



**Universitat de les
Illes Balears**

Facultat de Ciències

Memòria del Treball de Fi de Grau

Adiabaticitat en models de canals acoblats d'espí no colineal

Margalida Jaume Pujol

Grau de Física

Any acadèmic 2016-17

DNI de l'alumne: 41540324R

Treball tutelat per Llorenç Serra Crespi
Departament de Física

S'autoritza la Universitat a incloure aquest treball en el Repositori Institucional per a la seva consulta en accés obert i difusió en línia, amb finalitats exclusivament acadèmiques i d'investigació	Autor		Tutor	
	Sí	No	Sí	No
	x		x	

Paraules clau del treball:

Cables quàntics no colineals, adiabaticitat, fase de Berry, interacció de Rashba.

Resum

En aquest treball s'ha estudiat el formalisme dels cables quàntics, centrant-nos en els d'espí no colineal. Les variacions dels angles estudiades han estat la que segueix una funció tipus Fermi i la que segueix una simetria helicoidal. Concretament hem estudiat els efectes de la adiabaticitat, les fases dinàmiques i de Berry, i l'efecte d'interaccions espí-òrbita tipus Rashba en la transmissió i reflexió d'electrons.

Resumen

En este trabajo se ha estudiado el formalismo de los cables cuánticos, centrándonos en los de espín no colineal. Las variaciones de los ángulos estudiadas han sido la que sigue una función tipo Fermi y la que sigue una simetría helicoidal. Concretamente hemos estudiado los efectos de la adiabaticidad, las fases dinámicas y de Berry, y el efecto de interacciones espín-órbita tipo Rashba en la transmisión y reflexión de electrones.

Abstract

In this paper we have studied the formalism of quantum wires, focusing on non-collinear spin ones. We have studied angle variations with positions given by Fermi functions and following a helicoidal symmetry. Specifically we have studied the effects of adiabaticity, dynamic and Berry phases, and the effect of Rashba spin-orbit interactions on transmission and reflection of electrons.

Índex

1	Introducció	5
2	Model de canals acoblats	7
3	Model de canals acoblats amb textura d'espí	9
3.1	El formalisme no colineal	9
3.2	Variació de l'eix de quantització	11
3.3	Potencial dispersor	11
4	Efectes i Resultats	14
4.1	Adiabaticitat i fases dinàmiques	14
4.2	Fase de Berry	17
4.3	Interacció de Rashba	19
5	Conclusions	24

Capítol 1

Introducció

Una de les principals branques de la mecànica quàntica és el camp de la nanotecnologia i el transport quàntic, és a dir, l'estudi que gira al voltant del control dels fenòmens i materials a escales de longitud per sota de 100 nanòmetres. En les darreres dècades, aquest àmbit interdisciplinari s'ha anat desenvolupant i ha permès aplicacions innovadores a l'electrònica, la computació, la biologia i la química, com per exemple, el primer ordinador el processador del qual està fabricat amb nanotubs de carboni [6], o nanotransportadors de fàrmacs a zones específiques del cos, que poden ser útils en el tractament del càncer o altres malalties. Però la finalitat última de la nanotecnologia és la de controlar i manipular àtoms i molècules individuals amb la intenció de crear materials de principi a fi, és a dir, poder dissenyar-los amb propietats específiques per a la tasca a la qual estan destinats i obtenir així un alt rendiment. Si s'aconsegueixen aquests avenços, en els propers anys podríem estar parlant d'una nova revolució industrial.

La investigació científica de sistemes electrònics es va limitar durant un llarg període de temps a àtoms o partícules aïllades d'origen natural, metalls o semiconductors, cristalls o feixos de radiació beta. La majoria d'aquests sistemes són de tres dimensions, mentre que una reducció efectiva de la geometria a dues o menys dimensions, per exemple una forta localització espacial en un pla, línia, o punt (és a dir, el confinament en almenys una direcció d'un electró) passa només en el cas dels àtoms i els electrons localitzats en les impureses dels cristalls.

El començament de la dècada de 1970 va marcar la nova era de la investigació sobre estructures limitades de dues dimensions, els anomenats pous quàntics, una de les primeres nanoestructures. Aquestes constitueixen un pont entre les molècules i els materials de major escala. La dimensió reduïda d'aquests sistemes i la puresa dels materials que els formen són els aspectes que els defineixen, i indispensablement s'han de tenir en compte per a la descripció completa de les seves propietats. Les nanoestructures són sistemes que funcionen molt bé com a model per investigar efectes quàntics del transport d'electrons sotmesos a camps externs. Els resultats que s'obtenen, s'utilitzen per caracteritzar la dinàmica electrònica, estudiar les interaccions en estructures de dimensió reduïda i comprendre millor els efectes quàntics i les seves possibles aplicacions pràctiques. En concret, un pou quàntic és una capa molt prima de semiconductor, intercalada entre dues capes d'un altre semiconductor que té una banda de conducció d'energia superior. La diferència

entre les energies de les bandes de conducció dels dos materials confina els electrons en la capa prima, bidimensional, i les excitacions en la direcció perpendicular són fortament quantitzades.

A principis de la dècada de 1980, el ràpid progrés de la tecnologia, especialment la precisió de les tècniques litogràfiques, van fer possible confinar els electrons en una estructura quasi unidimensional, l'anomenat cable quàntic. Els cables es produeixen, en forma de línies en miniatura, gravades en una mostra que conté un pou quàntic.

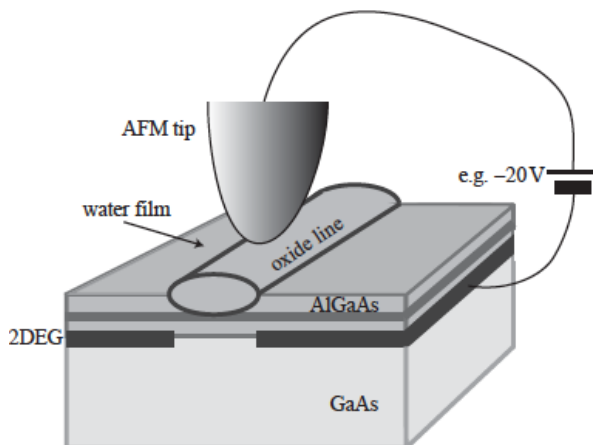


Figura 1.1: Ordenant adequadament les línies d'òxid sobre la superfície es poden fabricar molts tipus de nanoestructures. Entre elles els cables quàntics.[2]

El nostre cas d'estudi són precisament aquests cables quàntics, anomenats estructures o sistemes de baixa dimensió, quasi unidimensionals, ja que es confina a les partícules a propagar-se en una direcció determinada, perquè en totes les direccions menys una existeix un potencial confinant. És a dir, són guies d'ona electròniques en les que les direccions transversals a la propagació estan quantitzades a les energies característiques del potencial en aquesta direcció. El resultat de restringir les dimensions del sòlid és un canvi dramàtic en les propietats elèctriques, magnètiques, òptiques i mecàniques corresponents al canvi en la densitat d'estats que condueix a manifestacions a gran escala com l'increment de la resistivitat elèctrica, o les propietats òptiques.

La investigació en aquest treball tracta un model de canals acoblats, els canals són cables quàntics per on es produeix el transport d'electrons i l'acoblament entre canals el causa un potencial dispersor amb confinament parabòlic de tipus oscil·lador harmònic, primer amb espí constant i després amb variació respecte de la posició de l'espí. El que fa aquest potencial és unir les respectives equacions de la funció d'ona de cada canal.

A continuació mitjançant simulacions informàtiques obtindrem els coeficients de transmissió i reflexió de diferents potencials dispersors, el primer produeix una variació de la direcció de l'espí caracteritzada per una funció tipus Fermi i el segon es basa en la simetria helicoidal. Sempre centrant-nos en estudiar els efectes de la adiabaticitat, fases dinàmiques i de Berry i la interacció espí-òrbita de tipus Rashba.

Capítol 2

Model de canals acoblats

Consideram un canal de propagació amb confinament parabòlic tipus oscil·lador harmònic que a la zona central té un potencial dispersor $V(x, y; \eta, \eta')$. Aquest potencial és local en posicions $\vec{r} \equiv (x, y)$ però pot acoblar les diferents components d'espí $\eta, \eta' = \uparrow, \downarrow$. L'Hamiltonià s'escriu

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 + V(x, y; \eta \eta'). \quad (2.1)$$

Podem separar $H = H_0 + V$ i reescriure l'equació de Schrödinger $H\Psi = E\Psi$ en la forma

$$(H_0 - E)\Psi = -V\Psi. \quad (2.2)$$

El nostre model de canals assumeix que la funció d'ona general es pot desenvolupar en la forma

$$\Psi(x, y, \eta) = \sum_{ns} \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta), \quad (2.3)$$

on $\phi_n(y)$ i $\chi_s(\eta)$ són funcions conegudes (entrades del model) que representen els diferents canals amb $n = 1, 2, \dots$ i $s = \pm$. Les *amplades* de l'estat Ψ en cadascun dels canals venen donades per les funcions $\Psi_{ns}(x)$. Aquestes amplades són les incògnites que volem determinar i obeeiran unes equacions diferencials característiques dels models de canals acoblats.

Prenguem les funcions $\phi_n(y)$ de l'oscil·lador harmònic en 1 dimensió,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) \phi_n(y) = \epsilon_n \phi_n(y). \quad (2.4)$$

Per tant l'Eq. (2.2) dona

$$\sum_{ns} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_n - E \right) \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta) = - \sum_{ns} \sum_{\eta'} V(x, y; \eta \eta') \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta') \quad (2.5)$$

Projectem a continuació l'Eq. (2.5) sobre un canal $n's'$ determinat, en la forma

$$\int dy \phi_{n'}^*(y) \sum_{\eta} \chi_{s'}^*(\eta) \times [\text{Eq. (2.5)}], \quad (2.6)$$

quedant

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_n - E\right) \Psi_{ns}(x) = - \sum_{n's'} V_{nn'ss'}(x) \Psi_{n's'}(x), \quad (2.7)$$

on

$$V_{nn'ss'}(x) = \sum_{\eta\eta'} \int dy \phi_{n'}^*(y) \chi_{s'}^*(\eta) V(x, y; \eta\eta') \chi_s(\eta') \phi_n(y). \quad (2.8)$$

Les Eqs. (2.7) i (2.8) són la base del model de canals acoblats. Els membres de l'esquerra de (2.7) són les relacions en absència d'acoblements, mentre que els potencials unidimensional $V_{nn'ss'}$ de l'Eq. (2.8) proporcionen els acoblements entre canals.

A mode il·lustratiu, suposem un cas simple en que tenim únicament 2 canals $n, n' = 1, 2$. Hi haurà per tant 4 amplitudes incògnita: $\Psi_{1+}, \Psi_{1-}, \Psi_{2+}, \Psi_{2-}$. Les seves equacions de canals acoblats respectives resulten ser

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_1 - E\right) \Psi_{1+}(x) = & - \left(V_{11++}(x) \Psi_{1+}(x) \right. \\ & \left. + V_{11+-}(x) \Psi_{1-}(x) + V_{12++}(x) \Psi_{2+}(x) + V_{12+-}(x) \Psi_{2-}(x) \right). \end{aligned} \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_1 - E\right) \Psi_{1-}(x) = & - \left(V_{11-+}(x) \Psi_{1+}(x) \right. \\ & \left. + V_{11--}(x) \Psi_{1-}(x) + V_{12-+}(x) \Psi_{2+}(x) + V_{12--}(x) \Psi_{2-}(x) \right). \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_2 - E\right) \Psi_{2+}(x) = & - \left(V_{21++}(x) \Psi_{1+}(x) \right. \\ & \left. + V_{21+-}(x) \Psi_{1-}(x) + V_{22++}(x) \Psi_{2+}(x) + V_{22+-}(x) \Psi_{2-}(x) \right). \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_2 - E\right) \Psi_{2-}(x) = & - \left(V_{21-+}(x) \Psi_{1+}(x) \right. \\ & \left. + V_{21--}(x) \Psi_{1-}(x) + V_{22-+}(x) \Psi_{2+}(x) + V_{22--}(x) \Psi_{2-}(x) \right). \end{aligned} \quad (2.12)$$

Notam que les equacions són sempre unidimensionals (en x) i que quan ens restringim a un sol canal, menyspreant acoblements, recuperam el que podem anomenar límit 1D estricta.

Capítol 3

Model de canals acoblats amb textura d'espí

3.1 El formalisme no colineal

Suposem que l'estat d'espí a cada canal és tal que a la regió central, on hi ha l'efecte dispersor, l'espínor depèn de la posició,

$$\chi_s(\eta) \rightarrow \chi_s(\eta, x). \quad (3.1)$$

Suposem un Hamiltonià igual al d'abans

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 + V(x, y, \eta \eta'), \quad (3.2)$$

però ara tenim que l'expansió de la funció d'ona és

$$\Psi(x, y, \eta) = \sum_{ns} \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta, x). \quad (3.3)$$

La definició dels canals és també semblant a la d'abans

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega^2 y^2 \right) \phi_n(y) = \epsilon_n \phi_n(y), \quad (3.4)$$

i per la part d'espí tenim que

$$\vec{\sigma} \cdot \hat{n}(x) \chi_s(\eta, x) = s \chi_s(\eta, x), \quad (3.5)$$

on $\hat{n}(x)$ ens dóna la direcció de quantització de l'espí al punt x .

És important remarcar que la variabilitat espacial en la direcció dels espinors donats a l'Eq. (3.1) es restringeix únicament a la regió central del sistema, allà on hi ha l'efecte dispersor sobre els canals. A les regions asimptòtiques seguim assumint que la direcció de quantització és uniforme a l'espai. La diferència amb el capítol anterior està en que les direccions de quantització asimptòtiques dels dos cables poden ser diferents.

Substituint la funció d'ona (3.3) a l'equació de Schrödinger obtenim

$$\begin{aligned} \sum_{ns} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_n - E \right) \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta, x) = \\ - \sum_{ns} \sum_{\eta'} V(x, y, \eta\eta') \Psi_{ns}(x) \phi_n(y) \chi_s(\eta', x) \end{aligned} \quad (3.6)$$

Seguint el mateix tractament del Cap. 1, a continuació projectarem per la coordenada transversal $\int dy \phi_{n'}^*(y) \times$ i la d'espí $\sum_{\eta} \chi_{s'}^*(\eta, x) \times$. La part dreta de l'equació quedarà

$$- \sum_{ns} V_{n's'ns}(x) \Psi_{ns}(x) \quad (3.7)$$

on ara és

$$V_{n's'ns}(x) \equiv \sum_{\eta\eta'} \int dy \phi_{n'}^*(y) \chi_{s'}^*(\eta, x) V(x, y, \eta\eta') \phi_n(y) \chi_s(\eta', x). \quad (3.8)$$

A la part esquerra de l'equació primer projectam sobre la coordenada transversal $\int dy \phi_{n'}^*(y) \times$

$$\sum_s \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \epsilon_n - E \right) \Psi_{n's}(x) \chi_s(\eta, x), \quad (3.9)$$

i a continuació projectam sobre espins $\sum_{\eta} \chi_{s'}^*(\eta, x) \times$, arribant a l'expressió

$$\sum_s -\frac{\hbar^2}{2m} D_{s's}^{(2)}(x) \Psi_{n's}(x) + (\epsilon_n - E) \Psi_{n's}(x), \quad (3.10)$$

on hem definit l'operador diferencial

$$D_{s's}^{(2)}(x) \equiv \sum_{\eta} \chi_{s'}^*(\eta, x) \frac{d^2}{dx^2} \chi_s(\eta, x). \quad (3.11)$$

Agrupant els resultats, el sistema d'equacions per les amplitudes $\{\Psi_{ns}(x)\}$ es pot escriure com

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{s'} D_{ss'}^{(2)}(x) \Psi_{ns'}(x) + (\epsilon_n - E) \Psi_{ns}(x) = - \sum_{n's'} V_{nsn's'}(x) \Psi_{n's'}(x), \quad (3.12)$$

on hem intercanviat $(n's')$ per (ns) per tal d'escriure l'equació corresponent a la projecció sobre n i s .

El límit d'espins en una direcció de quantització fixa correspon a tenir

$$D_{ss'}^{(2)}(x) = \frac{d^2}{dx^2} \delta_{ss'}, \quad (3.13)$$

i en aquest cas es recuperen les equacions de canals acoblats del formalisme d'espins colineals.

3.2 Variació de l'eix de quantització

Els espinors en una direcció de quantització donada pels angles polars (θ, ϕ) són

$$\chi_+(\eta) \equiv \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}, \quad \chi_-(\eta) \equiv \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\phi/2} \\ -\cos \frac{\theta}{2} e^{i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Suposarem que aquests angles prenen els valors asimptòtics (θ_c, ϕ_c) , on $c = L, R$ indica el contacte corresponent. En primera aproximació, assumirem una variació suau dels angles, caracteritzada per una funció de tipus Fermi,

$$\mathcal{F}_{x_0 s_0}(x) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{x-x_0}{s_0}\right)}, \quad (3.15)$$

per la que $\mathcal{F}(-\infty) = 1$, $\mathcal{F}(+\infty) = 0$. Els paràmetres x_0 i s_0 de la funció de Fermi determinen el punt on es dona la transició i la suavitat d'aquesta respectivament. Els angles a un determinat valor de x seran

$$\theta(x) = \theta_L \mathcal{F}_{x_0 s_0}(x) + \theta_R (1 - \mathcal{F}_{x_0 s_0}(x)), \quad (3.16)$$

$$\phi(x) = \phi_L \mathcal{F}_{x_0 s_0}(x) + \phi_R (1 - \mathcal{F}_{x_0 s_0}(x)). \quad (3.17)$$

Com ja hem comentat, per a $x \rightarrow \pm\infty$ els angles recuperen els valors uniformes dels respectius contactes (θ_c, ϕ_c) . Es pot generalitzar fàcilment la funció de l'Eq. (3.15) per tal de modelar altres tipus d'evolucions més elaborades dels angles. Per exemple a l'estudi de la fase de Berry, definim la variació dels angles fent que l'angle azimutal, ϕ , vagi de zero a 2π , mantenint θ (angle polar) fixe. L'evolució és d'un sol paràmetre, però serien dos en cartesianes, i permet definir una trajectòria tancada.

3.3 Potencial dispersor

Suposem l'Hamiltonià de l'Eq. (3.2) amb el potencial

$$V \equiv \Delta_B \vec{\sigma} \cdot \hat{n}(x), \quad (3.18)$$

on $\hat{n}(x)$ segueix l'evolució donada a les Eqs. (3.16) i (3.17) i Δ_B indica l'energia de Zeeman associada al camp magnètic. Suposarem que els angles evolucionen des de $(\theta_L, \phi_L) = (\pi/2, 0)$ a $(\theta_R, \phi_R) = (\pi/2, \pi/2)$, des de l'eix x a l'eix y a mesura que la posició x va augmentant (la Fig. 3.1 mostra un esboç de l'evolució). Físicament, la situació representada és la injecció d'un electró amb espí al llarg de x . A mesura que es propaga el terme de Zeeman força l'espí a girar. El gir es donarà de manera ideal només en el límit adiabàtic i en els altres casos haurien d'apareixer fases acumulades en la transmissió i fins i tot reflexions.

Els elements de matriu del potencial, Eq. (3.8), són independents de x i trivialment es venen donats per

$$V_{n's'ns} = s \Delta_B \delta_{n'n} \delta_{s's}. \quad (3.19)$$

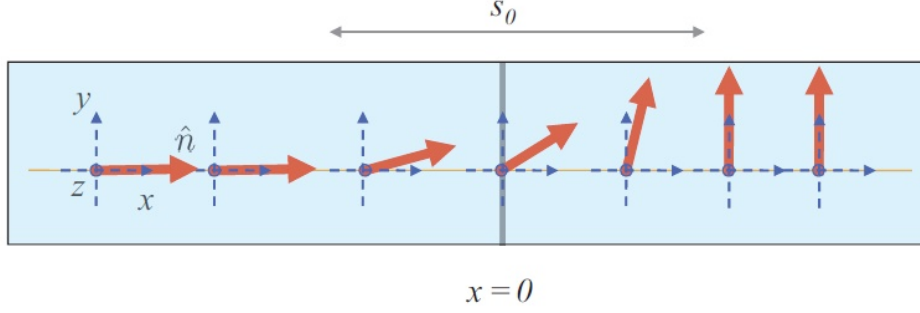


Figura 3.1: Esboç de la variació de \hat{n} per la inclinació d'un espí en una longitud s_0 degut al potencial de l'Eq. (3.18).

Amb aquest potencial les equacions del model CCM són

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{s'} D_{ss'}^{(2)}(x) \Psi_{ns'}(x) + (\epsilon_n + s\Delta_B - E) \Psi_{ns}(x) = 0. \quad (3.20)$$

Podem veure que les energies ja no són ϵ_n sinó que degut al potencial dispersor ara tenim $\epsilon_n + s\Delta_B$, és a dir, l'efecte que té l'aplicació d'aquest camp magnètic és la de separar l'activació dels nivells energètics (la Fig. 3.2 representa aquesta situació). També podem remarcar que en aquest cas l'acoblament entre canals és purament d'espí, sense variació del nombre quàntic n .

En el límit adiabàtic tenim

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi_{ns}^{(ad)}(x) + (\epsilon_n + s\Delta_B - E) \Psi_{ns}^{(ad)}(x) = 0. \quad (3.21)$$

Les solucions del problema adiabàtic, trivialment, són

$$\Psi_{ns}^{(ad)}(x) = e^{\pm ik_{ns}x}, \quad k_{ns} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - \epsilon_n - s\Delta_B)}. \quad (3.22)$$

Les Eqs. (3.20) del problema CCM general (no adiabàtic) acoblen els canals $(n+)$ i $(n-)$ i, per tant, podrem prendre les definicions típiques d'un problema de dispersió amb les matrius complexes $t_{ss'}$ i $r_{ss'}$ de transmissió i reflexió, respectivament. Les corresponents matrius de dispersió adiabàtiques, corresponents a transmissió ideal, són

$$t_{s's}^{(ad)} = \delta_{s's}, \quad (3.23)$$

$$r_{s's}^{(ad)} = 0. \quad (3.24)$$

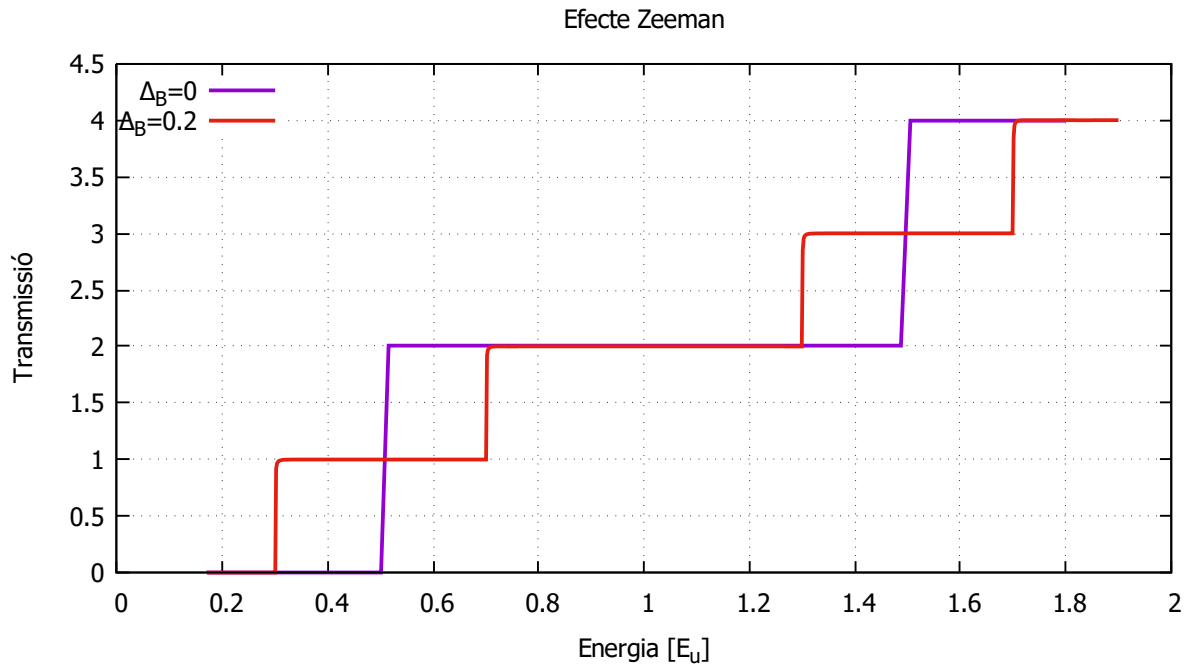


Figura 3.2: Separació dels nivells energètics degut al potencial de l'Eq. (3.18). Els nostres càlculs són en unes unitats característiques de longitud L_u i energia E_u . Estan relacionades entre si per $E_u = \frac{\hbar^2}{mL_u^2}$. En el cas de confinament parabòlic agafam $E_u = \hbar\omega_0$ i aleshores $L_u = \sqrt{\frac{\hbar^2}{mE_u}}$. Els valors concrets de E_u i L_u depenen del material a través de la massa efectiva m . Si per exemple prems $\hbar\omega_0 = 1 \text{ meV}$ i $m = 0.065m_e$, m_e massa nua de l'electró, pots donar el valor de L_u que sol ser de l'ordre de 10 nm.

Capítol 4

Efectes i Resultats

Tractarem a continuació el cas de la inclinació d'un espí en presència d'un terme de Zeeman que va canviant la seva orientació i analitzarem la fase que apareix en termes d'adiabaticitat. També analitzarem la situació en presència d'una interacció de Rashba localitzada a la regió de la inclinació.

4.1 Adiabaticitat i fases dinàmiques

Un procés adiabàtic és aquell que implica un canvi lent del Hamiltonià del sistema, des del seu valor inicial al seu valor final. Existeixen dos tipus de temps característics, el temps "intern", T_i , que representa el moviment del sistema, i el temps "extern", T_e , sobre el qual els paràmetres del sistema canvien sensiblement. Un procés adiabàtic és dóna quan $T_e \gg T_i$. És a dir, quan hi ha una variació gradual de les condicions externes.

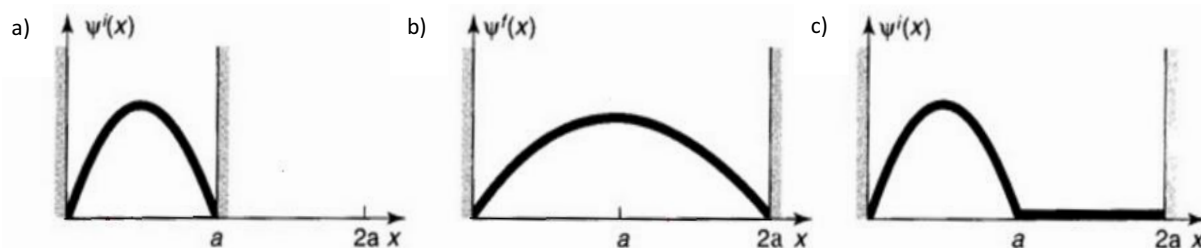


Figura 4.1: Al capítol "The adiabatic approximation" del llibre de Griffiths [1] hi trobam aquesta figura que representa a) El Hamiltonià d'una partícula en l'estat fonamental del pou quadrat infinit. b) La partícula segueix en estat fonamental si la paret es mou lentament, és a dir, adiabàticament. c) En canvi si la paret es mou rapidament, o sigui que el procés no és adiabàtic, la partícula no s'ajusta a l'estat fonamental del nou pou sinó que tendeix a mantenir el seu estat inicial.

En el nostre cas l'efecte de la adiabaticitat es pot veure representat a les Fig. 4.2 i 4.3. La primera ens ensenya que quan la transmissió és adiabàtica el resultat és una funció tipus escaló que augmenta una unitat cada vegada que s'activa un nivell energètic, com era

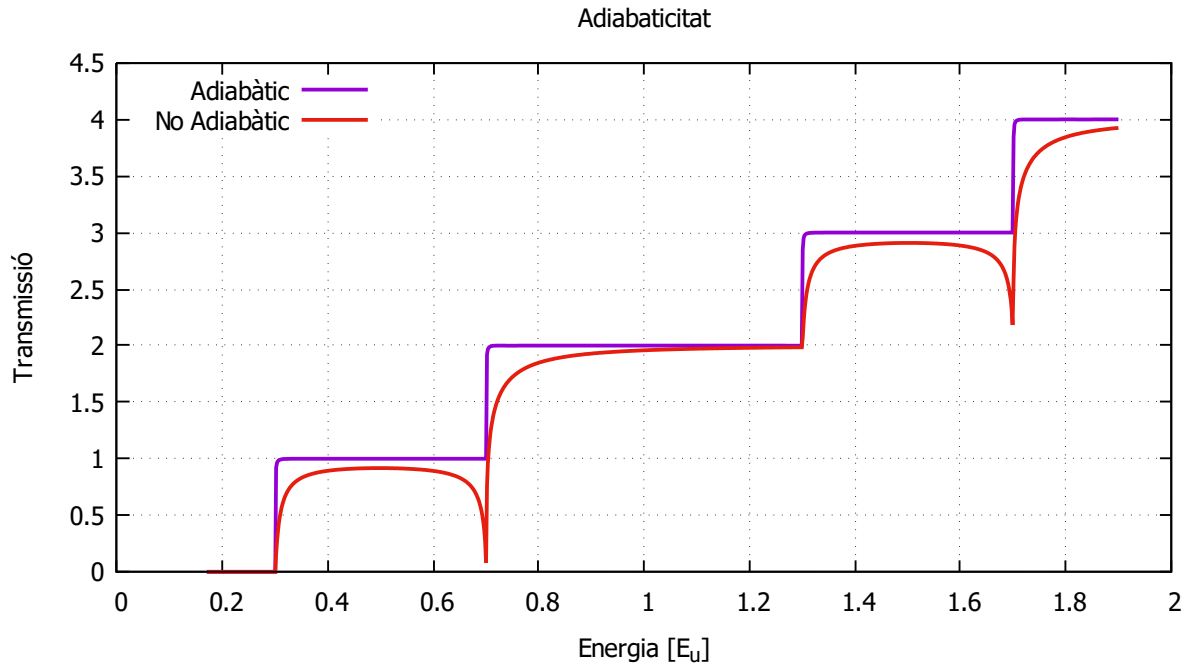


Figura 4.2: Efecte de la adiabaticitat en la transmissió en funció de l'energia.

d'esperar. En canvi, quan el procés no és adiabàtic la transmissió s'aproxima de manera asimptòtica a la solució ideal, cas anterior, i presenta *dips*, (depresions), en l'activació de determinats nivells d'energia, ja que en aquests punts concrets en els que tens un nombre imparell de modes propagants, és a dir, tens un canal propagant desaparellat, els canals passen de evanescent a propagant bruscament, conseqüència de la no adiabaticitat del sistema. Per la seva banda, a la segona observem més clarament aquesta aproximació asimptòtica per una energia fixada. Trivialment, tots els electrons que no registrem com a transmesos s'han reflectit. Veim que per a situacions extremes, el fenomen de reflexió fins i tot supera al de transmissió.

Seguint amb els efectes de la no adiabaticitat, quan un electró es propaga d'un contacte a l'altre seguint un canal amb una evolució característica de $\theta(x)$ i $\phi(x)$ acumula una fase en la seva funció d'ona. Aquesta fase s'anomena fase dinàmica ja que és deguda al moviment de la partícula dins el potencial donat. Només si la variació espacial és molt ràpida, no adiabàtica hi haurà una acumulació de fase (dinàmica), si el procés és lent la fase hauria de ser nula. El nostre model compleix aquest requisit per la fase en la inclinació d'un espí. La Fig. 4.4 mostra l'evolució, des del límit no adiabàtic a l'adiabàtic, de la fase de la funció d'ona en el procés en que l'espí varia la seva inclinació depenent d'un sol paràmetre s_0 . Podem observar que, efectivament, a mesura que la variació és més calmada la fase disminueix i s'apropa al zero teòric desitjat.

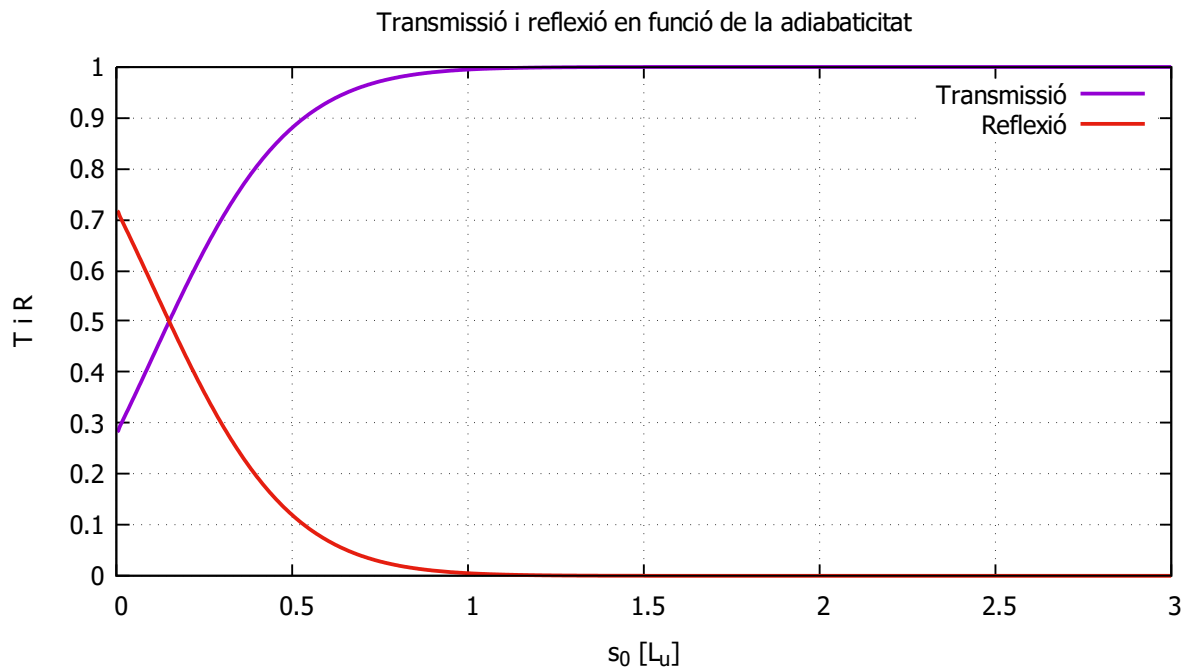


Figura 4.3: Comparació de la reflexió i la transmissió en funció de l'adiabaticitat, per a una energia fixada de $0.695[E_u]$.

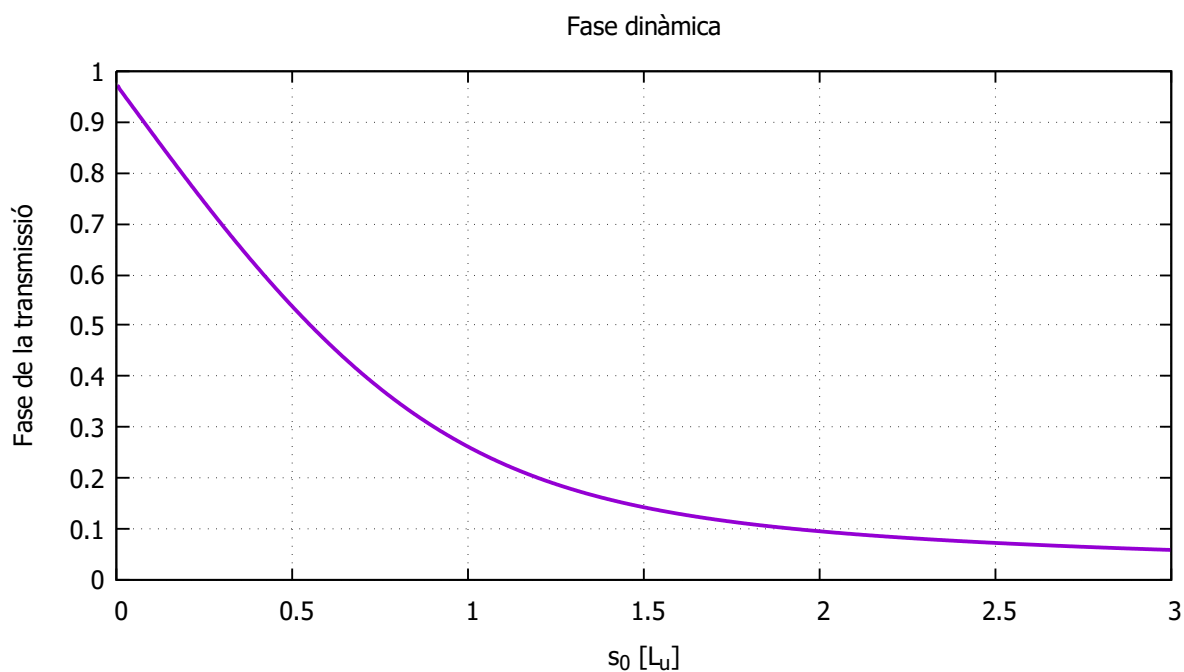


Figura 4.4: Evolució, des del límit no adiabàtic a l'adiabàtic, de la fase en la inclinació d'un espí, per a una energia fixada de $0.695[E_u]$.

4.2 Fase de Berry

Quan el moviment és molt lent, adiabàtic, es parla de la fase de Berry que típicament un sistema quàntic adquireix, quan es fa una evolució temporal cíclica en algun dels seus paràmetres. Pel nostre cas, si l'evolució és purament adiabàtica, la fase acumulada serà zero si només evoluciona un sol paràmetre, com hem comprovat a l'apartat anterior, mentre que, en evolucions de més d'un paràmetre, esperam que hi pugui haver fases de Berry no nul·les.

En cables quàntics amb interacció entre espins, s'ha proposat que la interacció de Rashba dona lloc a l'aparició d'una hèlix de magnetització espontània, amb una periodicitat donada per la intensitat de la interacció de Rashba [7]. També s'han estudiat textures semblants en el context de fermions de Majorana a les Refs. [3, 8].

Es raonable esperar que la transmissió en presència d'un terme de Zeeman helicoidal, es pugui comparar amb una precessió temporal del camp magnètic. Aquesta es comenta al Cap. 10 del llibre de Griffiths [1], demostrant que per la precessió, fins i tot en el límit adiabàtic, es produeix una fase quàntica de Berry igual a $-\Omega/2$, on Ω es l'angle sòlid que es cobreix amb la precessió del camp magnètic. Aquest resultat es pot generalitzar per un espí arbitrari s a $-s\Omega$.

El terme de Zeeman helicoidal considerat correspon a un camp magnètic amb orientació depenent de x en la forma:

$$\theta(x) = \theta \quad (\text{constant } \forall x), \quad (4.1)$$

$$\phi(x) = \begin{cases} 0 & (x < 0), \\ \frac{2\pi x}{\lambda} & (0 < x < \lambda), \\ 2\pi & (x > \lambda). \end{cases} \quad (4.2)$$

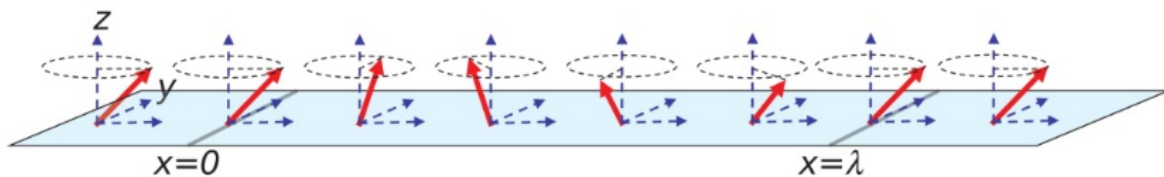


Figura 4.5: Il·lustració de la variació en forma helicoidal.

És a dir, θ és constant i ϕ dona tota una volta tancada en una longitud del cable igual a λ . El paràmetre λ representa l'adiabaticitat en aquest cas, λ zero o petit, implica una execució ràpida de l'hèlix de l'espí, en canvi un λ elevat és una variació lenta dels angles. Al formalisme desenvolupat hem abordat el següent objectiu: obtenir la fase a la transmissió i comparar-la en el límit adiabàtic amb la fase de Berry $-s\Omega$.

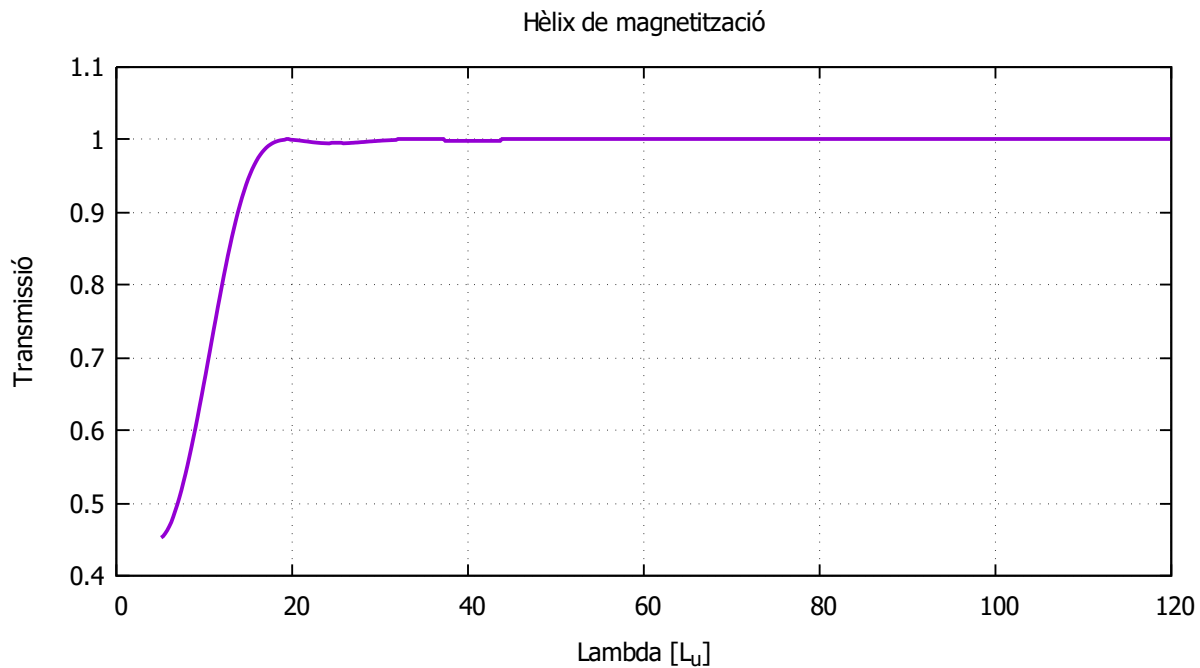


Figura 4.6: Transmissió considerant un terme de Zeeman helicoidal.

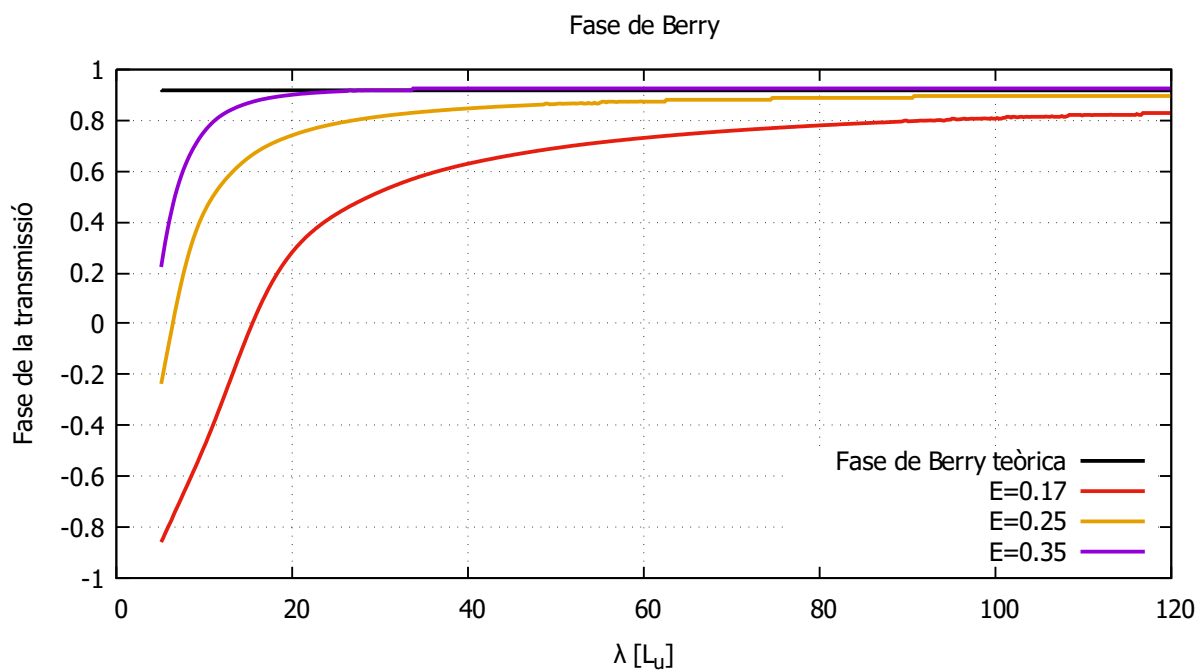


Figura 4.7: Evolució de la fase en l'hèlix d'espí.

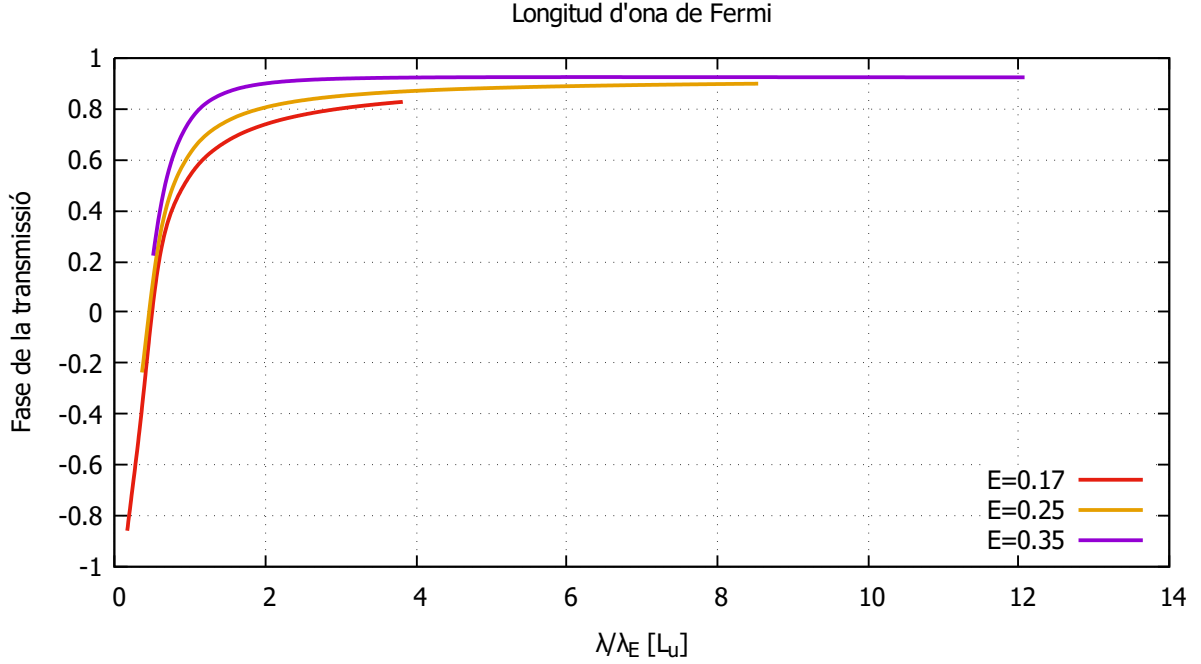


Figura 4.8: En aquesta gràfica a l'eix horitzontal hem posat lambda dividit per la lambda corresponent a l'energia E , diguem-li λ_E , longitud d'ona de Fermi. Aquesta és simplement $2\pi/k_{ns}$ de l'equació (3.22). Volem veure si amb aquest reescalat els resultats es superposaven, això és, si la no adiabaticitat escala amb l'energia. Clarament es compacten un poc, però no es produeix un escalat perfecte.

A la Fig. 4.6 veiem que la transmissió aviat arriba al límit ideal, abans de $\lambda = 20L_u$. En canvi, la convergència de la fase depèn més de l'energia, com més alta és aquesta, més ràpidament s'aproximen els resultats al valor teòric de la fase de Berry. És a dir, queda demostrat que el cas de transmissió en presència d'un terme de Zeeman helicoidal, és anàleg al de la precessió temporal d'un camp magnètic, ja que la fase obtinguda en el límit adiabàtic no és zero com la que havíem obtingut a l'apartat anterior, Fig. 4.4, sinó que per totes les diferents energies dels exemples sempre tendeix a l'angle sòlid que és cobreix en l'hèlix que fa l'espí, o sigui, el valor esperat de la fase de Berry.

4.3 Interacció de Rashba

Afegirem ara a l'inclinació de l'espí l'efecte d'una interacció espí-òrbita de tipus Rashba localitzada a la zona central del sistema com explica la il.lustració segent

$$H_R = \frac{1}{2} \alpha(x) (p_x \sigma_y - p_y \sigma_x) + \text{H.c.} \quad (4.3)$$

$$= \frac{1}{2} [\alpha(x) p_x + p_x \alpha(x)] \sigma_y - \alpha(x) p_y \sigma_x . \quad (4.4)$$

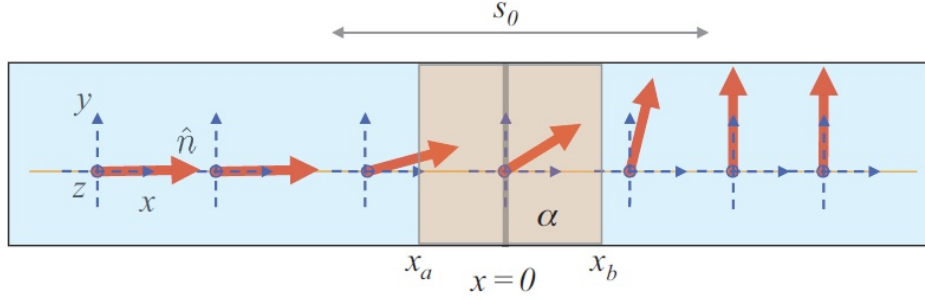


Figura 4.9: Esboç de la variació de \hat{n} per l'inclinació d'un espí més una interacció espí-òrbita localitzada de tipus Rashba.

Una interacció d'aquest tipus es pot manipular elèctricament controlant l'asimetria del potencial en direcció vertical (z). Dins el model bidimensional (xy) de Rashba aquesta asimetria queda resumida al valor del paràmetre α que fixa la intensitat de la interacció. Suposarem que α és funció de la posició $\alpha(x)$ i que agafa un valor finit només a la zona central. Interaccions de Rashba localitzades ja han estat objecte d'estudi, per exemple a la Ref. [4]. A l'Eq. (4.3) s'ha considerat la versió simetritzada, fent la semisuma amb l'operador Hermític conjugat (H.c.). D'aquesta manera a l'expressió (4.4) resultant apareix la combinació $\alpha(x)p_x + p_x\alpha(x)$, on s'ha de tenir en compte que amb una interacció de Rashba no uniforme $\alpha(x)$ i p_x no commuten. La dependència espacial de $\alpha(x)$ la modelarem amb funcions de Fermi com a l'Eq. (3.15). Suposant que x_a i x_b són, respectivament, els punts on s'encèn i s'apaga $\alpha(x)$, i que el valor central és α_0 , tenim que

$$\alpha(x) \equiv \alpha_0 (-\mathcal{F}_{x_a s_0}(x) + \mathcal{F}_{x_b s_0}(x)) . \quad (4.5)$$

El següent que necessitam determinar, dins el model CCM, són els elements de matriu $V_{nsn's'}(x)$ de l'Eq. (3.8) amb la interacció de Rashba Eq. (4.4). Com que la interacció de Rashba depèn del moment apareixeran novament termes associats a la no adiabaticitat semblants als de l'energia cinètica. És fàcil veure que

$$\begin{aligned} V_{nsn's'}(x) &= -\frac{1}{2} \delta_{nn'} \sum_{\eta} s_{\eta} \chi_s^*(\eta, x) \left(\alpha(x) \frac{d}{dx} + \frac{d}{dx} \alpha(x) \right) \chi_{s'}(\bar{\eta}, x) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \langle n | p_y | n' \rangle \alpha(x) \sum_{\eta} \chi_s^*(\eta, x) \chi_{s'}(\bar{\eta}, x) , \end{aligned} \quad (4.6)$$

on $\bar{\eta}$ indica la component contrària a η i hem utilitzat que les components de les matrius de Pauli són $\sigma_x(\eta, \eta') = \delta_{\bar{\eta}\eta'}$ i $\sigma_y(\eta, \eta') = -i s_{\eta} \delta_{\bar{\eta}\eta'}$. A l'expressió (4.6) les sumes sobre components dels espinors es poden obtenir a partir de l'Eq. (3.14) i són immediats els elements de matriu del pou d'oscil·lador harmònic

$$\langle n | p_y | n' \rangle = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2}\ell_0} \left(\sqrt{n'+1} \delta_{n'+1n} - \sqrt{n'} \delta_{n'-1n} \right) , \quad (4.7)$$

on $\ell_0 = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$ és la longitud d'oscil·lador en y . Si en comptes de confinament harmònic es consideràs un pou quadrat infinit de longitud ℓ_0 aleshores seria

$$\langle n|p_y|n'\rangle = \frac{2i\hbar nn'}{(n^2 - n'^2)\ell_0} \left(1 - (-1)^{n'+n}\right). \quad (4.8)$$

L'Eq. (4.6) mostra clarament com la interacció de Rashba dóna lloc a acoblaments de *spin-flip* que poden ser de dos tipus, diagonals en n 's (terme en p_x) o bé acoblar n 's diferents (terme en p_y). Aquests termes es coneixen al camp com terme de Rashba longitudinal i d'acoblament o mescla entre bandes, respectivament. Pel cas de confinament harmònic l'acoblament és només entre n 's veïnes, com mostra l'Eq. (4.7).

El límit adiabàtic de l'Eq. (4.6) és més difícil de definir que pel terme cinètic. Agafarem la següent aproximació assegurant l'Hermiticitat de l'Hamiltonià

$$\begin{aligned} V_{n's'n'}^{(ad)}(x) &= -\frac{1}{2} \delta_{nn'} \left(\beta_{ss'}(x) \alpha(x) \frac{d}{dx} + \frac{d}{dx} \alpha(x) \beta_{ss'}(x) \right) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar} \langle n|p_y|n'\rangle \alpha(x) \gamma_{ss'}(x), \end{aligned} \quad (4.9)$$

on hem introduït les següents funcions

$$\beta_{ss'}(x) \equiv \sum_{\eta} s_{\eta} \chi_s^*(\eta, x) \chi_{s'}(\bar{\eta}, x), \quad (4.10)$$

$$\gamma_{ss'}(x) \equiv \sum_{\eta} \chi_s^*(\eta, x) \chi_{s'}(\bar{\eta}, x). \quad (4.11)$$

A la Ref. [4] es va investigar l'efecte Fano-Rashba, en el qual una interacció de Rashba localitzada dóna lloc a l'aparició de *dips* de conductància al final dels plateaus. Aquests *dips* són deguts a l'acoblament amb estats quasilligats induïts pel Rashba. A la Ref. [5] es va estendre aquesta anàlisi al cas de tenir un camp magnètic uniforme. Amb les gràfiques següents volem analitzar la manifestació dels *dips* quan els contactes estan quantitzats en direccions no colineals (cosa no contemplada al treball mencionat).

Quan a les gràfiques 4.10, 4.11, 4.12 i 4.13 posam T++, T+-, ..., ens referim al sentit de l'espí, així doncs T++ representa la transmissió que hi ha hagut de electrons que al contacte de l'esquerra tenen espí en sentit "up", tenguí la direcció que tenguí, a electrons que al contacte de la dreta tenen també els espins en sentit "up", independentment de si la direcció és colineal o no.

A la Fig. 4.10 veiem clarament com decau la transmissió en una energia específica degut a la interacció espí-òrbita, que no té un eix de quantització ben definit ja que es mesclen les matrius de Pauli, que no comuten entre si. La gràfica 4.11 també té mínims de conductància al primer escaló, en canvi, en el cas adiabàtic no apareixen aquests *dips*.

Observam que degut als efectes del potencial de Zeeman, explicats anteriorment, al primer nivell d'energia només s'activen les transmissions de menys a menys, per tant a la darrera gràfica comparem les tres circumstàncies diferents només per a aquest cas de transmissió concret.

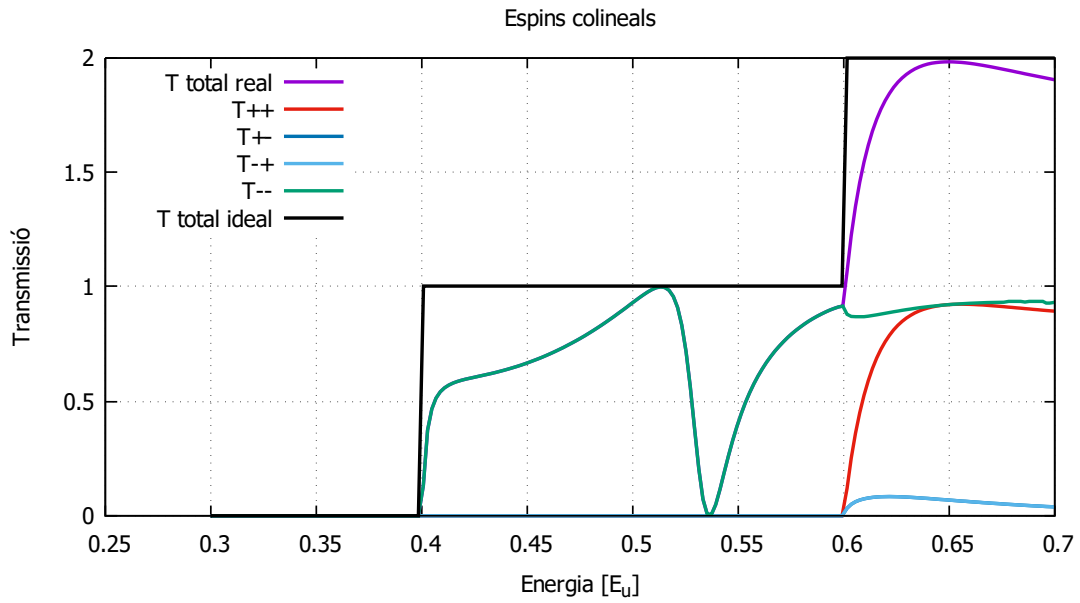


Figura 4.10: Transmissió quan les direccions dels espins són colineals en presència d'una interacció de Rashba localitzada.

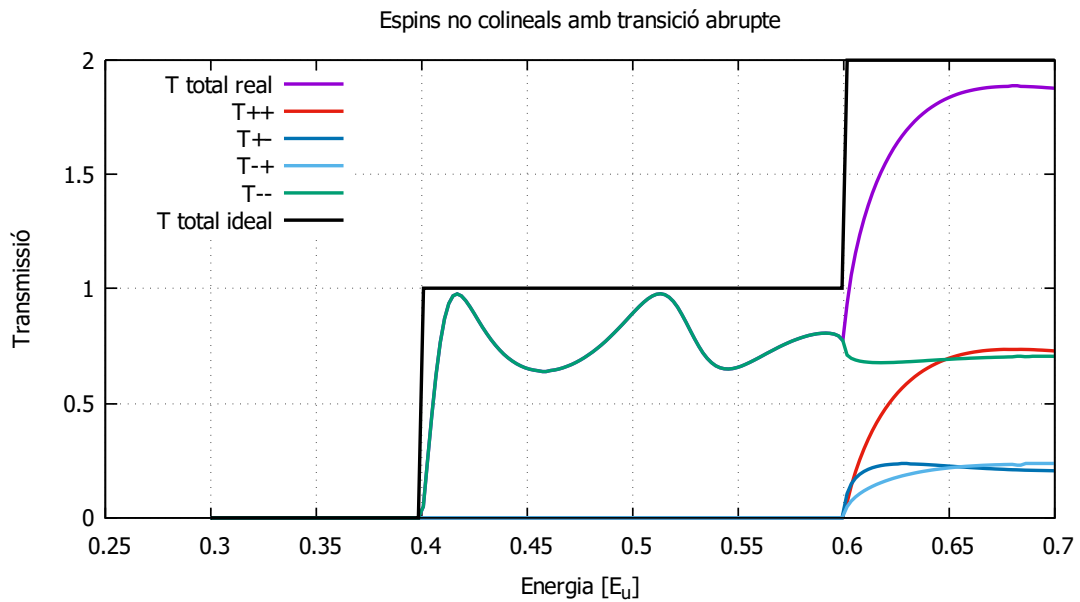


Figura 4.11: Transmissió en el procés no adiabàtic de transport d'electrons amb espins en direcció x al contacte de l'esquerra ($-\infty$), els angles dels quals varien seguint una funció tipus Fermi, a espins en direcció y al contacte de la dreta ($+\infty$), en altres paraules, que les direccions no són colineals.

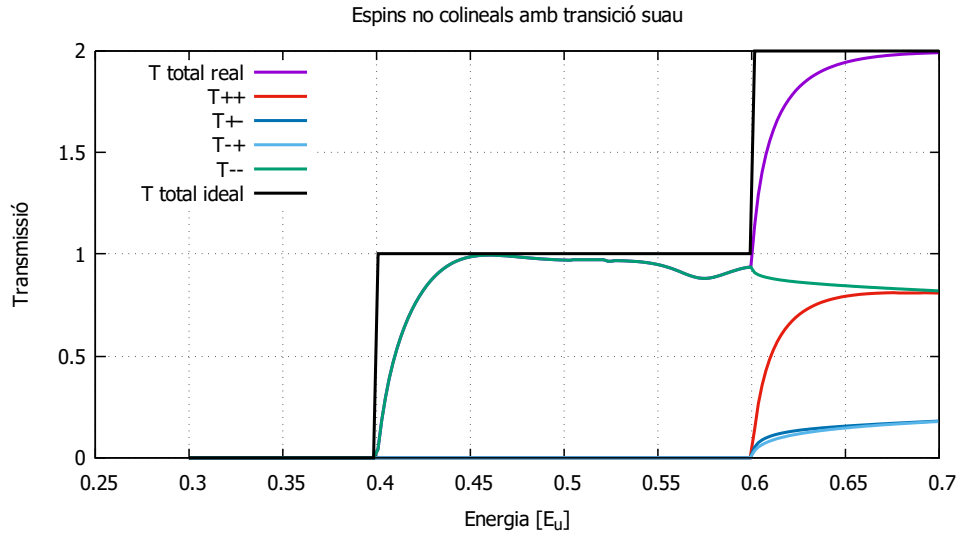


Figura 4.12: Transmissió quan el procés és adiabàtic amb les direccions dels espins no colineals.

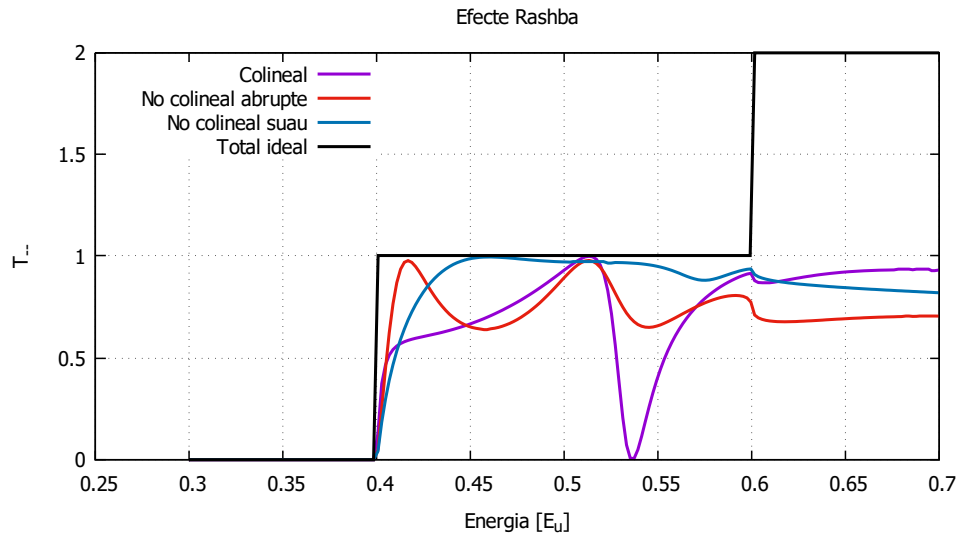


Figura 4.13: Transmissió d'espí down a espí down, ja que aquest és el primer que s'activa.

Quan ho comparem veiem que en el cas no colineal abrupte encara es segeix mantenint l'estructura dels *dips* de conductància al plateau del primer escaló, però quan passam al cas adiabàtic queda esborrada tota l'estructura, ja no hi ha els característics mínims en la transmissió creats per la interacció tipus Rashba.

Capítol 5

Conclusions

En resum hem desenvolupat un model que permet abordar problemes amb direccions de quantització arbitràries. En el nostre cas hem pogut estudiar procesos on les direccions dels espins dels electrons no són colineals. De l'anàlisi dels efectes de la adiabaticitat en el problema de la inclinació d'un espí en presència d'un terme de Zeeman, que va variant la seva orientació utilitzant només un paràmetre, aconseguint així que no siguin colineals als diferents extrems, hem corroborat que la transmissió s'aproxima de manera assintòtica a l'ideal a mesura que la transició és més suau i que la fase de la funció d'ona tendeix a zero. Però hem descobert que en les situacions més extremes en que l'evolució sofreix canvis bruscs apareixen *dips* de conductància cada vegada que tenim un canal desaparellat i s'activa el següent nivell energètic. Possiblement per l'influència dels modes evanescents sobre els propagants. Quan a la regió de la inclinació hem afegit una interacció espí-òrbita de tipus Rashba, el que preteníem era ampliar l'estudi dels zeros de conductància als plateaus dels escalons de la Ref. [4] al cas d'espins no colineals. Amb aquestes condicions els resultats no han estat els esperats. En el procés no adiabàtic no colineal encara apareixen alguns *dips* en la transmissió, però quan la variació és suau es dissipa per complet aquesta estructura. Necessites que les direccions siguin colineals, si es romp aquesta colinealitat desapareix l'efecte que volíem analitzar. Per altra banda en l'estudi de la variació de l'espí en dos paràmetres, utilitzant una evolució temporal cíclica en forma d'hèlix, el que volíem demostrar és que aquest problema és afí al de la precessió temporal del camp magnètic. Efectivament hem trobat que encara que el procés sigui adiabàtic apareix una fase, la fase de Berry, que coincideix amb l'esperada teòricament, $-s\Omega$. En conclusió aquest treball només és una petita introducció al model de canals acoblats amb direccions d'espí no colineals, que pot servir de base per estudiar una gran nombre d'interaccions i efectes diferents.

Bibliografia

- [1] David J. Griffiths. *Introduction to Quantum Mechanics*. Pearson Prentice Hall, 2005.
- [2] Thomas Ihn. *Semiconductor Nanostructures Quantum States and Electronic Transport*. Oxford University Press, 2010.
- [3] Jelena Klinovaja, Peter Stano, Ali Yazdani, and Daniel Loss. Topological superconductivity and majorana fermions in rkky systems. *Phys. Rev. Lett.*, 111:186805, Nov 2013.
- [4] David Sánchez and Llorenç Serra. Fano-Rashba effect in a quantum wire. *Phys. Rev. B*, 74:153313, Oct 2006.
- [5] David Sánchez, Llorenç Serra, and Mahn-Soo Choi. Strongly modulated transmission of a spin-split quantum wire with local Rashba interaction. *Phys. Rev. B*, 77:035315, Jan 2008.
- [6] Max M. Shulaker, Gage Hills, Nishant Patil, Hai Wei, Hong-Yu Chen, H. S. Philip Wong, and Subhasish Mitra. Carbon nanotube computer. *Nature*, 501(7468):526–530, 09 2013.
- [7] Valeriy A. Slipko, Ibrahim Savran, and Yuriy V. Pershin. Spontaneous emergence of a persistent spin helix from homogeneous spin polarization. *Phys. Rev. B*, 83:193302, May 2011.
- [8] Guang Yang, Peter Stano, Jelena Klinovaja, and Daniel Loss. Majorana bound states in magnetic skyrmions. *Phys. Rev. B*, 93:224505, Jun 2016.