan por paridad como en los casos anteriores; sino que la cancelación se produce de a pares de términos que sólo difieren en un intercambio de las variables x e y . Lo mismo ocurre para el elemento de matriz $H_{200\downarrow,210\downarrow}$. En conclusión, toda la matriz H_{int} es nula, y por lo tanto la interacción espín-órbita intrínseca en las redes zincblenda no contribuye a la energía en la capa $n = 2$.

Para calcular las correcciones a la energía debida al acoplamiento extrínseco, que se relaciona con el Hamiltoniano efectivo de Rashba, calculamos los valores de energía ε_1 y ε_2 como se muestra en la Fig. 3.1. Este procedimiento es análogo al que se presenta usualmente para el átomo de hidrógeno.

En la Tabla 3.1 mostramos los diferentes parámetros usados para calcular las constantes de acoplamiento efectivas de los materiales zincblenda (Ec. (2.9)), y los diferentes valores de energía del nivel $2p$. Los valores numéricos de ε_1 y ε_2 son presentados en la Tabla 3.2, junto con los parámetros de radio efectivo a^* y constante de acoplamiento efectiva λ^* , necesarios para el cálculo de las energías que corrigen al nivel E_2 . Podemos decir que, para los semiconductores con estructura cristalina zincblenda, solo hay corrección a la energía debida al acoplamiento extrínseco, ya que el intrínseco es completamente nulo.

Para la otra estructura cristalina, la wurtzita, consideramos primero el acoplamiento extrínseco, para lo cual fue necesario adaptar el Hamiltoniano efectivo de Rashba. Esto se debe a que la constante de acoplamiento no se encontraba disponible en la literatura. Concretamente, utilizamos el formalismo de Foldy y Wouthuysen para obtener en forma analítica el coeficiente de acoplamiento espín-órbita en una red como la wurtzita que no presenta simetría cúbica. Las correcciones ε_1 y ε_2 son ilustradas en la Fig. 4.1, en relación a la energía del nivel $2p$. Los valores numéricos de ε_1 y ε_2 son presentados en la Tabla 4.2, junto con sus respectivos parámetros. En la última columna de la Tabla 4.2, se muestra el porcentaje de la variación de energía, $(\varepsilon_2 - \varepsilon_1)/E_2^*$, que indica la importancia relativa del splitting causado por la interacción espín-órbita extrínseca en la impureza hidrogenoide. Vemos que el splitting es unos 4 órdenes de magnitud menor que la energía del nivel $2p$ no perturbado. Este ratio es pequeño pero no es despreciable ya que, de hecho, es similar al obtenido para el átomo de hidrógeno, que es igual a 0.00133 % [16]. Vale la pena enfatizar que esta similitud no estaba garantizada a priori, ya que la renormalización del coeficiente λ es muy marcada (6 órdenes de magnitud) y podría haber producido resultados cualitativamente diferentes a los del átomo de hidrógeno.

En la Tabla 4.2 vemos que hay un material, el nitruro de aluminio (AlN), para el cual se invierte la relación entre ε_1 y ε_2 . Esta singularidad proviene de las características de la estructura electrónica del AlN, que determinan que el coeficiente efectivo λ^* sea negativo (ver Tabla 4.1).

Luego tomamos el Hamiltoniano de Dresselhaus o intrínseco para una estructura cristalina wurtzita. Cabe destacar que en este tipo de estructuras no hay simetría cúbica. Los elementos de matriz de este Hamiltoniano no son nulos como en el caso de la zínblenda. Por lo tanto, en este caso sí hay correcciones por interacción espín-órbita intrínseca a la energía del nivel E_2 de impurezas donoras hidrogenoides. En la

Tabla 5.1 presentamos los valores de estas correcciones a primer orden para los cuatro materiales estudiados (GaN, ZnO, InN, AlN), junto con los parámetros γ_w y b de cada uno de ellos. Las correcciones a la energía de la interacción espín-órbita intrínseca son aproximadamente un orden de magnitud más grandes que las de la interacción extrínseca, como puede verse en la última columna de las Tablas (4.2) y (5.1). Además, es importante remarcar que la interacción intrínseca produce un mayor rompimiento de la degeneración que la extrínseca.

Para una descripción más completa y realista del problema, es necesario considerar que en las impurezas en una red tipo wurtzita ambas interacciones se presentan juntas. De una manera más específica mostramos cómo es el splitting de la energía E_2 de cada material considerado (ver Tabla 6.1). También, otra manera de ver como son los splittings de energía, es mediante sus porcentajes. En la Tabla 6.2, mostramos los porcentajes de la variación de la energía de E_2 . En la columna 3, se muestran los splittings para el caso extrínseco $3\beta/E_2^*$, que muestra valores menores que el caso combinado. En las columnas 4 y 5, se muestran los splittings relativos para el caso intrínseco, $2A/E_2^*$ y $2B/E_2^*$, que también muestran valores de energía menores que el combinado. En las columnas 6 y 7 $(\varepsilon_6 - \varepsilon_5)/E_2^*$ y $(\varepsilon_8 - \varepsilon_7)/E_2^*$ se muestran los splitting causados por la interacción espín-órbita combinada de la impureza hidrogenoide. Estos valores corresponden a la combinación de los dos tipos de acoplamiento, son porcentajes mayores que en el caso de los acoplamientos individuales. Además de observar que hay una mayor contribución a la energía del nivel E_2 , con los dos tipos de acoplamiento juntos, también hay un mayor rompimiento de la degeneración que en los casos individuales. Para concluir, mencionamos que el AlN presenta varias características que lo diferencian notablemente de los otros tres materiales considerados, debido a los peculiares parámetros de su estructura cristalina de base.

Appendix A

Desarrollo Perturbativo de H_{so}

Para el desarrollo perturbativo de H_{so} , es posible pasar de una representación de dos espinores $|\phi^L\phi^S\rangle$, a una representación de espín-órbita $|\phi\rangle$, por el método llamado “eliminación de la componente pequeña”, entre otros; i. e., vía transformación de *Foldy* y *Wouthuysen* [32].

En ésta representación, las correcciones relativistas quedan escritas como una “perturbación” agregada a la ecuación de Schrödinger, en el llamado Hamiltoniano de Beit-Pauli [32]. La ecuación de Dirac para un electrón en presencia del campo de los nucleos V , se escribe como [32]:

$$(c \hat{\boldsymbol{\alpha}} \cdot \mathbf{p} + \hat{\boldsymbol{\beta}} \cdot \mathbf{m} c^2 + V) |\phi\rangle = E |\phi\rangle, \quad (1.1)$$

donde $|\phi\rangle$, son las soluciones escritas en forma de dos espinores. Desarrollando la Ec. (1.1), en función de los dos espinores, la ecuación de autovalores queda escrita como el sistema acoplado de ecuaciones:

$$c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^L + (V - E + mc^2)\phi^S = 0, \quad (1.2)$$

$$c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^S + (V - E - mc^2)\phi^L = 0. \quad (1.3)$$

Para resolver este sistema de ecuaciones, se puede expresar a ϕ^S en función de ϕ^L , así:

$$\phi^S = -R(E)^{-1}c(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^L, \quad (1.4)$$

$$R(E) = [(V - E) - mc^2], \quad (1.5)$$

reemplazando la expresión para ϕ^S , en la Ec. (1.2), se obtiene una ecuación para ϕ^L :

$$c^2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})R(E)^{-1}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^L = (V - E + mc^2)\phi^L. \quad (1.6)$$

Usando la identidad de operadores $(A - B)^{-2} = -B^{-1} + B^{-1}A(A - B)^{-1}$, se puede escribir una expresión para $R(E)^{-1}$:

$$A = V - E + mc^2$$

$$B = 2mc^2$$

$$A - B = V - E - mc^2 = R$$

$$R(E)^{-1} = \frac{1}{2mc^2} [-1 + (V - E + mc^2)(V - E - mc^2)^{-1}] \quad (1.7)$$

reemplazando $R(E)^{-1}$ en la Ec. (1.6), queda:

$$(2m)^{-1}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \underbrace{[-1 + (V - E + mc^2)(V - E - mc^2)^{-1}]}_{R(E)^{-1}} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^L = (V - E + mc^2)\phi^L. \quad (1.8)$$

Se redefinen las escalas de energías, introduciendo un factor de fase en la función de onda. Sin perder generalidad, se hace el cambio de variables; redefiniendo E y volviendo a llamar sin primar a las variables en Ec. (1.8), así:

$$E = E - mc^2, \quad \psi = \psi \exp^{-imc^2/h}$$

$$\beta = \beta - 1_4$$

$$(V - E)\phi^L + (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\mathfrak{R}(E)(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\phi^L = 0$$

$$\mathfrak{R}(E) = \frac{1}{2m} [1 - (V - E)(V - E - 2mc^2)^{-1}], \quad (1.9)$$

Teniendo en cuenta que $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = \mathbf{p}^2$; se ve que $\mathfrak{R} \rightarrow 1/2m$ cuando $c \rightarrow \infty$; lo que reproduce en la Ec. (1.9) la ecuación de Schrödinger. Entonces la componente grande se reduce a la expresión no relativista de la función de onda expresada como espín-órbita, en este límite. También puede comprobarse fácilmente que $\phi^S \rightarrow 0$ si $c \rightarrow \infty$ en la Ec. (1.3).

Usando la identidad de las matrices de Pauli, $(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{u})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}) = \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{u} \times \mathbf{v})$, identificando a $\mathbf{u} = \mathbf{p}\mathfrak{R}$; y a $\mathbf{v} = \mathbf{p}$, se puede escribir la Ec. (1.9) como:

$$(V - E)\phi^L + \mathfrak{D}_1\phi^L = 0 \quad (1.10)$$

$$\mathfrak{D}_1 = \mathbf{p}\mathfrak{R}\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p}\mathfrak{R} \times \mathbf{p}), \quad (1.11)$$

La Ec. (1.10) en principio es exacta. Aproximaciones relativistas a orden $1/c$, a partir de la ecuación de Schrödinger, corresponden tomar desarrollos de \mathfrak{R} en potencias sucesivas de $(V - E)/2mc^2$. En este caso se puede aproximar desarrollando \mathfrak{R} en series de potencias, y obtenemos finalmente:

$$\mathfrak{R} \approx \frac{1}{2m} \left[1 + \frac{V - E}{2mc^2} + v^2 \left(\frac{V - E}{2mc^2} \right) \right] \quad (1.12)$$

Appendix B

Cálculo de elemento de matriz del acoplamiento espín-órbita intrínseco en zincblenda

Vamos a calcular un elemento de matriz del acoplamiento espín-órbita intrínseco para la wurtzita. Tomamos el elemento de matriz para los estados $|211 \uparrow\rangle$, $|21 - 1 \downarrow\rangle$, utilizando la Ec. (3.6), tenemos:

$$\begin{aligned} H_{211\uparrow,21-1\downarrow} &= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} \langle \psi_{211\uparrow} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x + p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y + p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{21-1\downarrow} \rangle, \\ &= \frac{\gamma_z}{\hbar^3} [\langle \psi_{211\uparrow} | p_x(p_y^2 - p_z^2)\sigma_x | \psi_{21-1\downarrow} \rangle + \langle \psi_{211\uparrow} | p_y(p_z^2 - p_x^2)\sigma_y | \psi_{21-1\downarrow} \rangle \\ &\quad + \langle \psi_{211\uparrow} | p_z(p_x^2 - p_y^2)\sigma_z | \psi_{21-1\downarrow} \rangle]. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Teniendo en cuenta las Ecs. (2.4), nuestro elemento de matriz se reduce a:

$$H_{211\uparrow,21-1\downarrow} = \frac{\gamma_z}{\hbar^3} [\langle \varphi_{211} | p_x(p_y^2 - p_z^2) | \varphi_{21-1} \rangle - i \langle \varphi_{211} | p_y(p_z^2 - p_x^2) | \varphi_{21-1} \rangle]. \quad (2.2)$$

Finalmente, con las Ecs. (3.4), (3.5), (3.11), el elemento de matriz queda:

$$H_{211\uparrow,21-1\downarrow} = -i\gamma_z C_{211} C_{21-1} \left[\int d\mathbf{r} (x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_x (\partial_y^2 - \partial_z^2) (x - iy) e^{-r/2a^*} \right. \\ \left. - i \int d\mathbf{r} (x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_y (\partial_z^2 - \partial_x^2) (x - iy) e^{-r/2a^*} \right]. \quad (2.3)$$

Ahora vamos a analizar un solo miembro de la integral, puesto que el otro es completamente análogo. En primer lugar calculamos las derivadas de $\partial_x \partial_z^2 (x - iy) e^{-r/2a^*}$, así:

$$\partial_z^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} = \frac{-(x - iy)}{2a^*} \left(\frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} - \frac{z^2}{2a^* r^2} \right) e^{-r/2a^*} \\ \partial_x \partial_z^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} = \frac{1}{2a^*} \left[\left(-\frac{1}{r} + \frac{z^2}{r^3} + \frac{z^2}{2a^* r^2} \right) + (iy - x) \left(-\frac{x}{r^3} \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{3xz^2}{r^5} + \frac{xz^2}{2a^* r^4} \right) - \frac{x(iy - x)}{2a^* r} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{z^2}{r^3} - \frac{z^2}{2a^* r^2} \right) \right] e^{-r/2a^*}. \quad (2.4)$$

Por otro lado tenemos $\partial_x \partial_y^2 (x - iy) e^{-r/2a^*}$, así:

$$\partial_y^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} = \frac{e^{-r/2a^*}}{2a^*} \left(\frac{2iy - x}{r} + \frac{xy^2 - iy^3}{r^3} \right) + \frac{y}{2a^* r} \left(i + \frac{xy^2}{r^3} - \frac{iy^3}{r^3} \right) e^{-r/2a^*} \\ = \frac{1}{2a^*} \left(\frac{3iy}{r} - \frac{x}{r} + \frac{xy^2}{r^3} - \frac{iy^3}{r^3} + \frac{xy^2}{2a^* r^2} - \frac{iy^3}{2a^* r^2} \right) e^{-r/2a^*} \\ \partial_x \partial_y^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} = \frac{1}{2a^*} \left(-\frac{3iyx}{r^3} - \frac{1}{r} + \frac{x^2}{r^3} + \frac{y^2}{r^3} - \frac{3y^2 x^2}{r^5} + \frac{3iy^3 x}{r^5} + \frac{y^2}{2a^* r^2} \right. \\ \left. - \frac{y^2 x^2}{a^* r^4} + \frac{iy^3 x}{a^* r^4} - \frac{3iyx}{2a^* r^2} + \frac{x^2}{2a^* r^2} - \frac{y^2 x^2}{2a^* r^4} + \frac{iy^3 x}{2a^* r^4} - \frac{y^2 x^2}{4a^{*2} r^3} + \frac{iy^3 x}{4a^{*2} r^3} \right) e^{-r/2a^*}. \quad (2.5)$$

Ahora hacemos $\partial_x \partial_y^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} - \partial_x \partial_z^2 (x - iy) e^{-r/2a^*}$, y obtenemos:

$$\begin{aligned}
 (\partial_x \partial_y^2 - \partial_x \partial_z^2)(x - iy) e^{-r/2a^*} &= \frac{1}{2a^*} \left(-\frac{3iyx}{r^3} - \frac{1}{r} + \frac{x^2}{r^3} + \frac{y^2}{r^3} - \frac{3y^2x^2}{r^5} + \frac{3iy^3x}{r^5} \right. \\
 &+ \frac{y^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^2}{a^*r^4} + \frac{iy^3x}{a^*r^4} - \frac{3iyx}{2a^*r^2} + \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^2}{2a^*r^4} + \frac{iy^3x}{2a^*r^4} - \frac{y^2x^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{iy^3x}{4a^{*2}r^3} \\
 &+ \frac{1}{r} - \frac{z^2}{r^3} - \frac{z^2}{2a^*r^2} + \frac{ixy}{r^3} - \frac{x^2}{r^3} - \frac{3ixyz^2}{r^5} + \frac{3x^2z^2}{r^5} - \frac{ixyz^2}{a^*r^4} + \frac{x^2z^2}{a^*r^4} \\
 &\left. + \frac{iyx}{2a^*r^2} - \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{iyxz^2}{2a^*r^4} + \frac{x^2z^2}{2a^*r^4} - \frac{iyxz^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{x^2z^2}{4a^{*2}r^3} \right) e^{-r/2a^*}. \quad (2.6)
 \end{aligned}$$

simplificando.

$$\begin{aligned}
 (\partial_x \partial_y^2 - \partial_x \partial_z^2)(x - iy) e^{-r/2a^*} &= \frac{1}{2a^*} \left(-\frac{3iyx}{r^3} + \frac{y^2}{r^3} - \frac{3y^2x^2}{r^5} + \frac{3iy^3x}{r^5} + \frac{y^2}{2a^*r^2} \right. \\
 &- \frac{y^2x^2}{a^*r^4} + \frac{iy^3x}{a^*r^4} - \frac{3iyx}{2a^*r^2} + \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^2}{2a^*r^4} + \frac{iy^3x}{2a^*r^4} - \frac{y^2x^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{iy^3x}{4a^{*2}r^3} - \frac{z^2}{r^3} \\
 &- \frac{z^2}{2a^*r^2} + \frac{ixy}{r^3} - \frac{3ixyz^2}{r^5} + \frac{3x^2z^2}{r^5} - \frac{ixyz^2}{a^*r^4} + \frac{x^2z^2}{a^*r^4} + \frac{iyx}{2a^*r^2} - \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{iyxz^2}{2a^*r^4} \\
 &\left. + \frac{x^2z^2}{2a^*r^4} - \frac{iyxz^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{x^2z^2}{4a^{*2}r^3} \right) e^{-r/2a^*}. \quad (2.7)
 \end{aligned}$$

Ahora hacemos $(x + iy) e^{-r/2a^*} \partial_x \partial_y^2 (x - iy) e^{-r/2a^*} - \partial_x \partial_z^2 (x - iy) e^{-r/2a^*}$, así:

$$\begin{aligned}
 (x + iy) e^{-r/2a^*} (\partial_x \partial_y^2 - \partial_x \partial_z^2)(x - iy) e^{-r/2a^*} &= \\
 \frac{(x + iy)}{2a^*} \left(-\frac{3iyx}{r^3} + \frac{y^2}{r^3} - \frac{3y^2x^2}{r^5} + \frac{3iy^3x}{r^5} + \frac{y^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^2}{a^*r^4} + \frac{iy^3x}{a^*r^4} - \frac{3iyx}{2a^*r^2} \right. \\
 &+ \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^2}{2a^*r^4} + \frac{iy^3x}{2a^*r^4} - \frac{y^2x^2}{4a^{*2}r^3} + \frac{iy^3x}{4a^{*2}r^3} - \frac{z^2}{r^3} - \frac{z^2}{2a^*r^2} + \frac{ixy}{r^3} - \frac{3ixyz^2}{r^5} \\
 &+ \frac{3x^2z^2}{r^5} - \frac{ixyz^2}{a^*r^4} + \frac{x^2z^2}{a^*r^4} + \frac{iyx}{2a^*r^2} - \frac{x^2}{2a^*r^2} - \frac{iyxz^2}{2a^*r^4} + \frac{x^2z^2}{2a^*r^4} - \frac{iyxz^2}{4a^{*2}r^3} + \\
 &\left. \frac{x^2z^2}{4a^{*2}r^3} \right) e^{-r/2a^*} e^{-r/2a^*}. \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

Simplificando los terminos tenemos:

$$\begin{aligned}
&= \frac{e^{-r/a^*}}{2a^*} \left(-\frac{2iyx^2}{r^3} - \frac{3y^2x^3}{r^5} + \frac{xy^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^3}{a^*r^4} + \frac{iy^3x^2}{a^*r^4} - \frac{3iyx^2}{2a^*r^2} - \frac{y^2x^3}{2a^*r^4} + \right. \\
&\frac{iy^3x^2}{2a^*r^4} - \frac{y^2x^3}{4a^*r^3} + \frac{iy^3x^2}{4a^*r^3} - \frac{xz^2}{r^3} - \frac{xz^2}{2a^*r^2} + \frac{3x^3z^2}{r^5} - \frac{ix^2yz^2}{a^*r^4} + \frac{x^3z^2}{a^*r^4} + \frac{iyx^2}{2a^*r^2} \\
&- \frac{iyx^2z^2}{2a^*r^4} + \frac{x^3z^2}{2a^*r^4} - \frac{iyx^2z^2}{4a^*r^3} + \frac{x^3z^2}{4a^*r^3} + \frac{3y^2x}{r^3} + \frac{iy^3}{r^3} - \frac{3y^4x}{r^5} + \frac{iy^3}{2a^*r^2} - \frac{iy^3x^2}{a^*r^4} \\
&- \frac{y^4x}{a^*r^4} + \frac{3y^2x}{2a^*r^2} + \frac{ix^2y}{2a^*r^2} - \frac{iy^3x^2}{2a^*r^4} - \frac{y^4x}{2a^*r^4} - \frac{iy^3x^2}{4a^*r^3} - \frac{y^4x}{4a^*r^3} - \frac{iyz^2}{r^3} - \frac{iyz^2}{2a^*r^2} \\
&+ \frac{3xy^2z^2}{r^5} + \frac{xy^2z^2}{a^*r^4} + \frac{ix^2yz^2}{a^*r^4} - \frac{y^2x}{2a^*r^2} - \frac{ix^2y}{2a^*r^2} + \frac{y^2xz^2}{2a^*r^4} + \frac{ix^2yz^2}{2a^*r^4} + \frac{y^2xz^2}{4a^*r^3} \\
&\left. + \frac{ix^2yz^2}{4a^*r^3} \right). \tag{2.9}
\end{aligned}$$

En cada uno de los términos hay una combinación de las tres componentes espaciales, y siempre hay una de ellas elevada a una potencia impar. Como la integral se hace sobre todo el espacio, el resultado es nulo, por lo que cada uno de los términos se hacen cero.

Bibliografía

- [1] D. Awschalon, D. Loss, and N. Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Springer, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2002).
- [2] S. Bandyopadhyay and M. Cahay, *Introduction to Spintronics* (SRC Press, Taylor and Francis Group, Broken Sound Parkway, NW, 2008).
- [3] I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Spintronics: Fundamentals and Applications*, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).
- [4] V. K. Joshi, *Spintronics: A Contemporary Review of Emerging Electronics Devices*, Eng. Sc and Tech, an International J. **19**, 1503 (2016).
- [5] S. Datta and B. Das, *Electronic Analog of the Electro-Optic Modulator*, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
- [6] A. De and C. E. Pryor, *Predicted Band Structures of III-V Semiconductors in the Wurtzite phase*, Phys. Rev. B **81**, 155210 (2010).
- [7] A. S. Martins, T. B. Boykin, G. Klimeck, and B. Koiller, *Conduction-Band Tight-Binding Description for Si Applied to P Donors*, Phys. Rev. B **72**, 193204 (2005).
- [8] B. Koiller, H. Xuedong, and S. Das Sarma, *Electric-Field Driven Donor-Based Charge Qubits in Semiconductors*, Phys. Rev. B. **73**, 323 (2006).

-
- [9] D. Awschalom, R. Epstein, and R. Hanson, *The Diamond Age of Spintronics*, Scientific American **297**, 84 (2007).
- [10] N. Ashcroft and N. Mermin, *Solid State Physics* (Saunders College, Philadelphia, 1976).
- [11] L. Dong and G. P. Xuan, *Strong Tuning of Rashba Spin-Orbit Interaction in Single InAs Nanowires*, Nano Letters **12**, 3263 (2012).
- [12] M. P. Marder, *Condensed Matter Physics* (Wiley Online Library, New Jersey, 2010).
- [13] P. Yu and M. Cardona, *Fundamentals of Semiconductors* (Springer, Berlin Heidelberg New York, 2010).
- [14] M. Wu, J. Jiang, and M. Weng, *Spin Dynamics in Semiconductors*, Physics Reports **493**, 61 (2010).
- [15] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, 2 ed. (Addison-Wesley Company, Inc., Massachusetts, 1994).
- [16] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics* (Wiley-Interscience. John Wiley and s. New York. London. Sydney Toronto, Nueva Jersey, 1977), Vol. 2.
- [17] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures*, 1 ed. (Wiley-Interscience, Hoboken, New Jersey, 1990).
- [18] H.-A. Engel, E. I. Rashba, and I. B. Halperin, in *Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials* (John Wiley and Sons, Ltd, Nueva Jersey, 2007).
- [19] G. Dresselhaus, *Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures*, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).

-
- [20] E. I. Rashba, *Theory of Recombination Radiation in 2D System*, Sov. Phys. Solid. State **2**, 1109 (1960).
- [21] Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *Properties of a 2D Electron Gas with Lifted Spectral Degeneracy*, JETP Lett. **39**, 78 (1984).
- [22] J. Y. Fu and M. W. Wu, *Spin-Orbit Coupling in Bulk ZnO and GaN*, J. Appl. Phys. **104**, 093712 (2008).
- [23] P. O. Löwdin, *A Note on the Quantum-Mechanical Perturbation Theory*, The Journal of Chemical Physics **19**, 1396 (1951).
- [24] L. Y. Voon, L. C., Willatzen, M., M. Cardona, and N. E. Christensen, *Terms Linear in k in the Band Structure of Wurtzite-Type Semiconductors*, Phys. Rev. B **53**, 10703 (1996).
- [25] P. Nozières and C. Lewiner, *A simple theory of the anomalous Hall effect in semiconductors*, J. Phys. (Paris) **34**, 901 (1973).
- [26] R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling in Two-Dimensional Electron and Hole System* (Springer Verlag, Berlin Heidelberg, 2003), Vol. 191.
- [27] E. Kane, *Band Structure of Indium Antimonide*, J. Phys. Chem. Solids **1**, 249 (1957).
- [28] R. Shankar, *Principles of Quantum Mechanics* (Springer Verlag, New Haven, Connecticut, 1980).
- [29] T. Hanada, in *Oxide and Nitride Semiconductors: Processing, Properties, and Applications*, edited by T. Yao and S.-K. Hong (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2009), pp. 1–19.
- [30] A. V. Rodina, M. Dietrich, A. Göldner, L. Eckey, A. Hoffmann, A. L. Efros, M. Rosen, and B. K. Meyer, *Free Excitons in Wurtzite GaN*, Phys. Rev. B **64**, 115204 (2001).

-
- [31] W.-T. Wang *et al.*, *Dresselhaus Effect in Bulk Wurtzite Materials*, Appl. Phys. Lett. **91**, 082110 (2007).
- [32] K. G. Dyall and K. Faegri, *Introduction to Relativistic Quantum Chemistry*, 2 ed. (Oxford University Press, Oxford, England, 1995).

