

Propiedades espectrales y transporte cuántico de portadores de carga y espín en nanoestructuras semiconductoras

Autoría principal

Leo Diago Cisneros¹.

Otros autores

Francisco Mireles Higuera², Susana Arias Laso³, Raúl Cuan Martínez, Juan José González Armesto¹.

Colaboradores

Huberto Rodríguez-Coppola¹, R. Pérez-Álvarez⁴, Pedro Pereyra Padilla⁵.

Entidad ejecutora principal

¹Facultad de Física, Universidad de La Habana.

Entidades participantes

² Departamento de Física Teórica, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Baja California, México.

³Faculty of Graduate Studies: PhD in Physics and Astronomy, York University, Canada.

⁴Facultad de Ciencias, Universidad del Estado de Morelos, México.

⁵Física Teórica, Universidad Autónoma Metropolitana, México.

Autor para correspondencia

Profesor Titular, Dr.C. Leo Diago Cisneros

Facultad de Física (2do piso Biblioteca Central), Universidad de La Habana

San Lázaro y L, Vedado 10 400

ldiago@fisica.uh.cu

Resumen

Antecedentes: La ausencia de sincronismo y simultaneidad en el tratamiento del tunelamiento cuántico de flujos de huecos incidentes, provocaba la pérdida recurrente de unitariedad en los flujos emergentes y la no detección de fenomenología relevante. Por otro lado el modelamiento teórico precedente del acoplamiento espín-órbita tipo Rashba para huecos –casos normal y anómalo-, en hilos cuánticos, asimismo como el transporte e interferencia de espines electrónicos en nano-anillos cuánticos, mostraba desajustes notables con el experimento y resultados numéricos contra-intuitivos.

Problema resuelto: La relevancia de las contribuciones del presente estudio, la consideramos sustentada en la investigación sistemática de propiedades electrónicas y de transporte cuántico de electrones y huecos en presencia del espín y de interacción espín órbita, para sistemas físicos de dimensionalidad reducida, en el marco de modelos teóricos originales.

Resultados: Los resultados los consideramos respaldados por 8 artículos científicos publicados en revistas nacionales e internacionales indexadas, 9 trabajos presentados en eventos nacionales e internacionales, 1 tesis de maestría defendida y 3 trabajos de diploma defendidos. Como complemento, cabe señalarse: 1 artículos en arbitraje, y una tesis de maestría para ser defendida próximamente.

Conclusiones: En nuestras investigaciones, encontramos una vía eficaz para abordar los tópicos planteados arriba. Fueron resueltas varias problemáticas esenciales, de los modelos teóricos previos. A partir de las hipótesis iniciales, logramos desarrollar un estudio amplio y sistemático, que alcanzó una comprensión más exhaustiva sobre los formalismos matriciales, los formalismos no-lineales y la aplicación de estos al estudio del transporte cuántico y las excitaciones elementales de electrones y huecos en nanoestructuras semiconductoras a capas. Finalmente, en nuestras pesquisas encontramos soluciones teóricas, que superan las desventajas de aproximaciones precedentes que involucran procesos de transporte de portadores de carga eléctrica y espín en anillos, hilos y heteroestructuras.

Comunicación corta

La manipulación de electrones en semiconductores por medio de campos eléctricos ha sido el principio fundamental detrás de la revolución en la industria electrónica moderna de las últimas décadas. El reciente interés en el espín del electrón y su manipulación ha abierto un nuevo campo de frontera en las Nanociencias denominado Magneto-electrónica y más tarde Espintrónica -una nueva electrónica que además de la carga, involucra el espín de los portadores-. Incorporar el grado de libertad del espín en la microelectrónica y optoelectrónica daría lugar a toda una nueva generación de dispositivos. Dado que las operaciones de cambio de espín consumen poca energía, se presume que estos dispositivos requerirán baterías muy livianas. Además, los chips espintrónicos podrían permanecer desconectados entre una y otra operación. Al cambiar el espín, la energía cinética de los portadores aumenta muy poco, por lo que los circuitos generan mínimo calor. Por si fuera poco, aumentaría la capacidad de miniaturización y velocidad de procesamiento. Estas son solo algunas de las ventajas

que el desarrollo de la Espintrónica generaría. Uno de los mecanismos físicos que han sido propuestos para lograr una eficiente manipulación del espín de los electrones es el acoplamiento espín-órbita tipo Rashba (SOI-R). El acoplamiento Rashba para el caso de electrones ha sido ampliamente estudiado tanto teórica como experimentalmente en los últimos años. Por otro lado, el caso de los huecos ha sido menos abordado. Las características espectrales y la conducción cuántica bajo SOI-R para el caso de los huecos pesados, son muy distintas respecto al caso electrónico [1]. En sistemas confinados como las heteroestructuras (sistemas cuasi-bidimensionales, Q2D), se ha reportado a partir de argumentos basados en la Teoría de Grupos, que el hamiltoniano correspondiente contiene términos cúbicos en el cuasimomentum. Esto último también se ha mostrado experimentalmente. Esta dependencia cúbica resulta conflictiva a la hora de interpretar físicamente las soluciones matemáticas. Para enfrentar estas particularidades, algunos autores han considerado el término de acoplamiento Rashba como una perturbación lineal. Lo anterior, si bien simplifica el análisis, implica pérdida de física relevante. Otro punto débil de esta aproximación es la elección arbitraria del parámetro de acoplamiento de la SOI-R. Asimismo, se ha reportado un comportamiento anómalo del parámetro que controla la fortaleza del acoplamiento Rashba, esto es, una dependencia inversa del gradiente de potencial, contrario a lo que ocurre con el acoplamiento espín-órbita de Pauli. Tal comportamiento, conocido como acoplamiento Rashba anómalo o efecto Rashba con diferencial negativo, también ha sido soportado por cálculos numéricos y mediciones experimentales. Sin embargo, las expresiones analíticas reportadas hasta el momento, si bien esclarecen la esencia física del comportamiento anómalo, no son suficientemente buenas para ajustar el comportamiento experimental o numérico. Por otro lado, gran atención se la ha prestado al efecto Rashba en hilos cuánticos (sistemas cuasi-unidimensional, Q1D) debido a la abundancia de fenómenos físicos y aplicaciones. Lo anterior, apoyado en el hecho de que restringir la distribución angular de los portadores a un conducto, conlleva a mejores resultados en la modulación y coherencia de las corrientes de electrones con espín polarizado. En 1999 Moroz y Barnes realizaron un estudio teórico sobre el efecto del acoplamiento Rashba en la conductancia balística y la estructura de bandas en sistemas Q1D. Los autores mostraron que un cambio drástico en la dependencia en cuasimomentum del espectro, con respecto a los sistemas Q2D, ocurre cuando se considera un acoplamiento relativamente grande, dando lugar a picos anómalos en la conductancia.

Sirviendo todo lo antes mencionado como motivación, nos propusimos como objetivos construir un modelo que describa apropiadamente -tenga la forma predicha por la Teoría de Grupos, reproduzca la fenomenología anómala, y ajuste razonablemente bien las mediciones experimentales-, el acoplamiento Rashba en el caso de huecos pesados confinados en la interfaz de una heteroestructura. Asimismo, utilizar tal modelo en el estudio de las propiedades de transporte de huecos pesados bajo acoplamiento Rashba en sistemas Q2D de interés particular en la Espintrónica, e.g. conmutadores de espín o transistores de efecto campo de espín. Finalmente, estudiar las propiedades espectrales y de transporte de huecos bajo efecto Rashba en sistemas semiconductores cuasi-unidimensionales. El modelo de Rashba que obtuvimos [2], se extrajo de un hamiltoniano efectivo para huecos pesados, obtenido a partir del modelo

de k-p de Pidgeon-Brown (8x8) a cuatro bandas (la banda de conducción y las tres bandas de valencia), utilizando el esquema de particionamiento de Löwdin hasta el segundo orden de perturbaciones. Este resultó ser de la forma predicha en la literatura especializada, a partir de consideraciones de simetría. Nuestra contribución fundamental, por su parte, es la forma del parámetro que caracteriza la fortaleza del acoplamiento SOI-R: (i) La expresión analítica obtenida [2],

$$\beta_n = \frac{-3i\hbar^4\gamma_s^2}{m_0^2} \left(\frac{I_n^{hl} Z_n^{hl}}{E_n^{hh} - E_n^{lh}} - \frac{I_n^{hs} Z_n^{hs}}{E_n^{hh} - E_n^{so}} \right)$$

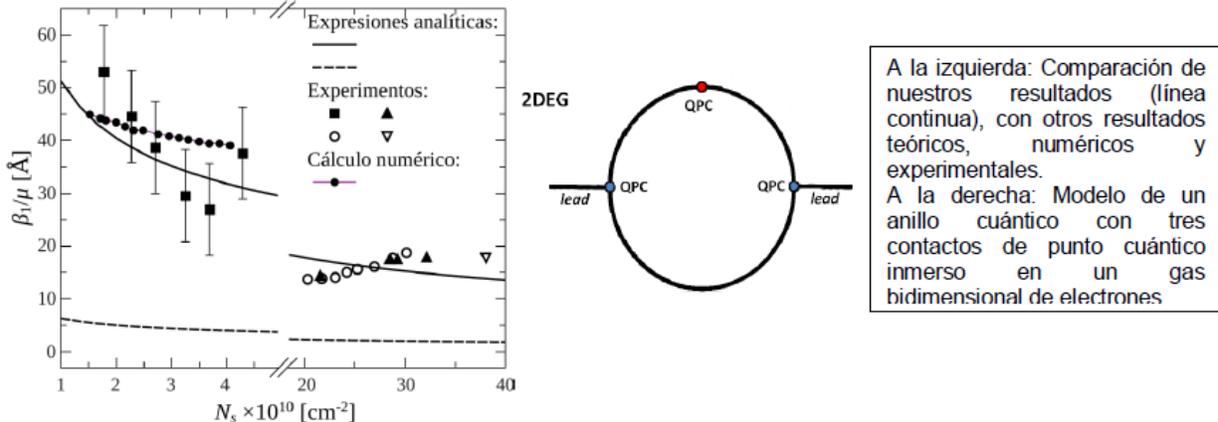
donde, I_n , Z_n representan integrales de Airy y $E_n^{hh}, E_n^{lh}, E_n^{hs}, E_n^{so}$ las energías de las subbandas de huecos pesados y ligeros, respectivamente, esclarece la física detrás de la dependencia anómala del parámetro de acoplamiento con la densidad superficial de huecos observada en mediciones experimentales en $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. (ii) Los cálculos del parámetro de acoplamiento para otros de los semiconductores más estudiados, a saber, InSb , InAs , GaSb , InP , también exhibieron tal anomalía. (iii) Los cálculos para el GaAs ajustan muy bien los valores experimentales y cálculos numéricos auto-consistentes detectados en la literatura especializada en un amplio rango de densidades, respecto a modelos teóricos previos (ver figura, panel izquierdo). (iv) El InSb exhibió valores del parámetro de acoplamiento marcadamente mayores respecto al resto de los materiales considerados, lo que lo hace sin dudas uno de los mejores candidatos para las aplicaciones espintrónicas. Por otro lado, el desarrollo que condujo al presente modelo de Rashba también permitió estudiar las implicaciones de la asimetría del potencial de confinamiento de la heteroestructura sobre la masa efectiva transversal de los huecos pesados. Los valores obtenidos para varios semiconductores mostraron que disminuía cerca de un 50% respecto a la aproximación típicamente utilizada.

Para el estudio de las propiedades de transporte, utilizando el modelo obtenido, se escogieron dos sistemas físicos configurados de manera diferente. Ambos casos se caracterizaron por regiones de parámetros constantes, por lo que fue posible calcular la conductancia resuelta por el espín extendiendo el formalismo de la aproximación dispersiva multicomponente, que ha sido exitosamente empleado en el estudio del transporte de huecos a través de heteroestructuras semiconductoras, sin acoplamiento espín-órbita. Los cálculos de conductancia espín dependiente para la configuración fuente/canal -que modela un conmutador de espín- mostraron que: (i) La dependencia con la energía de Fermi exhibe un comportamiento oscilatorio -sin precedentes en la literatura especializada consultada-, modulado por los mecanismos dispersivos que ocurren en la región donde se encuentra la fuente. (ii) La dependencia con las dimensiones del canal de transporte preserva las propiedades periódicas esperadas -asociadas al fenómeno de precesión del espín-, igualmente moduladas por los mecanismos dispersivos. (iii) Se demostró la eficiencia de los semiconductores magnéticos diluidos, reflejada en la atenuación perfecta de la conductancia para los huecos con espín orientado en dirección contraria a su dirección de magnetización. (iv) La dependencia con el parámetro de acoplamiento caracteriza el comportamiento tipo conmutador de espín. Esto es, dada una corriente espín polarizada, es posible obtener

una u otra polarización de espín a la salida del dispositivo modificando el acoplamiento Rashba. No obstante, los cambios esperados son bastante susceptibles a los cambios en la energía de Fermi. Asimismo, los cálculos de la conductancia espín dependiente para la configuración fuente/canal/colector -que modela un transistor de efecto campo de espín- mostraron que: (i) La dependencia con la energía de Fermi exhibió oscilaciones más complicadas -sin periodicidad evidente- en tanto los fenómenos dispersivos son más significativos. (ii) Las oscilaciones que exhibe la dependencia con las dimensiones del canal de transporte también se modificaron drásticamente respecto a la configuración fuente/canal. No obstante, la periodicidad de las mismas es un poco más clara. (iii) La selección de semiconductores magnéticos diluidos como fuente y colector garantizó que el sistema sólo fuera atravesado por huecos espín-polarizados en la dirección de magnetización de estos. (iv) La dependencia con el parámetro de acoplamiento mostró la viabilidad de los transistores de efecto campo de espín como dispositivos lógicos. Para el estudio de la influencia del SOI-R en las propiedades espectrales y la conductancia a temperatura cero de huecos en sistemas cuasi-unidimensionales, partimos de un hamiltoniano que incorpora los efectos de la mezcla de bandas. Se mostró la existencia de extremos adicionales en las sub-bandas de huecos pesados, que dan lugar a la existencia de picos anómalos en la conductancia de Landauer en régimen balístico. Se mostró que la robustez de tales picos puede modularse cambiando fortaleza del acoplamiento o la geometría del sistema [1]. Los efectos de interferencia cuánticos constituyen una de las formas de controlar el transporte de portadores de carga en sistemas en la micro/nano-escala. En los últimos años ha sido de especial interés el estudio de sistemas formados por anillos cuánticos o combinaciones de estos con otras estructuras nanométricas. En estas estructuras microscópicas convergen fenómenos que no pueden ser vistos en otras topologías, a ninguna escala. Esta amplia fenomenología ha conllevado a que se estudien los anillos cuánticos como base con vista al desarrollo de dispositivos que permitan controlar el transporte de carga y de espines. Por el año 1959 se descubre el efecto Aharonov-Bohm (AB): un haz de electrones es capaz de interferir consigo mismo al recorrer un circuito cerrado cuando este circuito es atravesado por un campo magnético. La interferencia depende de la relación del flujo magnético de dicho campo al cuanto de flujo magnético. Posteriormente, en 1986, se halló un análogo a este efecto en partículas sin carga (originalmente neutrones), el efecto Aharonov-Casher (AC), causado por el acoplamiento del grado de libertad orbital de las partículas con el de espín, a través de la interacción espín-órbita, en partículas que describen circuitos cerrados. Con el descubrimiento del efecto Rashba, se logra controlar la interferencia Aharonov-Casher a través de un voltaje externo que condiciona la fortaleza del acoplamiento espín-órbita. La conjunción de estos dos efectos abrió las posibilidades de manipular haces de electrones con solo modificar parámetros controlables a nivel de laboratorio en estructuras micro/nano-métricas, en este caso mediante un campo magnético y una diferencia de potencial. Consecuentemente, los dispositivos donde aparecían dichos fenómenos se situaron en una posición privilegiada con vista a desarrollar dispositivos tecnológicos que los tengan como base.

Las oscilaciones de la conductancia debidas a los efectos Aharonov-Bohm y Aharonov-Casher en anillos cuánticos, han sido estudiadas ampliamente con diversos fines y

desde diversos enfoques. Uno ampliamente aceptado a partir de la forma en que ataca el problema del transporte de cargas y espines en el anillo, fue desarrollado por Buttiker en 1984 y ha sido empleado en numerosos trabajos hasta la fecha. Siguiendo dicho enfoque se logra concentrar toda la física del problema en forma de matrices de dispersión y transferencia que engloban toda la fenomenología del anillo cuántico (QR). Trabajos pioneros en este tema fueron desarrollados por el grupo de Nitta en Japón, y más recientemente por Frustaglia, Shelykh y Vasilopoulos en Europa.



Lo más novedoso de nuestro modelo [3], radica en cómo se modelan las juntas entre el anillo cuántico y la fuente de portadores de carga. En trabajos anteriores ello se hacía siguiendo mecanismos semi-clásicos de reflexión/transmisión, para simular el desempate energético entre el anillo cuántico y las guías que conducen los portadores hacia su seno. De esa forma se podían estudiar en general los fenómenos, pero conducía a incongruencias insalvables debidas a la formulación. Para ello propusimos simular el mencionado desempate mediante constricciones en forma de contactos de punto cuántico tanto a la entrada como a la salida del QR –esto es, en las juntas y no dentro del QR-, en una formulación puramente cuántica. Los contactos de punto cuántico presentan un potencial bidimensional (tipo silla de montar), que además de resolver las incompatibilidades mencionadas aportan nuevos grados de libertad con vista a la manipulación del espín. Adicionalmente colocamos un contacto de punto cuántico adicional en el brazo superior del QR en una posición simétrica, para analizar su influencia en los fenómenos de transporte (ver figura, panel derecho). Abordamos el problema del transporte electrónico en varios pasos: i) buscar los coeficientes de transmisión en los potenciales de los contactos de punto cuántico, ii) resolver los niveles energéticos de los electrones que recorren el QR, iii) hallar las amplitudes de las ondas viajeras salientes usando los formalismos de la matriz de transferencia y dispersión. Estas tareas habían sido abordadas en otros trabajos pero con algunas modificaciones. Llevarlas a cabo resultó en una generalización de muchos tratamientos anteriores para sistemas similares. En particular, en el tratamiento de las fases que adquieren los electrones en su recorrido por el anillo. Una vez resueltos dichos problemas se puede construir una expresión analítica compacta y resuelta en el espín

$$G(\varepsilon) = \sum_{\sigma} G_{\sigma}(\varepsilon) = \frac{e^2}{h} \sum_{\sigma} |\alpha'_{2\sigma}(\varepsilon)|^2,$$

para la conductancia de doble-conductancia de Landauer en este sistema. Esta expresión depende de la amplitud de la onda viajera emergente del QR, que contiene en sí toda la información relevante del transporte de los electrones en el QR y difiere notablemente según la polarización de los espines. A partir de este punto, nos enfocamos en un análisis de los resultados, contemplando en detalle las dependencias de la conductancia con los múltiples parámetros manipulables del sistema. El objetivo: que el trabajo constituya una suerte de manual de operaciones, si desea “sintonizar” una de las fenomenologías asequibles del sistema. Entre los resultados fundamentales de este trabajo se encuentran: i) La unificación en el enfoque para abordar el transporte de electrones en el anillo cuántico AB-AC, bajo SOI-R, con un formalismo general, flexible a otros efectos y fácilmente reproducible. ii) Se reproducen los comportamientos de oscilación en la conductancia del sistema esperado, pudiendo reproducir casos particular reportados en la literatura. iii) Encontramos una fuerte dependencia en el acoplamiento entre las guías de electrones y el anillo que provoca patrones armónicos adicionales en las oscilaciones de la conductancia. Los períodos de estos armónicos difieren de los reportados, conforme varía la fortaleza de los confinamientos en los contactos de punto cuántico. Este es uno de los resultados notables del modelo en cuestión. iv) Se analizan las influencias de utilizar confinamientos asimétricos en los contactos de punto cuántico, dando lugar a comportamientos anómalos en la conductancia. En general, hemos perfeccionado modelos existentes y hemos conseguido describir con bastante profundidad la física presente detrás del dispositivo teórico en cuestión. Esto permitiría extender los trabajos para formas cadenas y redes de anillos con las características descritas. Estos sistemas presumimos exhibirían comportamientos que se pudieran explotar con fines tecnológicos, por cuanto la estructura básica que nosotros analizamos pudiera actuar como filtro o válvula para los electrones según su polarización del espín.

Referencias Bibliográficas

- [1] R. Cuan and L. Diago-Cisneros, *Journal of Applied Physics* 110, 113705 (2011).
- [2] R. Cuan, and L. Diago-Cisneros, *Europhysics Letter* 110, 67001 (2015).
- [3] L. Diago-Cisneros and F. Mireles, *Journal of Applied Physics* 114, 193706 (2013).
- [4] JJ. González Armesto, and L. Diago-Cisneros, *Physica E*, en arbitraje (2015).