

# SOME CURRENT TOPICS IN CONDENSED MATTER PHYSICS 2018

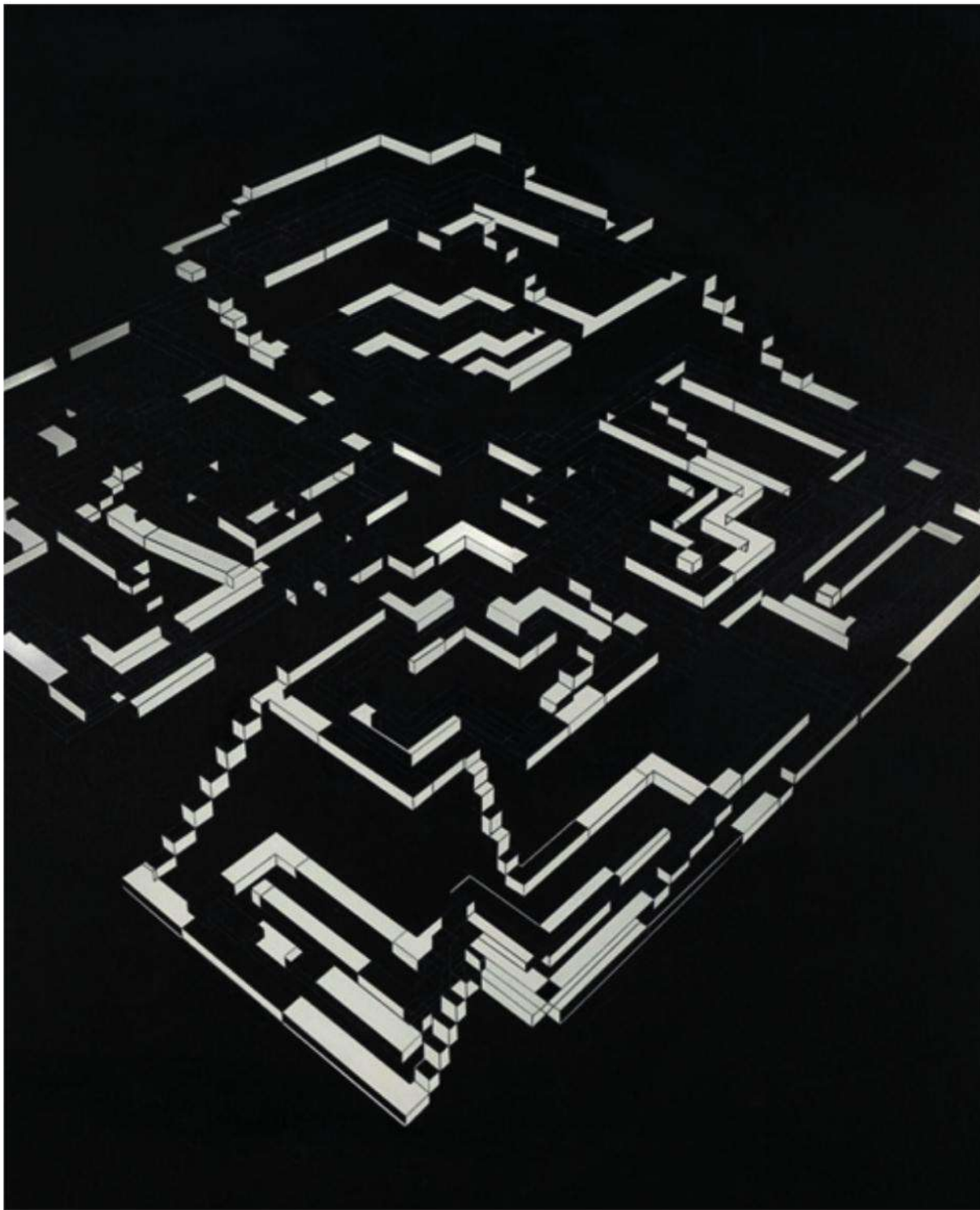
SELECTED TOPICS ON QUANTUM AND PHOTONIC STRUCTURES

M.E. MORA-RAMOS

R. PÉREZ-ÁLVAREZ

L. M. GAGGERO-SAGER

(editors)



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS

Colección: *Contemporary Condensed Matter Physics: Selected Topics*

Some current topics in condensed matter physics 2018

*Selected topics on quantum and photonic structures*

M. E. Mora-Ramos, R. Pérez-Álvarez,  
L. M. Gaggero-Sager

(Eds.)

Universidad Autónoma del Estado de Morelos  
Cuernavaca. México  
2019

**Some current topics in condensed matter physics, 2018.**

Selected topics on quantum and photonic structures.

**Colección: Contemporary Condensed Matter Physics:  
Selected Topics**

D.R. 2019, M. E. Mora-Ramos, R. Pérez-Álvarez, L. M. Gaggero-Sager

D.R. 2019, Universidad Autónoma del Estado de Morelos  
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa  
62210, Cuernavaca, Morelos  
publicaciones@uaem.mx  
libros.uaem.mx

ISBN: 978-607-8639-41-0

ISBN (colección): 978-607-8434-78-7

DOI: 10.30973/2018/condensed

Imagen de portada: Ernesto Ríos. *Nocturnal Labyrinth*, 81cm x 81cm,  
técnica mixta sobre tela, 2009. [www.ernestorios.com](http://www.ernestorios.com)

Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos



Esta obra está bajo una licencia de Creative Commons  
Reconocimiento-NoComercial-CompartirIgual  
4.0 Internacional.

## Foreword

For some years, some members of the Group of Solid State Physics at the Morelos Autonomous State University (UAEM), have edited a series of compilations of selected talks that were presented at the Workshop of Molecular and Condensed Matter Physics, which is held at UAEM since 2008. This is the fifth of this series of electronic books, which corresponds to the compilation made in 2018. It contains some recent contributions in several areas of the research frontier in Condensed Matter Physics (<http://web.fc.uaem.mx/tallerfmcm/temas.htm>).

Since the first edition we have decided to keep the bilingual format (English-Spanish) with the purpose of achieving a wider diffusion of the contents via electronic means.

Cuernavaca, Mexico. November 2018    M. E. Mora-Ramos (memora@uaem.mx)  
   R. Pérez-Álvarez (rpa@uaem.mx)  
   L. M. Gaggero-Sager (lgaggero@uaem.mx)

Durante varios años, un grupo de profesores del Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido de la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, hemos realizado compilaciones de algunas de las conferencias impartidas en el Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, que se celebra desde 2008 en predios de la mencionada Institución. Luego de la publicación de los cuatro primeros volúmenes (<http://web.fc.uaem.mx/tallerfmcm/temas.htm>) de esta serie de libros electrónicos, presentamos a la comunidad el quinto, que corresponde a la compilación del año 2018. Como en las ocasiones anteriores, las contribuciones seleccionadas abarcan áreas de actividad de vanguardia de la Física de la Materia Condensada que no habían sido abordadas en los libros anteriores.

Como comentamos en el prefacio del primer volumen de la serie, hemos mantenido con toda intención el formato bilingüe (español-inglés), en aras de que los materiales publicados puedan encontrar mayor difusión vía *Internet*.

Cuernavaca, México. Noviembre 2018    M. E. Mora-Ramos ([memora@uaem.mx](mailto:memora@uaem.mx))  
  R. Pérez-Álvarez ([rpa@uaem.mx](mailto:rpa@uaem.mx))  
  L. M. Gaggero-Sager ([lgaggero@uaem.mx](mailto:lgaggero@uaem.mx))

# Contents

<b>Bipartite quantum control for quantum processing in the anisotropic Heisenberg-Ising model</b> .....	1
Francisco Delgado	
1 Introduction .....	1
2 Driven anisotropic Heisenberg-Ising Hamiltonian in a non local basis .....	3
2.1 Definitions and notation .....	4
2.2 Evolution operator solutions .....	5
2.3 Block structure .....	6
2.4 Inducing Evolution Loops and Exchange Operations ....	7
3 Representation space of evolution operations .....	8
3.1 Two qubit space and restricted space of representations ..	8
3.2 Entanglement properties of $\mathcal{R}$ and $S^7$ projections on $S^3$ ..	9
4 Evolution Loops and Exchange Operations .....	11
4.1 Generalities .....	11
4.2 Block conditions for diagonalization and antidiagonalization .....	11
4.3 Evolution loops and exchange operations .....	14
4.4 Remarks and extensions in control approaches .....	19
5 Generalized Diagonal and Antidiagonal Operations and Natural Quantum Gates Generated .....	20
5.1 Diagonal-Diagonal forms .....	21
5.2 Diagonal-Antidiagonal forms .....	22
5.3 Equivalence with computational gates .....	25
6 Entanglement dynamics .....	26
6.1 Evolution of Bell states entanglement .....	26
6.2 Control of maximal entanglement .....	26
7 Conclusions .....	27
References .....	32

<b>Photonic properties of two-dimensional dielectric crystals made of uniaxial polaritonic materials. A finite difference time domain treatment .</b>		<b>35</b>
Hernán Alejandro Gómez-Urrea and Miguel Eduardo Mora-Ramos		
1	Introduction . . . . .	35
2	The calculation of the photonic dispersion relation. . . . .	39
2.1	Periodic boundary conditions. . . . .	41
3	The initial excitation . . . . .	44
4	The system of interest . . . . .	46
5	Dispersion relations of uniaxial polaritonic photonic crystals . . . . .	48
5.1	Ordinary polaritonic modes . . . . .	48
5.2	The extraordinary polaritonic modes. . . . .	53
6	The influence of dielectric rod transversal geometry and unit cell filling fraction in the photonic dispersion relations . . . . .	60
	References . . . . .	66
<b>Evolución de Paquetes de Ondas de Huecos en Sistemas 1D . . . . .</b>		<b>69</b>
J. L. Beltrán-Díaz <sup>1</sup> , Eduardo Serna <sup>2</sup> and L. Diago-Cisneros <sup>1,2</sup>		
1	Introducción General . . . . .	69
1.1	Ley de Moore. . . . .	71
1.2	Efecto Túnel. . . . .	72
1.3	Computación Cuántica . . . . .	72
1.4	Espintrónica . . . . .	73
2	Nano-hilo semiconductor . . . . .	74
2.1	Sistema Físico . . . . .	74
2.2	Modelo Teórico . . . . .	75
2.3	Transporte Cuántico dependiente del espín . . . . .	77
2.4	Esquema en diferencias finitas: Crank-Nickolson . . . . .	77
2.5	Discusión de resultados . . . . .	78
3	Nano-cinta de grafeno . . . . .	81
3.1	Caracterización del Grafeno . . . . .	81
3.2	Estructura Cristalina y Espacio Inverso . . . . .	82
3.3	Sistema Físico . . . . .	85
3.4	Modelo Teórico . . . . .	86
3.5	Algoritmo Computacional . . . . .	91
3.6	Discusión de resultados . . . . .	91
4	Conclusiones . . . . .	93
5	Apéndices . . . . .	93
5.1	A: Obtención del Hamiltoniano del Grafeno . . . . .	93
5.2	B: Operador de Evolución Temporal . . . . .	95
5.3	C: Hamiltoniano en diferencias finitas sin SOI-R . . . . .	96
5.4	D: Hamiltoniano en diferencias finitas con SOI-R . . . . .	96
	Bibliografía . . . . .	97

<b>Acoustic modes in composite with cylindrical inclusions</b> . . . . .	99
J. A. Otero, R. Pérez-Álvarez, Ernesto M. Hernández, Suset G. Rodríguez, H. H. Cabanas	
1 Introduction . . . . .	99
2 Elastic Guided Waves Model . . . . .	102
2.1 Symmetry Analysis . . . . .	103
3 Semi-Analytical Finite Element Method . . . . .	106
4 Asymptotic Homogenization Method . . . . .	109
5 Results and Discussion . . . . .	111
6 Conclusions . . . . .	117
Bibliografía . . . . .	118
<b>Generación de minibandas en el coeficiente de absorción intrabanda en puntos cuánticos esféricos multicapas <math>GaAs/Al_xGa_{1-x}As</math></b> . . . . .	121
Karla Arely Rodríguez-Magdaleno	
1 Introducción . . . . .	122
2 Metodología . . . . .	124
2.1 Aproximación de masa efectiva . . . . .	124
2.2 Coeficiente de absorción . . . . .	127
2.3 Coeficiente de absorción intrabanda . . . . .	128
3 Resultados . . . . .	129
4 Conclusiones . . . . .	135
Referencias . . . . .	136
<b>Unitariedad y Simetría de la Matriz de Dispersión Multicomponente</b> . . . . .	139
L. Diago-Cisneros <sup>1,2</sup> , J. J. Flores-Godoy <sup>2</sup> , H. Rodríguez-Coppola <sup>1</sup> , G. Fernández-Anaya <sup>3</sup> and A. Mendoza-Álvarez <sup>3</sup>	
1 Introducción . . . . .	140
2 Tunelaje de flujos . . . . .	143
3 Pseudo-unitariedad generalizada de $S$ . . . . .	145
3.1 Caso EFA general: $N \geq 2$ . . . . .	148
3.2 Caso EFA particular: $N = 4$ . . . . .	149
3.3 Reducción del caso general al particular . . . . .	150
4 Reducción a la unitariedad de $S$ . . . . .	152
4.1 Límite de $N$ componentes desacoplados . . . . .	152
4.2 Base ortonormalizada completamente . . . . .	158
5 Relaciones de Simetría . . . . .	162
6 Tunelaje de Amplitudes . . . . .	163
6.1 Conservación del Flujo de Probabilidades . . . . .	166
7 Parámetros del modelo Kohn-Luttinger . . . . .	174
8 Parámetros de los hamiltonianos $\hat{\mathcal{H}}_u$ y $\hat{\mathcal{H}}_l$ . . . . .	175
9 Elementos matriciales de la FTM $M_u(z, z_0)$ . . . . .	176
10 Inestabilidades numéricas de la Matriz de Transferencia . . . . .	177
11 La Matriz de Continuidad . . . . .	179
12 Matrices para definir la Ley de Conservación de la Carga . . . . .	181
13 Matrices de transformaciones: Simetrías Discretas . . . . .	182



14	Matriz de transformación: Ecuaciones Diferenciales .....	182
	Referencias .....	183
	<b>Index</b> .....	185

# Bipartite quantum control for quantum processing in the anisotropic Heisenberg-Ising model

Francisco Delgado

## Abstract

Control of quantum entanglement has been considered an elemental physical resource for quantum applications in Quantum Information and Quantum Computation. Control of entangled states on a couple of atoms, ions or quantum dots are milestones in almost all quantum applications towards a scalable spin-based quantum computers or quantum devices. For magnetic systems, Heisenberg-Ising interaction generates and modifies entanglement properties of matter based quantum systems. When this interaction includes driven magnetic fields, it can be controlled to sustain, characterize or modify entanglement and other quantum properties. In this work, recent results on a general anisotropic three dimensional Heisenberg-Ising model including an inhomogeneous magnetic field are considered to generate some general quantum control for entanglement sustainability, programmed evolution and transformation based on Evolution loops and Exchange operations. This control is achievable through a set of physical parameters whose prescriptions are reported. The use of a non local basis in the model, to express time evolution, lets to take advantage on the analysis of those issues associated with entanglement and related control operations. Finally, generalized Evolution Loops and Exchange operations achievable in the current interaction are analyzed in terms of equivalent gates to those used for the costumed computational basis in quantum information processing.

## 1 Introduction

Control of quantum systems has been developed through some research trends, since general properties of control systems, control based on specific interactions and control related to a fine management of physical variables, all of them for concrete purposes. In particular, quantum entanglement control has been exploited for quantum applications because this resource is a central aspect to improve information processing in terms of capacity and speed [1-3]. Codification and management of

---

Francisco Delgado  
Tecnológico de Monterrey, México, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Unidad Estado de México,  
Atizapán, Estado de México, CP. 52926, México. e-mail: fdelgado@itesm.mx

information in quantum terms are alternative improved methods which contrast with classical approaches. Since fundamental applied proposals about Quantum Computation [4-6] and Quantum Cryptography [7, 8], quantum control has been developed as research area. Research around of entanglement control, their complexity, properties and potential usefulness [9, 10] are basic aspects in Quantum Mechanics [11], particularly associated with before applied developments.

Entanglement will not have a complete map of road until its quantification and behavior could be understood from quantum interactions and mathematical nature which arise it. In the last sense, in nowadays, Hamiltonian models able to generate entanglement are actually studied to understand how this quantum feature to emerge and to evolve on several physical systems. For magnetic systems in quantum mechanics, Heisenberg-Ising model [12, 13] is an interaction Hamiltonian among spin systems, which in addition could include driven external magnetic fields. Nielsen [14] reported by first time how spin systems can generate entanglement evolution under this model. Thus, another aim of entanglement research is its control in several terms: generation, sustainability and maximization. Development of quantum control has been boosted by notable works in nanoscale systems [15], discrete [16, 17] and continuous [18-20] feedback control.

Heisenberg-Ising interaction has been studied in terms of transference and control of entanglement in bipartite qubits [21], chains and lattices [22-25]. Based on these arrangements, different approaches have extended research on more complex systems depending on external parameters (temperature, strength of external field, geometry, etc.) [26-28]. Nowadays, control of quantum spin states for a single particle or a couple of particles (particularly in quantum dots, electronic gases or ion condensates) is still at the heart of developments towards a scalable spin-based quantum computer because this kind of control in combination with controlled state exchange between neighboring spins, would let to obtain universal quantum operations [29-31] in agreement with DiVincenzo criteria [32] in terms of reliability of state preparation and precise identification of qubits.

The main aim of this chapter is to review and depict in detail recent results using non-local basis to reduce the dynamics in the Heisenberg-Ising interaction between two qubits. This procedure exhibits the quantum information nature of the quantum system. By obtaining prescriptions for exact control schemes based on Evolution Loops and Exchange Operations, control operations are settled on quantum information for magnetic bipartite systems interacting under a general three dimensional anisotropic Heisenberg-Ising Hamiltonian including inhomogeneous driven magnetic fields in a fix direction. This approach includes several models as particular cases, which have been previously considered in literature. In the current approach, the use of non-local basis in terms of classical Bell states for the dynamics analysis remarks notable algebraic aspects found for this interaction around entanglement, generating direct control applications to state sustainability and manipulation. In addition, generalizable Evolution loops and Exchange operations for maximal entanglement manipulations are presented, suggesting an alternative grammar to traditional computational basis. Finally, some possible control effects on entanglement evolution are presented.

## 2 Driven anisotropic Heisenberg-Ising Hamiltonian in a non local basis

Control in Heisenberg-Ising interaction (for different models: XX, XY, XYZ, etc.) has been analyzed for several systems and configurations [33-35]. In the analysis about structured quantum control effects [36-39], different versions of Heisenberg-Ising interaction are considered in terms of physical elements or configurations: homogeneity of magnetic fields, restrictions in dimensions, number of particles involved and strength of external fields being used. Normally, because these aspects generate simplifications as in their geometry as in the properties of physical systems involved [34,40-43].

To develop results related to control, we adopt the following Hamiltonian recently developed for the bipartite anisotropic Heisenberg-Ising model [44] including an inhomogeneous magnetic field restricted to the  $h$ -direction ( $h = 1, 2, 3$  at time, corresponding to  $x, y, z$ ):

$$\begin{aligned} H_h &= \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 - \mathbf{B}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 - \mathbf{B}_2 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 \\ &= \sum_{k=1}^3 J_k \sigma_{1k} \sigma_{2k} - B_{1h} \sigma_{1h} - B_{2h} \sigma_{2h} \end{aligned} \quad (1)$$

which generalizes several models considered in control in the previously cited works. In the same terms and notation that [44], diagonalization of Hamiltonian to obtain the corresponding eigenvalues:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_h^{(1)} &= -J_h - R_{h+}, \quad \mathcal{E}_h^{(2)} = -J_h + R_{h+} \\ \mathcal{E}_h^{(3)} &= J_h - R_{h-}, \quad \mathcal{E}_h^{(4)} = J_h + R_{h-} \end{aligned} \quad (2)$$

where  $R_{h-}$  and  $R_{h+}$  are defined as:

$$\begin{aligned} R_{h\pm} &= \sqrt{B_{h\pm}^2 + J_{i,j\mp}^2} = \sqrt{B_{h\pm}^2 + J_{\{h\}\mp}^2} \\ \text{with : } J_{\{h\}\pm} &\equiv J_{i,j\pm} = J_i \pm J_j \\ B_{h\pm} &= B_{1h} \pm B_{2h} \end{aligned} \quad (3)$$

and  $h, i, j$  is understood as a cyclic permutation of 1, 2, 3, which is simplified in that work by using  $\{h\}$  as equivalent to the pair of scripts  $i, j$ . Note that  $U(t) \in SU(4)$  because the sum of eigenvalues is zero.

## 2.1 Definitions and notation

Using the original and practical notation used in [44], we set:

$$b_{h\pm} = \frac{B_{h\pm}}{R_{h\pm}}, \quad j_{h\pm} = \frac{J_{\{h\}\mp}}{R_{h\pm}} \in [-1, 1] \quad (4)$$

As is remarked there, subscripts  $-$ ,  $+$  are settled for these physical variables remarking their internal operations. When Bell basis is used to set the evolution operator as privileged basis, it is convenient introduce several changes in the custom notation by using  $-$ ,  $+$  as some lower and upper scripts, which could evolve to  $-1$ ,  $+1$  if they appear in mathematical expressions. Following with the notation settled in that work, capital scripts  $A, B, \dots$  are reserved for  $0, 1$  referred to the computational basis; greek scripts for  $-1, +1$  or  $-$ ,  $+$ ; latin scripts  $h, i, j, k, \dots$  for spatial coordinates  $x, y, z$  or  $1, 2, 3$ ; and  $a, b, c, \dots$  (between parenthesis) as subscripts to denote energy levels  $1, 2, 3, 4$  when they will be required.  $\cdot$  is used sometimes to emphasize number multiplication between terms in scripts and to avoid misunderstandings. Thus, in this notation, the standard Bell states are:

$$\begin{aligned} |\beta_{--}\rangle &\equiv |\beta_{00}\rangle, \quad |\beta_{-+}\rangle \equiv |\beta_{01}\rangle \\ |\beta_{+-}\rangle &\equiv |\beta_{10}\rangle, \quad |\beta_{++}\rangle \equiv |\beta_{11}\rangle \end{aligned} \quad (5)$$

Energies  $\mathcal{E}_h^{(a)}$  correspond to  $E_{h\mu\nu}$  ( $E_{h--}, E_{h-+}, E_{h+-}, E_{h++}$ ) in this notation. They become:

$$\begin{aligned} E_{h\mu\nu} &\equiv \mathcal{E}_h^{(2+\mu+\frac{1+\nu}{2})} = \mu J_h + \nu R_{h-\mu} \\ &= \mu J_h + \nu \sqrt{B_{h-\mu}^2 + J_{\{h\}\mu}^2} \end{aligned} \quad (6)$$

for each direction  $h$ . Their corresponding eigenstates are:

$$|\phi_{\mu\nu}^1\rangle = \sum_{\varepsilon \in \{-, +\}} \frac{\delta_{+\varepsilon} \nu(1+\mu\nu j_{1-\mu}) - \delta_{-\varepsilon} \mu b_{1-\mu}}{\sqrt{2}\sqrt{1+\nu\mu j_{1-\mu}}} |\beta_{\mu\varepsilon}\rangle \quad (7)$$

$$|\phi_{\mu\nu}^2\rangle = \sum_{\varepsilon \in \{-, +\}} \frac{\delta_{+\varepsilon} i\nu(1+\mu\nu j_{2-\mu}) + \delta_{-\varepsilon} \mu\varepsilon b_{2-\mu}}{\sqrt{2}\sqrt{1+\nu\mu j_{2-\mu}}} |\beta_{\mu\cdot\varepsilon\varepsilon}\rangle \quad (8)$$

$$|\phi_{\mu\nu}^3\rangle = \sum_{\varepsilon \in \{-, +\}} \frac{(1+\nu b_{3-\mu}) + \nu\varepsilon j_{3-\mu}}{2\sqrt{1+\nu b_{3-\mu}}} |\beta_{\varepsilon\mu}\rangle \quad (9)$$

where  $\delta_{\alpha\beta}$  is the Kronecker delta. For further applications, note that in this notation, a general bipartite state can be written as in computational basis as in Bell basis as:

$$|\psi\rangle = \sum_{A,B \in \{0,1\}} \mathcal{A}_{AB} |AB\rangle = \sum_{\alpha\beta \in \{-,+\}} \mathcal{B}_{\alpha\beta} |\beta_{\alpha\beta}\rangle \quad (10)$$

## 2.2 Evolution operator solutions

Using the analytical expressions for eigenvalues and eigenvectors, we adopt the following reduced definitions associated with the energy levels [44]:

$$\Delta_{h\mu}^v = \frac{t}{2}(E_{h\mu+} + vE_{h\mu-}) = \begin{cases} \mu J_{ht}, & \text{if } v = + \\ R_{h-\mu}t, & \text{if } v = - \end{cases} \quad (11)$$

and the variables:

$$\begin{aligned} e_{h\alpha}^\beta &= \cos \Delta_{h\alpha}^- + i\beta j_{h-\alpha} \sin \Delta_{h\alpha}^- \\ d_{h\alpha} &= b_{h-\alpha} \sin \Delta_{h\alpha}^- \end{aligned} \quad (12)$$

then the evolution operator in Bell basis:

$$U_h(t) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} U_{h\alpha\beta,\gamma\delta} |\beta_{\alpha\beta}\rangle \langle \beta_{\gamma\delta}| \quad (13)$$

can be written in matrix form as:

$$U_1(t) = \begin{pmatrix} e^{i\Delta_1^+} e_{1-}^* & | & ie^{i\Delta_1^+} d_{1-} & | & 0 & | & 0 \\ ie^{i\Delta_1^+} d_{1-} & | & e^{i\Delta_1^+} e_{1-} & | & 0 & | & 0 \\ \hline 0 & | & 0 & | & e^{i\Delta_1^+} e_{1+}^* & | & -ie^{i\Delta_1^+} d_{1+} \\ 0 & | & 0 & | & -ie^{i\Delta_1^+} d_{1+} & | & e^{i\Delta_1^+} e_{1+} \end{pmatrix} \in \mathbf{S}_1 \quad (14)$$

$$U_2(t) = \begin{pmatrix} e^{i\Delta_2^+} e_{2+}^* & | & 0 & | & 0 & | & -e^{i\Delta_2^+} d_{2+} \\ 0 & | & e^{i\Delta_2^+} e_{2+}^* & | & -e^{i\Delta_2^+} d_{2-} & | & 0 \\ \hline 0 & | & e^{i\Delta_2^+} d_{2-} & | & e^{i\Delta_2^+} e_{2-} & | & 0 \\ e^{i\Delta_2^+} d_{2+} & | & 0 & | & 0 & | & e^{i\Delta_2^+} e_{2+} \end{pmatrix} \in \mathbf{S}_2 \quad (15)$$

$$U_3(t) = \begin{pmatrix} e^{i\Delta_3^+} e_{3-}^* & | & 0 & | & ie^{i\Delta_3^+} d_{3-} & | & 0 \\ 0 & | & e^{i\Delta_3^+} e_{3+}^* & | & 0 & | & ie^{i\Delta_3^+} d_{3+} \\ \hline ie^{i\Delta_3^+} d_{3-} & | & 0 & | & e^{i\Delta_3^+} e_{3-} & | & 0 \\ 0 & | & ie^{i\Delta_3^+} d_{3+} & | & 0 & | & e^{i\Delta_3^+} e_{3+} \end{pmatrix} \in \mathbf{S}_3 \quad (16)$$

As is clarified in [44], to avoid misconceptions, note that scripts  $-$ ,  $+$  used in last definitions and results are related to energy labels more than internal operations (as those previously defined,  $J_{\{h\}_\pm}$ ,  $B_{\{h\}_\mp}$ ).

$U_h(t)$  clearly exhibit a  $2 \times 2$  block structure, which is seminal in current work. As was stated in [44], each block is an element of  $U(2) = U(1) \times SU(2)$  with reciprocal determinants between blocks to conform the  $4 \times 4$  structure of evolution operator in  $SU(4)$ . Then, Hilbert space  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  becomes a direct sum of two subspaces, each one generated by two specific pairs of Bell states depending on  $h$ . As was stated in [44],  $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_1 &= \{A \in SU(4) | A_{\alpha\beta, \gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma} u_{\alpha\beta, \gamma\delta}, (u_{\gamma\alpha, \gamma\beta})_{|\gamma=\pm} \in U(2)\} \\ \mathbf{S}_2 &= \{A \in SU(4) | A_{\alpha\beta, \gamma\delta} = \delta_{\alpha, \gamma\beta} \delta u_{\alpha\beta, \gamma\delta}, (u_{\alpha\beta, \gamma, \alpha\gamma, \beta})_{|\gamma=\pm} \in U(2)\} \\ \mathbf{S}_3 &= \{A \in SU(4) | A_{\alpha\beta, \gamma\delta} = \delta_{\beta\delta} u_{\alpha\beta, \gamma\delta}, (u_{\alpha\gamma, \beta\gamma})_{|\gamma=\pm} \in U(2)\} \end{aligned} \quad (17)$$

are subgroups of  $SU(4)$  containing  $\mathbf{S}_h^* \subset \mathbf{S}_h$ , each set of matrices able to be generated by  $U_h(t)$  in (14). As a result of [44], each subset  $\mathbf{S}_h^*$  characterized by specific physical parameters  $j_{h\pm}, b_{h\pm}$  is again a subgroup of  $\mathbf{S}_h$ . In addition, their finite products generate each  $\mathbf{S}_h$ . Thus, inverses of last operator,  $U_h^\dagger(t)$ , can be obtained as another  $U_h(t')$  for same physical parameters  $j_{h\pm}, b_{h\pm}$  in the system. Last aspect is important for evolution loops because it implies that they can be achieved in only one pulse of Hamiltonian (1).

The last procedure has been settled in the literature as the  $SU(2)$  reduction of the quantum dynamics because it splits the evolution in  $SU(4)$  for the whole physical system into two  $SU(2)$  quantum information subsystem and the Hilbert space of the whole system in the direct sum of two subspaces generated by selectable pairs of Bell states [45].

### 2.3 Block structure

An important aspect in current work is to state the general structure for each  $2 \times 2$  block in  $U(2)$  [44, 45]:

$$s_{hj} = e^{i\Delta_{h\alpha}^+} \begin{pmatrix} e_{h\alpha}^{\beta^*} & -qi^h d_{h\alpha} \\ qi^{*h} d_{h\alpha} & e_{h\alpha}^\beta \end{pmatrix} \quad (18)$$

where  $h$  is the associated spatial coordinate of magnetic field,  $j = 1, 2$  is an ordering label of appearance for each block in the rows of whole evolution matrix, denoted by  $k_j, l_j$ , the ordinal labels for its rows in each matrix (14). Thus, by example,  $k_2 = 3, l_2 = 4$  are the labels for the second block  $s_{21}$ , with  $j = 2$  in  $U_{h=1}(t)$ . Note that we use a conventional nomenclature to state the block position inside  $U_h(t)$  matrices. In addition:  $\alpha = (-1)^{h+j+1}, \beta = (-1)^{j(h+l_j-k_j+1)}, q = \beta(-1)^{h+1}$ . A comprehensive, but empirical formula, can be constructed to set these relations:

$$\begin{aligned} k_j &= 1 + (j-1)(1 + p_{2,3}(h)) \\ l_j &= k_j + \delta_{h,j} \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \text{with : } \delta_{h,j} &= 1 + p_{1,2}(h) + 4(j-2)p_{1,3}(h) \\ p_{m,n}(h) &= \frac{1}{2}(h-m)(h-n) \end{aligned}$$

then, each block is determined by  $h, j$  and their entries are embed in positions  $(k_j, k_j), (k_j, l_j), (l_j, k_j), (l_j, l_j)$ .

Note that  $\det(s_{h,j}) = e^{2i\Delta_{h\alpha}^+}$ . Nevertheless  $s_{h,j} \in U(2)$ , not any element of  $U(2)$  is a  $s_{h,j}$  block. In fact,  $s_{h,j}$  is not necessarily a subgroup of  $U(2)$ , so if two or more blocks with different physical parameters  $j_{h\pm}, b_{h\pm}$  are combined in a product, it has not closure, which open opportunities to extend their coverage in  $U(2)$  with two or more pulses. These aspects around the group properties in the decomposition are included in [44].

## 2.4 Inducing Evolution Loops and Exchange Operations

As was suggested in [44], by combining several adequate interactions, it is possible to get the following basic combined forms for blocks when  $t = T$  (subsequently named diagonalization and antidiagonalization cases respectively for short):

$$s_{h,j} = \pm \mathbf{I}_2 \quad (20)$$

$$s_{h,j} = \pm \sigma_1 \quad \text{or :} \quad s_{h,j} = \pm i \sigma_2 \quad (21)$$

where we need avoid confusion between operators in computational basis and Bell basis. The use of Pauli matrices  $\sigma_1, \sigma_2$  in last expressions state straight forms in the matrix block. The reduction of evolution into each one of these forms are useful in quantum information processing. Then, we can achieve evolution loops [46-49] and exchange operations [39] in  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ , switching or recovering any Bell state into another. Last operations let to obtain several control effects to manipulate Bell states in a programmed way by applying a sequence of magnetic field pulses in adequate directions. Figure 1 presented in [45] summarizes the achievable transitions and loops among them.



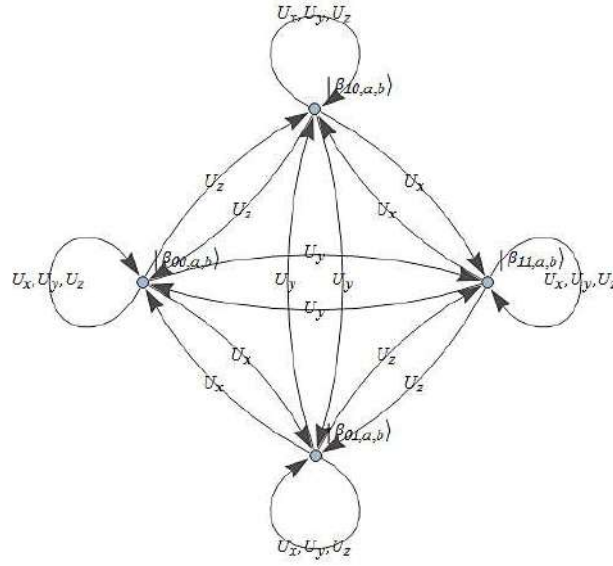


Fig. 1: Graph showing some control transformations between Bell states for qubits  $a$  and  $b$ . They are obtained by Heisenberg-Ising control operations reducible to forms (20) and (21) through magnetic pulses in specific directions [45].

### 3 Representation space of evolution operations

#### 3.1 Two qubit space and restricted space of representations

Space in which a two qubit system (10) evolves is the sphere of seven dimensions  $S^7$  (or  $S^6$  if we neglect the global phase), with  $\mathcal{A}_{AB} \in \mathbf{C}$  and  $A, B \in \{0, 1\}$ . Due to high dimensionality of space, we will use to show the evolution of control operations a reduced space. For this purpose, we define:

$$|\psi\rangle = \sin \alpha \sin \beta \cos \gamma |00\rangle + \sin \alpha \sin \beta \sin \gamma |01\rangle + \sin \alpha \cos \beta |11\rangle + \cos \alpha |10\rangle \quad (22)$$

$$\text{with : } \alpha, \beta, \gamma \in [0, 2\pi)$$

as a subspace of  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  used as representation space (see an extended depiction of this space in [50]). This space has specific properties. If we compare regions ( $\alpha = \pi + \varepsilon_\alpha, \beta, \gamma$ ),  $0 < \varepsilon_\alpha, 0 \leq \beta \leq \pi, 0 \leq \gamma \leq \pi$  and ( $\alpha' = \pi - \varepsilon_\alpha, \beta' = \pi - \beta, \gamma' = \gamma + \pi$ ),

they depict the same quantum states. Similarly,  $(\alpha, \beta = \pi + \varepsilon_\beta, \gamma), 0 \leq \alpha \leq \pi, 0 < \varepsilon_\beta, 0 \leq \gamma \leq \pi$  and  $(\alpha, \beta' = \pi - \varepsilon_\beta, \gamma' = \gamma + \pi)$ , they depict equivalent states. It shows that the representation space can be restricted to  $\mathcal{R} = (\alpha, \beta, \gamma) \in [0, \pi] \times [0, \pi] \times [0, 2\pi)$ , a chart on  $S^3 \subset S^7$ , the three dimensional sphere. This space will be used to illustrate the intermediate evolution in the control operations (20) and (21).

Furthermore, we can note that transformation:  $(\alpha, \beta, \gamma) \rightarrow (\alpha', \beta', \gamma')$ , with:  $0 \leq \alpha < \pi, 0 \leq \beta < \pi, 0 \leq \gamma < \pi$  and  $(\alpha' = \pi - \alpha, \beta' = \pi - \beta, \gamma' = \gamma + \pi)$ , transforms  $|\psi\rangle$  into  $-|\psi\rangle$ , representing the same states. With this, the representation space can be limited to  $\mathcal{R} = \alpha, \beta, \gamma \in [0, \pi]^{\times 3}$ . This structure will be used in the following (except when graphical interpretation could become unclear, in such case the space will be expanded onto neighbor regions). Last property in  $\mathcal{R}$  provides a Möbius-like topology, related to its edges identification, a structure inherited from arbitrariness of quantum state phase (the same structure appears for single qubit states, but it is reduced by using  $\frac{\theta}{2}$  in their component expressions on Bloch sphere).

### 3.2 Entanglement properties of $\mathcal{R}$ and $S^7$ projections on $S^3$

Calculating the Schmidt coefficients  $\lambda_{\pm}$  of (22), we can obtain its concurrence  $\mathcal{C}$ :

$$\mathcal{C}^2 = 4 \sin^2 \alpha \sin^2 \beta (\cos \alpha \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma \cos \beta)^2 \quad (23)$$

$\mathcal{C} = 1$  defines the maximal entanglement states and  $\mathcal{C} = 0$  defines separable states. Clearly the lateral edges of  $\mathcal{R}$ , with  $\alpha, \beta = 0, \pi$  are separable states. But they are not exclusive, another inner surface in  $\mathcal{R}$  contains additional separable states. Figure 2 shows  $\mathcal{R}$  depicting concurrence level surfaces and the four Bell states. The most inner helix surfaces containing Bell states depict the one dimensional regions on which maximal entangled states are located. States (10) in  $S^7$  could be projected on  $S^3$  in several ways. By example if we take:

$$\begin{aligned} \alpha &= \arccos |\mathcal{A}_{10}| \\ \beta &= \arccos \frac{|\mathcal{A}_{11}|}{\sin \alpha} \\ \gamma &= \arccos \frac{|\mathcal{A}_{00}|}{\sin \alpha \sin \beta} \end{aligned} \quad (24)$$

because  $\langle \psi | \psi \rangle = \sum_{A,B \in \{0,1\}} |\mathcal{A}_{AB}|^2 = 1$ , it lets understand  $S^7 = S^3 \times (S^1)^{\times 4}$ , where each  $S^1$  is the fiber bundle corresponding to phases of  $\mathcal{A}_{AB}$ . This sphere is constructed with the intersection points between  $S^7$  and the subspace constructed with direction of Argand representation for each state component in computational basis on Fock space  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  (for the instantaneous state in the evolution). Of course, this projection maps the states only on one eighth of  $\mathcal{R}$ . To realize better the evolution

trajectories in  $\mathcal{R}$ , we will take a projection based on real parts of components instead of magnitudes (a similar structure was recently studied in [51] based on a quaternion construction):

$$\begin{aligned}\alpha &= \arccos \operatorname{Re} \mathcal{A}_{10} \\ \beta &= \arccos \frac{\operatorname{Re} \mathcal{A}_{11}}{\sin \alpha} \\ \gamma &= \arccos \frac{\operatorname{Re} \mathcal{A}_{00}}{\sin \alpha \sin \beta}\end{aligned}\tag{25}$$

this selection sets a maximal  $S^3$  sphere on  $S^7$  defined by the intersection points of each real part of components in computational basis of the state with  $S^7$ .

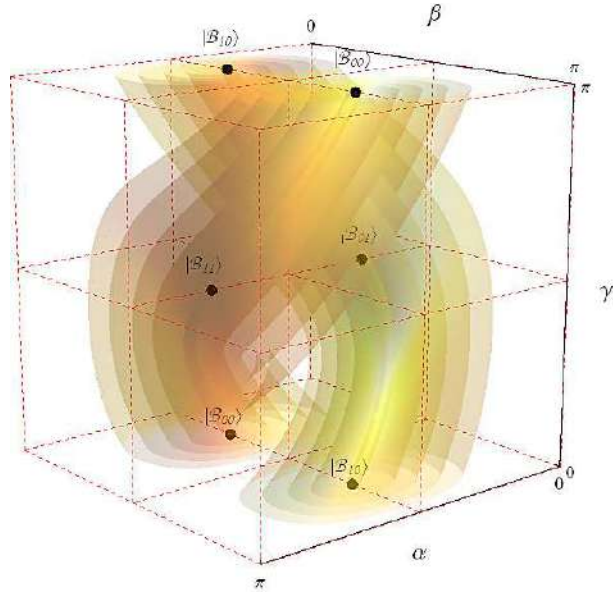


Fig. 2: Representation space  $\mathcal{R}$  for two qubits depicted in the text. Note the localization of Bell states and how the space is twisted relating points between low and upper faces.  $\mathcal{R}$  repeats itself vertically and horizontally. Thus, vertical faces,  $\alpha, \beta = 0, \pi$ , extend the space in lateral directions as reflexions on themselves. Level surfaces for concurrence are shown, inner ones approaching to the maximal entanglement line,  $\mathcal{C} = 1$ , where the Bell states lie. Vertical faces contain separable states where  $\mathcal{C} = 0$ , together with the inner interface splitting the two tube-like maximal coverings for concurrence [50].

## 4 Evolution Loops and Exchange Operations

### 4.1 Generalities

One goal in control of Heisenberg-Ising model is based on Rabi oscillations generated by magnetic fields together with their interaction strengths. Normally, this manipulation involves a tight control of time [52, 53] and alternative types of control, as resonant or on-off control [54-56].

In this section, we will analyze how evolution operators blocks could adopt the forms (20) and (21) to manipulate Bell states through evolution loops and exchange operations. Control effects based on Bell states could be involved in applications as quantum characterization, teleportation, discrimination and reparation. In spite of (1) generalizes particular interactions included in other works, some of the following results could be applied to generalize those situations. This kind of control operations could be applied in several ways, not only as control scheme instead as a correction state procedure. As instance, operation (20), could be useful in quantum state correction (entangled or separable), when there is distortion, in some state  $|\psi\rangle$ , generated by external magnetic fields. Knowledge about evolution loops is useful to restore it under similar field conditions [38, 39]:

$$U_h(t_2)U_h(t_1)|\psi\rangle = |\psi\rangle \quad (26)$$

by measuring accurately distortion time  $t_1$  and restoring time  $t_2$ . Similarly, operation (21) can be used not only to transform Bell states among them, but to reprepare a distorted Bell state into other:

$$U_h(t_2)U_h(t_1)|\beta_{\epsilon\delta}\rangle = |\beta_{\epsilon'\delta'}\rangle \quad (27)$$

### 4.2 Block conditions for diagonalization and antidiagonalization

It has been stated in [44] that evolution matrices (14) with fixed physical parameters fulfills  $U_h(t) \in \mathbf{S}_{h\{\lceil j_{h+\alpha} \rceil\}}^{*\{s_{h+\alpha}\}} \subset U(1) \times SU(2) \times SU(2) \subset SU(4)$ . This decomposition implies that  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  is the direct sum of two subspaces generated each one by specific pairs of Bell states depending on  $h$ . States of each subspace evolve separately of those in another, until a relative phase, under transformations  $s_j \in U(1) \times SU(2)$ . Nevertheless, relative phase introduces additional restrictions to reach (20) and (21) in a coordinated way in both blocks. In the next sections, we first analyze the prescriptions to reach these forms on blocks to integrate them finally, generating Evolution loops and Exchange operations on whole space  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ . Some of the following

results were developed as useful applications in the quantum gates design by unitary factorization [61].

#### 4.2.1 One pulse solutions

In order  $s_{hj}$  fulfills (20) or (21), there are several possibilities. The more basic way is use only one field pulse. An easy and direct analysis shows that  $s_{hj} = (-1)^{m_\alpha} \mathbf{I}_2$  at  $t = T$ , if the following prescriptions are fulfilled:

$$T = \frac{m_\alpha - n_\alpha}{\alpha J_h} \pi > 0 \quad (28)$$

$$B_{h-\alpha}^2 = \left( \frac{J_h n_\alpha}{m_\alpha - n_\alpha} \right)^2 - J_{\{h\}\alpha}^2$$

$$\text{with : } n_\alpha, m_\alpha \in \mathbf{Z}$$

Still, prescriptions (28) should be compatible in both blocks  $\pm\alpha$  for each model (14) to obtain an evolution loop  $U_h = (-1)^{m_\alpha} \mathbf{I}_4$ . It is possible when in addition  $m_\alpha - n_\alpha = n_{-\alpha} - m_{-\alpha}$ . If condition (21) is included in only one block and (20) in another, then  $U_h$  becomes an exchange operation, which lets transform two Bell states among them, while the remaining Bell states become unchanged. Nevertheless, there are not feasible solutions in one pulse for block antidiagonalization (21) compatible with (28) without restrict  $J_h$  and require non finite external fields. Then, a multiple pulses approach is necessary. As we will see, there are solutions in two pulses to obtain a diagonal-antidiagonal combination in the complete evolution matrices.

#### 4.2.2 Two pulses solutions

The block obtained with the product of two blocks (18) corresponding to two consecutive pulses with external fields in the same direction,  $s_{hj}$  followed by  $s'_{hj}$  (clearly  $\alpha, \beta, q$  are the same for both pulses in the same block), becomes:

$$s'_{hj} s_{hj} = e^{i(\Delta'_{h\alpha} + \Delta_{h\alpha})} \times \quad (29)$$

$$\begin{pmatrix} e'_{h\alpha} \beta^* e_{h\alpha} \beta^* - d'_{h\alpha} d_{h\alpha} & -qi^h (e'_{h\alpha} \beta^* d_{h\alpha} + e_{h\alpha} \beta d'_{h\alpha}) \\ qi^{*h} (e'_{h\alpha} \beta d_{h\alpha} + e_{h\alpha} \beta^* d'_{h\alpha}) & e'_{h\alpha} \beta e_{h\alpha} \beta - d'_{h\alpha} d_{h\alpha} \end{pmatrix}$$

which requires to be fitted with each form (20) and (21). The prescription to diagonalize last block into  $\mathbf{I}_2$  becomes (see Appendix A):

$$\begin{aligned}
\Delta_{h\alpha}^- + \text{sign}(J_{\{h\}\alpha} J'_{\{h\}\alpha}) \Delta_{h\alpha}'^- &= n_\alpha \pi \\
\Delta_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}'^+ &= (m_\alpha + n_\alpha) \pi \\
\frac{B_{h-\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}} &= \frac{B'_{h-\alpha}}{J'_{\{h\}\alpha}}
\end{aligned} \tag{30}$$

$$\text{with :} \quad m_\alpha, n_\alpha \in \mathbf{Z}$$

giving exactly:

$$s'_{hj} s_{hj} = (-1)^{m_\alpha} \mathbf{I}_2 \tag{31}$$

Similarly, antidiagonalization of block (29) into forms (21) is obtained in the Appendix A directly from (29). It gives the prescription:

$$\begin{aligned}
\Delta_{h\alpha}^- &= \frac{2n_\alpha + 1}{2} \pi, \Delta_{h\alpha}'^- = \frac{2n'_\alpha + 1}{2} \pi \\
\Delta_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}'^+ &= -\frac{\pi}{2} (h + \text{sign}(q\beta b'_{h-\alpha} j_{h-\alpha}) + \\
&\quad 2(n_\alpha + n'_\alpha - s_\alpha + 1)) \\
&\equiv \frac{\pi}{2} M_{h,q,\alpha,\beta,n_\alpha,n'_\alpha,s_\alpha} \\
\frac{B_{h-\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}} &= -\frac{J'_{\{h\}\alpha}}{B'_{h-\alpha}}
\end{aligned} \tag{32}$$

$$\text{with :} \quad s_\alpha, n_\alpha, n'_\alpha \in \mathbf{Z}$$

becoming in the block form:

$$\begin{aligned}
s'_{hj} s_{hj} &= \begin{pmatrix} 0 & (-1)^{s_\alpha} \\ (-1)^{h+s_\alpha} & 0 \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{s_\alpha} i^{h \bmod 2} \sigma_{1+h \bmod 2}
\end{aligned} \tag{33}$$

noting that block  $s'_{hj} s_{hj}$  reduces to (21). Note that  $s_\alpha$  and  $h$  introduce a phase when associated Bell states are exchanged. In particular,  $s_\alpha$  could not be an integer for all values of  $h$ , because it depends on  $\Delta_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}'^+$ , which is restricted in common by the prescriptions for the another block. Note that (30) and (32) should not be combined for same block. Instead, each condition is used on one different block, one with  $\alpha = -1$  and another with  $\alpha = 1$ , in agreement with (18). Anyway, each set of conditions fits only one block of whole evolution matrix, so compatibility between them should be reviewed.

### 4.3 Evolution loops and exchange operations

#### 4.3.1 Evolution loops in one pulse

As was stated, evolution loops can be reached with only one field pulse using the prescriptions given in (28) combined for two blocks (labeled as  $\pm\alpha$ ):

$$\begin{aligned} T &= \frac{m_\alpha - n_\alpha}{\alpha J_h} \pi = \frac{n_{-\alpha} - m_{-\alpha}}{\alpha J_h} \pi > 0 \\ B_{h-\alpha}^2 &= \left( \frac{J_h n_\alpha}{m_\alpha - n_\alpha} \right)^2 - J_{\{h\}\alpha}^2 > 0 \\ B_{h\alpha}^2 &= \left( \frac{J_h n_{-\alpha}}{m_{-\alpha} - n_{-\alpha}} \right)^2 - J_{\{h\}-\alpha}^2 > 0 \end{aligned} \quad (34)$$

$$\text{with : } n_{\pm\alpha}, m_{\pm\alpha} \in \mathbf{Z}$$

where  $n_{\pm\alpha}, m_{\pm\alpha}$  should be properly selected. If additionally,  $m_{\pm\alpha}$  have the same parity, then  $U_h(t)$  will have the same phase in both blocks. In last case, these prescriptions generate the matrix evolution:

$$U_h(t) = (-1)^{m_\alpha} \mathbf{I}_4 \quad (35)$$

Figure 3 shows three cases of evolution loops represented on  $\mathcal{R}$  for  $|\beta_{00}\rangle$  for  $J_i = 10, J_j = 0.4, J_k = 0.5$ , where  $i, j, k$  is an even permutation of 1, 2, 3 corresponding to  $x, y, z$  respectively. While,  $i$  in  $U_i(t)$  is the direction of magnetic field applied in each figure a, b and c, showing the evolution loop generated by  $U_x, U_y, U_z$  respectively and departing from  $|\beta_{00}\rangle$  in the lower face of  $\mathcal{R}$ . In that representation, reader should be aware that evolution trajectory is only a projection from whole space  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  on  $S^3$ , so trajectory does not necessarily show the complete real states (specially when it crosses other Bell states, as in Figure 3c), except in their evolution edges, which corresponds exactly with the  $|\beta_{00}\rangle$  state. In these representations, continuity was preferred, so trajectory in Figure 3c was extended outside  $\mathcal{R}$  (otherwise, initial lower part of trajectory will appear inverted with respect to  $\beta$  direction from top of  $\mathcal{R}$ , to arrive finally on  $|\beta_{00}\rangle$  in the top face, in agreement with symmetries stated in section 3.1).

#### 4.3.2 Evolution loops in two pulses

Here, we identify six free possible parameters:  $B_{h\pm\alpha}, B'_{h\pm\alpha}, t, t'$ . Nevertheless it is possible to achieve evolution loops (20) with two pulses, these operations are complex and unnecessary in spite of previous results. In addition, the most of them are just combinations of one pulse operations ( $J_{\pm\alpha} = J'_{\pm\alpha}$  cases), so we will omit this analysis.

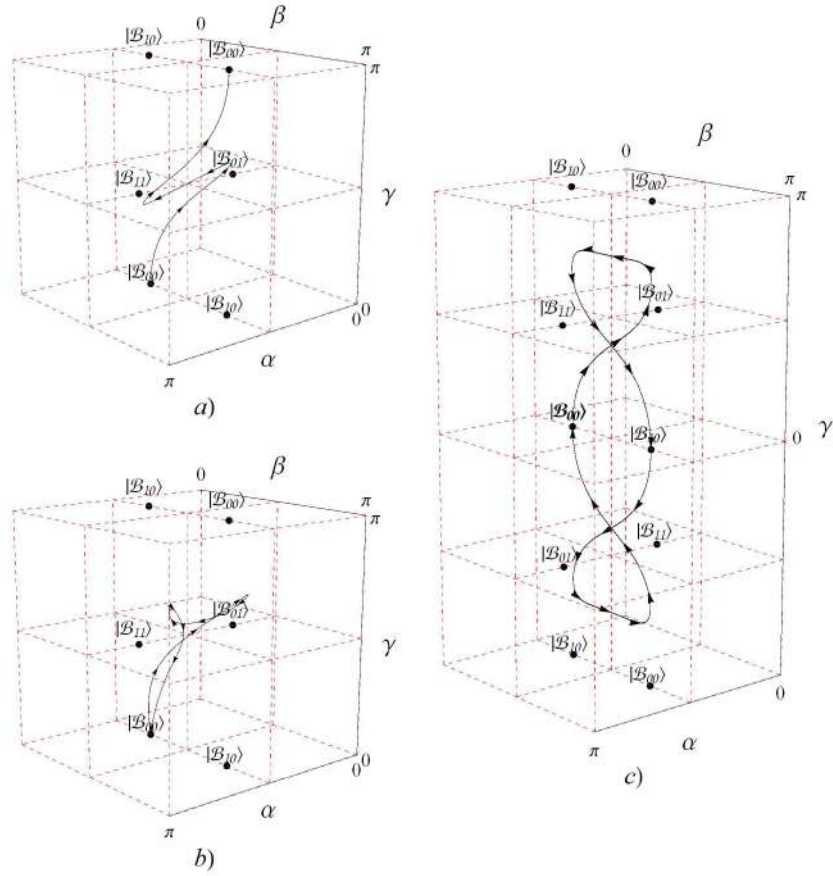


Fig. 3: Representation of evolution loops in  $\mathcal{R}$  for Bell state  $|\beta_{00}\rangle$  under each type of Hamiltonian (1): a)  $U_x$  with  $m_- = 2, n_- = 1, m_+ = 1, n_+ = 2$ ; b)  $U_y$  with  $m_- = 4, n_- = 1, m_+ = 2, n_+ = 5$ ; and  $U_z$  with  $m_- = 4, n_- = 1, m_+ = 2, n_+ = 5$ . All trajectories begin and end in  $|\beta_{00}\rangle$ .

There are some possible useful issues around reversibility, which are convenient remark here. Note that if we split arbitrarily the process of last subsection in two times  $t + t' = T$ , we obtain exactly two inverse operations between them (we restrict our discussion to  $m_\alpha$  even),  $U_h(t')U_h(t) = \mathbf{I}_4 \rightarrow U_h^{-1}(t) = U_h(t')$ . The inverse operation fulfills for both blocks. Otherwise one can be interested in to reverse selectively the evolution in only one block and pursuit different effects in the remaining block. It shows that evolution operations can involve their own inverse operations at least in special and controlled cases. Clearly, in spite of results in [44], the inverse operations are achievable for the same Hamiltonian (1) in a finite sequence of pulses. In



the next subsection, we will focus on two pulses operations to construct exchange operations: diagonal-antidiagonal or antidiagonal-antidiagonal cases.

### 4.3.3 Exchange operations in two pulses

The general block (18) cannot be antidiagonalized while the magnetic field or the strength interaction remain finite ( $|e_{h\alpha}^\beta| = 0$ ). Thus, we appeal to the two pulses approach. Clearly, in spite of (32), the antidiagonal-antidiagonal case, for both blocks in (29), implies an extra condition in comparison with (30), which requires strong restrictions (normally unreachable) on interaction strengths  $J_i$ . Therefore, we will analyze exclusively the diagonal-antidiagonal case, where only two selected Bell states could be exchanged while other two become unchanged, in agreement with Figure 1. Anyway, combining last solutions, the antidiagonal-antidiagonal case can be reached in four pulses.

The diagonal-antidiagonal case requires combine (30) and (32) equations for two blocks in a fix case of (14). One solution can be reached by setting a program based on calculate each one of  $B_{h-\alpha}, B'_{h\pm\alpha}, t, t'$  parameters in terms of  $B_{h\alpha}$  [45]. Here, we set  $\alpha$  script for the diagonal block and  $-\alpha$  for the antidiagonal one. First, it is possible decouple  $B_{h\alpha}$  in the following equation:

$$\left| \frac{B_{h\alpha}}{J_{\{h\}-\alpha}} \right|^2 + 1 = \left( A + B \left| \frac{B_{h\alpha}}{J_{\{h\}-\alpha}} \right| \right)^2 \quad (36)$$

$$\text{with : } A = \frac{(2n_{-\alpha} + 1)J_h}{2(m_{\alpha} + n_{\alpha})|J_{\{h\}-\alpha}|}$$

$$B = \frac{(2n'_{-\alpha} + 1)J'_h}{2(m_{\alpha} + n_{\alpha})|J'_{\{h\}-\alpha}|}$$

Equation (36) it is easily solved, giving the following family of potential solutions:

$$|\xi| = \frac{-AB \pm \sqrt{A^2 + B^2 - 1}}{B^2 - 1} \quad (37)$$

where  $\xi \equiv \frac{B_{h\alpha}}{J_{\{h\}-\alpha}}$ . This equation has solutions while  $A^2 + B^2 \geq 1$  and their positivity had been warranted. That is possible in general for several finite and anisotropic interaction strengths in three directions by selecting values for  $n_{-\alpha}, n'_{-\alpha}, n_{\alpha}, m_{\alpha}$  properly (Figure 4). Solutions are centered on opposites signs for  $A$  and  $B$ , limiting physical cases in spite of (B1) and (B2).

Clearly,  $n_{-\alpha}, n'_{-\alpha} \geq 0$  and  $m_{\alpha} + n_{\alpha}, J_h, J'_h$  determines the selection of  $A, B$ . Figure 4 shows the available regions with solutions for  $|\xi|$  in the plane  $A - B$  for (37).

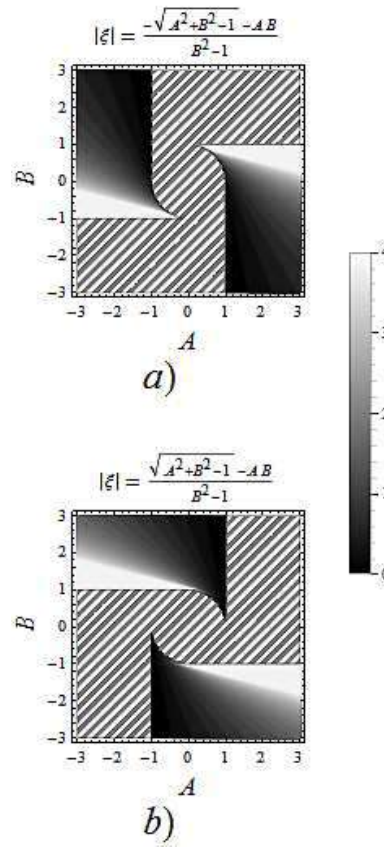


Fig. 4: Solutions (37) in the plane  $A - B$  for a) Negative sign, and b) Positive sign. Shaded regions correspond to  $|\xi|$  values in the gray scale on the right and dashed ones are regions without solutions [45].

Note that, there are solutions in the four quadrants, which lets to find solutions for finite  $J_h, J'_h$  with an adequate selection of  $n_{-\alpha}, n'_{-\alpha}, n_{\alpha}, m_{\alpha}$ . Be aware of dashed regions where (37) have not real solutions. Solutions are expressed in terms of  $\xi$  (see Appendix B):

$$\begin{aligned} \frac{B_{h-\alpha}^2}{J_{\{h\}\alpha}^2} &\equiv \chi^2 & (38) \\ &= \left( \frac{2n_\alpha \sqrt{\xi^2 + 1}}{S_\alpha(2n_{-\alpha} + 1) + P_\alpha S'_\alpha(2n'_{-\alpha} + 1)|\xi|} \right)^2 - 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{with : } P_\alpha &= \text{sign}(J'_{\{h\}\alpha} J_{\{h\}\alpha}) \\ S_\alpha &= \left| \frac{J_{\{h\}\alpha}}{J_{\{h\}-\alpha}} \right|, S'_\alpha = \left| \frac{J'_{\{h\}\alpha}}{J'_{\{h\}-\alpha}} \right| \end{aligned}$$

then, other parameters become:

$$\begin{aligned} \frac{B'_{h\alpha}}{J'_{\{h\}-\alpha}} &= -\xi^{-1}, \frac{B'_{h-\alpha}}{J'_{\{h\}\alpha}} = \chi & (39) \\ \frac{|J_{\{h\}-\alpha}|t}{(2n_{-\alpha} + 1)} &= \frac{|J'_{\{h\}-\alpha}|t'}{(2n'_{-\alpha} + 1)|\xi|} = \frac{\pi}{2\sqrt{\xi^2 + 1}} \end{aligned}$$

In addition, to fit the phase of antidiagonal elements in (29), the selection of parameters involved should fulfill:

$$\begin{aligned} 2(m_\alpha + n_\alpha) &= M_{h,q,-\alpha,\beta,n_\alpha,n'_\alpha,s_\alpha} = \\ &= -(h + \text{sign}(q\beta b'_{h\alpha} j_{h\alpha})) + 2(n_{-\alpha} + n'_{-\alpha} - s_{-\alpha} + 1) & (40) \end{aligned}$$

then,  $m_\alpha + n_\alpha$  fixes  $s_\alpha$  value in (33). Clearly, our analysis has been preserving the possibility that those strengths could change during each pulse (a few common, but not impossible situation as function of experimental array and technology). Nevertheless, it is not a decisive factor to achieve all depicted control effects.

Figure 5 shows the effects of evolution in an exchange operation on Bell states under Hamiltonian (1), by applying prescriptions (37-40). In the case showed,  $J_x = 2, J_y = 0.4, J_z = 0.6$  and  $h = 1$ . The first block has been selected as antidiagonal ( $j = 1, \alpha, \beta, q = -1$  in (18) and (29)) and  $n_\alpha = 0, n'_\alpha = 0, m_{-\alpha} = 2, n_{-\alpha} = -4$  have been chosen. Last parameters, together with the interaction strengths determine Rabi frequencies and magnetic fields involved in the process (until two figures:  $t = 1.77, t' = 7.65, B_{1-} = 1.73, B_{1+} = 0.86, B'_{1-} = 1.73, B'_{1+} = -0.05$ ), which are reflected on each trajectory in  $\mathcal{R}$ . In agreement with Figure 1, this selection lets a transformation between  $|\beta_{00}\rangle$  and  $|\beta_{01}\rangle$  states. Figure 5a and 5b show these trajectories projected in  $\mathcal{R}$  when last states are exchanged. While,  $|\beta_{10}\rangle$  and  $|\beta_{11}\rangle$  are simultaneously preserved under same operation (Figure 5c and 5d). In these cases, the trajectories leave the original states, curiously going to projections on  $|\beta_{10}\rangle$  and  $|\beta_{01}\rangle$  respectively, to finally comeback into the original ones. Due to  $s_\alpha = 10, h = 1$ , the states  $|\beta_{10}\rangle$  and  $|\beta_{11}\rangle$  do not exhibit phase change.

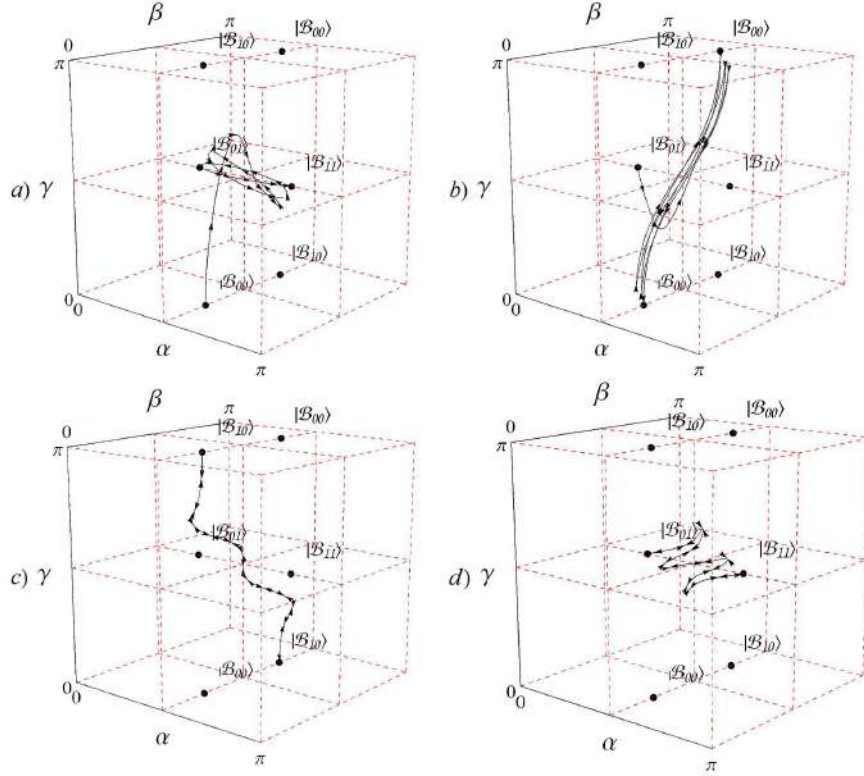


Fig. 5: Evolution for the exchange operation  $U_x$  with the first block as anti-diagonal and the second as diagonal in (14). a) and b) states  $|\beta_{00}\rangle$  and  $|\beta_{01}\rangle$ , respectively, exchanging mutually after a cycle of two pulses constructed with prescriptions (37-40) in a trajectory in  $\mathcal{R}$ , developing controlled Rabi oscillations; c) and d) states  $|\beta_{10}\rangle$  and  $|\beta_{11}\rangle$  evolving on themselves with the same exchange operation.

#### 4.4 Remarks and extensions in control approaches

Separability of  $U_h(t) \in \mathbf{S}_h^* \left\{ \begin{matrix} s_{h=\alpha} \\ |j_{h=\alpha}| \end{matrix} \right\}$  in two weakly correlated  $U(1) \times SU(2)$  subgroups, open possibilities for other control schemes. Optimal control for two level quantum systems has been well-developed by [58] in terms of energy cost and by [59] in terms of minimal time for a general Hamiltonian, but fully compatible with (1) presented here (when it is written in a non local basis and in terms of the reducible variables introduced in (4) and (6)). These control procedures are applicable for each block in the current Hamiltonian while its unitary phase  $e^{\pm iJ_h t}$  could be managed in their respective context. Thus, some conditions should be fulfilled to decompose

completely the control problem in  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  with evolution operators in  $SU(4)$  in two completely separable problems, each one on a two level Hilbert space  $\mathcal{H}$  under  $SU(2)$  evolution operators.

The first one is associated with the opposite signs in exponents of block unitary factors. The condition to convert the relative phase between both blocks into a global phase (which means, the relative phase in both subspaces generated by the direct sum decomposition for this system) impose an additional restriction on interval  $T$  in which control should be achieved:  $J_h T = n\pi, n \in \mathbf{Z}$ . Last aspect is generated because it is not possible set an unique rotating frame for the whole system. Clearly, last condition on  $T$  limits the optimal solutions obtained in [58] for  $SU(2)$ . Bang-bang based control in [59] has the same limitations to state a minimal interval in which a general population transfer in  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  can be achieved. In our procedure, the same restriction is present through equations (34) and (B1) for one pulse and two pulses approaches respectively, but they were fulfilled instead of optimal energy or minimal interval conditions. A second limitation, which could be handled in some cases, is the time concordance in the separated effects on each block. For optimal control, in agreement with [58], the minimum cost is ordered inversely with respect of time, thus, at least a quasi-optimal solution can be obtained easily. Minimal time control solutions in [59] is a more sophisticated control, which cannot fit easily the optimal time for both blocks simultaneously.

In other terms, we should realize those prescriptions in optimized control as in [59] depending in each case on initial state. Instead, control introduced in last sections is not optimal, but it states an universal recovering for bipartite qubits in terms of Evolution loops or population inversion for selected subspaces in  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$ . Thus, several approaches pursuit different pretensions. Nevertheless, extension of these valued control schemes, [58] and [59], remains open in the current reducible approach based on non local basis.

## 5 Generalized Diagonal and Antidiagonal Operations and Natural Quantum Gates Generated

In the previous analysis of exchange operations, evolution matrix has becoming in  $T = t + t'$ , as one of the following in the next set (or with alternative signs in the exchange block):

$$U_1(T) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix} \quad (41)$$

$$U_2(T) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (42)$$

$$U_3(T) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (43)$$

which are diagonal-antidiagonal forms achievable with that procedure and prescriptions (37-40). Note that similar formulas (with variations in block phases) could appear in other cases. Note that, when it happens, the projection (25) could fail to reflect the evolution effects in those operations, so projections like (24) could be more adequate as representations on  $\mathcal{R}$ .

Nevertheless that main objectives in current work are evolution loops and exchange operations generated by (1), at this point is convenient set some extensions. General forms generated by these operations (including phase factors) will be discussed in the following subsection as an extended proposal because they combine previous operations with local or semi-global phase gates.

In general terms, evolution matrices (14) have the possibility to adopt  $P$ -unitary matrices forms, which recently have been reported to achieve factorization of quantum gates [60, 57]. This scheme is achievable by the current interaction precisely generalizing some forms into controlled gates, as those in Evolution loops and Exchange operations. Together, these forms can be adapted in the construction of a universal set of quantum gates for the two-qubit processing [61].

### 5.1 Diagonal-Diagonal forms

When each set of equations (30) and (32) are solved, all equations in each set are necessary conditions to make antidiagonal or diagonal entries equal to zero in terms of (20) and (21), respectively. Weakening the unitary global phase condition for  $U_h$  in one pulse diagonal case, we obtain for time  $T$ , the following diagonal forms in each block ( $D_1$ ):

$$\begin{aligned} s_{h,j}^{D_1} &= e^{i\alpha J_h T} (-1)^{n\alpha} \mathbf{I}_2 \\ &\equiv e^{i\alpha J_h T} \mathcal{S}_{h,j}^{D_1} \mathbf{I}_2 \end{aligned} \quad (44)$$

with the following restrictions (for  $\alpha = \pm 1$  corresponding to each block):

$$B_{h-\alpha}^2 = \left(\frac{n_\alpha \pi}{T}\right)^2 - J_{\{h\}\alpha}^2 \quad (45)$$

instead of (20), where  $n_\alpha \in \mathbf{Z}$  and  $T$  are free parameters. This operation is not precisely an evolution loop because it does not assign a global phase to all states, instead, it induces a semi-global phase in the subspace generated by their associated Bell states.

These procedures let to obtain more general diagonal forms for  $U_h$  than previously obtained, with the structure:

$$U_1(T) \equiv \mathcal{D}_1^\phi = \begin{pmatrix} S_{11}e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S_{11}e^{i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{12}e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{12}e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (46)$$

$$U_2(T) \equiv \mathcal{D}_2^\phi = \begin{pmatrix} S_{21}e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S_{22}e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{22}e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{21}e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (47)$$

$$U_3(T) \equiv \mathcal{D}_3^\phi = \begin{pmatrix} S_{31}e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S_{32}e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{31}e^{i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{32}e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (48)$$

where  $S_{hj}$  are  $\pm 1$  independently, depending only on parameters  $n_{\pm\alpha}$  selected. These structures were introduced in [44] because they clearly form an abelian group in  $\mathbf{S}_h$ .

## 5.2 Diagonal-Antidiagonal forms

For two pulses diagonal-antidiagonal case, note that (30) and (32) are the more general solutions to obtain exchange operations (37-40). First and third equations in (30) are still general conditions to adjust the block on a diagonal form. Second equation was used only to get a non-zero real entry, so we do not use more here. For the remaining antidiagonal block, (32) are no more the general prescriptions because they are specifically constructed to obtain non zero entries only real or imaginary. Instead, (32), are the general rules. Resuming, for two pulses, both general prescriptions give the following general diagonal ( $D_2$ ) and antidiagonal ( $A_2$ ) combined blocks respectively (see Appendix C):

$$\begin{aligned}
s_{hj}^{D_2} &= e^{-i\alpha(J_h t + J_h' t')} (-1)^{n-\alpha} \mathbf{I}_2 \\
&\equiv e^{-i\alpha(J_h t + J_h' t')} \mathcal{S}_{h,j}^{D_2} \mathbf{I}_2
\end{aligned} \tag{49}$$

$$\begin{aligned}
s_{hj}^{A_2} &= e^{i\alpha(J_h t + J_h' t')} q_{h,j} i^h \text{sign}(\cos \Delta_{h\alpha}' \sin \Delta_{h\alpha}^- b_{h-\alpha}) \cdot \\
&\quad \cdot \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\varphi_{h\alpha}} \\ (-1)^h e^{i\varphi_{h\alpha}} & 0 \end{pmatrix} \\
&\equiv i e^{-i\alpha(J_h t + J_h' t')} \mathcal{S}_{h,j}^{A_2} \cdot \\
&\quad \cdot \left( \sigma_1 \sin\left(\varphi_{h\alpha} - \frac{\pi h}{2}\right) + \sigma_2 \cos\left(\varphi_{h\alpha} - \frac{\pi h}{2}\right) \right)
\end{aligned} \tag{50}$$

where, we are using  $-\alpha$  for the diagonal block and  $\alpha$  for the antidiagonal one. Script in  $q_{h,j}$  should remember that it is related to  $\alpha$  as in (18). Here,  $t$  and  $t'$ , the pulse intervals, are parameters involved in the whole set of restrictions. In this terms, the diagonal-antidiagonal forms in two pulses become now, to exchange  $|\beta_{00}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{01}\rangle$  or  $|\beta_{10}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{11}\rangle$ :

$$\begin{aligned}
U_1(T) &\equiv \mathcal{A}_{1,1}^{\phi, \varphi_{h-}} = \\
&= \begin{pmatrix} 0 & iS_{11} e^{i(\phi + \varphi_{h-})} & 0 & 0 \\ iS_{11} e^{i(\phi - \varphi_{h-})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{12} e^{-i\phi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{12} e^{-i\phi} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{51}$$

$$\begin{aligned}
U_1(T) &\equiv \mathcal{A}_{1,2}^{\phi, \varphi_{h+}} = \\
&= \begin{pmatrix} S_{11} e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & S_{11} e^{i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & iS_{12} e^{-i(\phi + \varphi_{h+})} \\ 0 & 0 & iS_{12} e^{-i(\phi - \varphi_{h+})} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{52}$$

to exchange  $|\beta_{00}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{11}\rangle$  or  $|\beta_{01}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{10}\rangle$ :



$$\begin{aligned}
U_2(T) &\equiv \mathcal{A}_{2,1}^{\phi, \varphi_{h+}} = \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -S_{21}e^{i(\phi+\varphi_{h+})} \\ 0 & S_{22}e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & S_{22}e^{-i\phi} & 0 \\ S_{21}e^{i(\phi-\varphi_{h+})} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (53)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_2(T) &\equiv \mathcal{A}_{2,2}^{\phi, \varphi_{h-}} = \\
&= \begin{pmatrix} S_{21}e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -S_{22}e^{-i(\phi+\varphi_{h-})} & 0 \\ 0 & S_{22}e^{-i(\phi-\varphi_{h-})} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{21}e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (54)
\end{aligned}$$

to exchange  $|\beta_{00}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{10}\rangle$  or  $|\beta_{01}\rangle \longleftrightarrow |\beta_{11}\rangle$ :

$$\begin{aligned}
U_3(T) &\equiv \mathcal{A}_{3,1}^{\phi, \varphi_{h-}} = \\
&= \begin{pmatrix} 0 & 0 & iS_{31}e^{i(\phi+\varphi_{h-})} & 0 \\ 0 & S_{32}e^{-i\phi} & 0 & 0 \\ iS_{31}e^{i(\phi-\varphi_{h-})} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{32}e^{-i\phi} \end{pmatrix} \quad (55)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_3(T) &\equiv \mathcal{A}_{3,2}^{\phi, \varphi_{h+}} = \\
&= \begin{pmatrix} S_{31}e^{i\phi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & iS_{32}e^{-i(\phi+\varphi_{h+})} \\ 0 & 0 & S_{31}e^{i\phi} & 0 \\ 0 & iS_{32}e^{-i(\phi-\varphi_{h+})} & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (56)
\end{aligned}$$

where  $T = t + t'$  and second superscript,  $j$ , in  $\mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\alpha}}$  denotes the antidiagonal block. An important property is that the set including  $\mathcal{D}_h^\phi$  and  $\mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\alpha}}$ , with  $\varphi_{h\alpha}, h, j$  fixed, forms an abelian group because  $\mathcal{A}_{h,j}^{\phi', \varphi_{h\alpha}} \mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\alpha}} = \mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\alpha}} \mathcal{A}_{h,j}^{\phi', \varphi_{h\alpha}} = \mathcal{D}_h^{\phi+\phi'}$ . Note that if  $\varphi_{h\pm}$  are  $\frac{\pi}{2}$  and  $\phi = n\pi, n \in \mathbf{Z}$  we recover forms analyzed in the previous section. All them,  $\mathcal{D}_h^\phi, \mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\pm}}$  act on Bell states to recover or exchange them periodically. For other states, these operations insert programmed phases in their different non local components. All these generalized operations could play similar roles that those quantum controlled gates acting on the computational basis, but realizing that they act on non local resources.

In the following, we will analyze only the cases with  $\phi = 0, |\varphi_{h\pm}| = \frac{\pi}{2}$  and will set signs  $S_{hj}$  to have +1 in the first row of each block as in (41-43), similarly as in the standard algorithm in terms of  $C^1NOT_2$  gate.

### 5.3 Equivalence with computational gates

Diagonal-antidiagonal matrices as (41-43) or  $\mathcal{A}_{h,j}^{0,\pm\frac{\pi}{2}}$  remember  $C^aNOT_b$  gates, but applied to scripts of Bell states  $|\beta_{\alpha\beta}\rangle$  instead of those of computational basis  $|\alpha\beta\rangle$  (by extending momentarily our notation under the equivalence:  $0 \leftrightarrow -, 1 \leftrightarrow +$ ). In fact, if we realize that  $\mathcal{A}_{1,2}^{0,\frac{\pi}{2}}$  is almost  $C^1NOT_2 = C^1X_2$  gate (understood as its straight form to Bell basis) except for the sign changed in the entry  $\mathcal{A}_{1,2}^{0,\frac{\pi}{2}}_{++,+-}$ , then a brief analysis shows concisely:

$$\mathcal{A}_{1,1}^{0,\frac{\pi}{2}} = X_1 C^1(iY_2) X_1 \quad (57)$$

$$\mathcal{A}_{1,2}^{0,\frac{\pi}{2}} = C^1(iY_2) \quad (58)$$

$$\mathcal{A}_{2,1}^{0,\frac{\pi}{2}} = X_1 C^{1\oplus 2}(iX_1 X_2) X_1 \quad (59)$$

$$\mathcal{A}_{2,2}^{0,\frac{\pi}{2}} = C^{1\oplus 2}(iX_1 X_2) \quad (60)$$

$$\mathcal{A}_{3,1}^{0,\frac{\pi}{2}} = X_2 C^2(iY_1) X_2 \quad (61)$$

$$\mathcal{A}_{3,2}^{0,\frac{\pi}{2}} = C^2(iY_1) \quad (62)$$

where  $X, Y, Z$  are Pauli matrices forms.  $C^{1\oplus 2}(G)$  is partially a classical controlled gate  $G$ , where control  $1 \oplus 2$  means  $A \oplus B$  (using the equivalence with computational scripts mentioned before) or  $\frac{\alpha+1}{2} \oplus \frac{\beta+1}{2}$  (notation for greek scripts in this work), depending on form of  $|\beta_{AB}\rangle = |\beta_{\alpha\beta}\rangle$ , the scripts of state on which gate is acting. We should remember that all these equalities are only based on matrix form, they are not the standard gates in computational basis. Anyway, this sets of operations give some alternative gates to those used with computational basis in the traditional circuit model of quantum computation. An example is the substitution of quantum gates involved in the traditional Teleportation algorithm by  $C^1(iY_2)$  [62].

As a final analysis, due to the operation  $(\mathcal{H}_1 \otimes \mathbf{I}_2)(C^1 X_2)$  transforms computational basis into Bell basis (here,  $\mathcal{H}_a$  is the Hadamard gate applied on channel  $a$ ), last operations in computational basis could be expressed as  $(C^1 X_2)(\mathcal{H}_1 \otimes \mathbf{I}_2)(\mathcal{A}_{h,j}^{\phi, \varphi_{h\alpha}})(\mathcal{H}_1 \otimes \mathbf{I}_2)(C^1 X_2) \equiv \mathcal{A}_{h,j}^{C^{\phi, \varphi_{h\alpha}}}$  and similarly for  $\mathcal{D}_h^\phi$  ( $C$  superscript denotes that gate is written in the computational basis representation). For  $h = 1, 2$ , expressions for  $\mathcal{A}_{h,j}^{C^{0,\frac{\pi}{2}}}$  show that they transform computational basis states into states with an uniform probability distribution in that basis (with different phases inserted). For  $h = 3$ , this states are still exchange operators between some elements of computational basis ( $|00\rangle \leftrightarrow |11\rangle, |01\rangle \leftrightarrow |10\rangle$ ). For  $\mathcal{D}_h^\phi$  (defined similarly as a computational basis representation) and  $h = 3$ , we get an operation, which introduces symmetrical phases between groups of their elements exactly as in the Bell basis representation. Nevertheless, for  $h = 1, 2$ , we get an operation, which generates

combinations between basis elements weighted by  $\sin \phi, \cos \phi$  (rotation of bipartite qubits as a whole).

## 6 Entanglement dynamics

### 6.1 Evolution of Bell states entanglement

Some special features of entanglement control should be remarked moreover that control operations analyzed in this work. A direct calculation shows that concurrence of states evolved from Bell states,  $|\beta_{\mu\nu}\rangle$ , under  $U_h(t)$  in (14) becomes:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{\mu\nu}^h &= 1 - 4j_{h-f_{\mu\nu}^h}^2 b_{h-f_{\mu\nu}^h}^2 \sin^4 \Delta_{h-f_{\mu\nu}^h}^- \quad (63) \\ f_{\mu\nu}^h &= \begin{cases} \mu, & h=1 \\ \mu\nu, & h=2 \\ \nu, & h=3 \end{cases} \end{aligned}$$

exhibiting a simple behavior depending only on one Rabi frequency, in contrast with evolution of other states, particularly separable ones. Last feature is inherited from separation of  $\mathcal{H}^{\otimes 2}$  in the direct sum of two subspaces generated by pairs of Bell states. This property is consistent with the isotropic case reported in [38, 39] and with (34) and (37-40). But it implies a more general feature because not for all physical parameters in the current interaction, evolved Bell states comeback in each period to their original states. Instead, they comeback into other maximal entangled states, denoting a natural correspondence between maximal entanglement with the current Heisenberg-Ising model. In addition, we note that there are not possible prescriptions with finite constant magnetic fields to develop a maximal entangled evolution path (more than obvious  $j_{h-f_{\mu\nu}^h} = 0$  or  $b_{h-f_{\mu\nu}^h} = 0$ ).

In another perspective, intermediate stages of evolution for initially Bell states does not always become separable. Only if  $j_{h-f_{\mu\nu}^h}^2 b_{h-f_{\mu\nu}^h}^2 = 1/4$ , then  $\mathcal{C}_{\mu\nu}^h$  reaches its minimum value. It means, when  $|B_{h-f_{\mu\nu}^h}| = |J_{\{h\}f_{\mu\nu}^h}|$ , the perfect tuning between field and strength interaction.

### 6.2 Control of maximal entanglement

As in [61], the presence of parasitic magnetic fields could affect the stability of maximal entanglement. Thus, if qubits are currently exposed to magnetic fields  $B_{1h}, B_{2h}$  respectively, maximal entangled states have oscillations with frequencies  $\omega_- = R_{h-}, \omega_+ = R_{h+}$ , by pairs, in agreement with (3) and (63). In that situation, a

homogeneous magnetic field,  $B_{h0}$ , can be added to tune the oscillation frequency of entanglement of all maximal entangled states by requiring:  $n_+R'_{h-} = n_-R'_{h+}$  (where  $n_+, n_- \in \mathbf{Z}^+$ ). Magnetic field  $B_{h0}$  becomes:

$$B_{h0} = \frac{1}{2}(-B_{h+} \pm n_+ \sqrt{R_{h-}^2 - J_{\{h\}_+}^2}) \quad (64)$$

Other possible desired effect could be to maximize the oscillation amplitude for concurrence to assure that there are periodical intermediate separable states. Again, an additional homogeneous field  $B_{h0}$  is sufficient to reach this effect for those of Bell states associated in (63) with  $B_{h+}$  for each value of  $h$ . We need to get a new effective field  $|B'_{h+}| = |J_{\{h\}_-}|$ , it implies:

$$B_{h0} = \frac{1}{2}(-B_{h+} \pm |J_{\{h\}_-}|) \quad (65)$$

Nevertheless, for Bell states associated with  $B_{h-}$  in (63), selective fields on each qubit  $i = 1, 2$ ,  $B'_{ih} = B_{ih} + \delta B_{ih}$ , should be added, in such way that they fulfill:

$$\delta B_{1h} - \delta B_{2h} = -B_{h-} \pm |J_{\{h\}_+}| \quad (66)$$

Finally, under these control operations, it is possible nullify  $B_{h-}$  or  $B_{h+}$  to set invariant some Bell states (as in [45] for isotropic Heisenberg-Ising interaction). In these cases, some of eigenvalues (7) become Bell states.

## 7 Conclusions

Research on physical systems on which quantum technology could be set up is growing continuously, in particular that related to quantum computation, quantum information processing or quantum cryptography. Nevertheless that optics has been partially a dominant arena to last developments, matter has been shown several benefits in terms of quantum storage and complex information processing, allowing new computational tasks, which are impossible with conventional information technology or quantum optics exclusively. Such quantum stuff requires a system of several qubits and the main matter based technology for those purposes is magnetic. Thus, spin-based quantum computing has been developed in several experimental implementations: superconducting integrated systems, superconducting flux qubits, straight nuclear magnetic resonance and quantum dots. All of them exploit Heisenberg-Ising interaction with different approaches [63], together with control on quantum states and entanglement control in particular.

Several issues has been solved in technological applications around of stability and decoherence to set stable isolated qubits as those here studied in parallel with their control of quantum properties. Control of time and magnetic fields are actually very well-developed. [64] reports experimental data about magnetic control parameters required for these systems in related problems to those presented here. Control is settled around of  $t \sim 10^{-9} - 10^{-6}s$  for time control under fields near  $B \approx 1 - 10T$

operating on regions with sizes around of  $r \approx 5nm$ . All of them are values completely achievable in the contemporary control physics. Nevertheless, in the current time, deep control of physical parameters in quantum magnetic systems is still limited, so research of Heisenberg-Ising model in a comprehensive way, including several freedom degrees as manipulable (in particular Heisenberg-Ising interaction strengths) opens future opportunities to explode all their computable possibilities. Thus, in agreement with [63], still a programmable artificial spin network should be constructed, based on bipartite qubits behavior knowledge and its full control.

In this sense, current work develops some of this basic knowledge with models including additional freedom degrees. Due to basic form of evolution in (14) have a semi-direct product structure in terms of group theory when it is expressed in a non local basis [44], it reveals a new kind of quantum resources to be used in parallel, by example, the use of each independent block as a separate channel being processed in parallel with its partner. Gates constructed under this model state elementary physical operations to reproduce a planned evolution in terms of a grammar based on Bell states, which can be scaled to simulate complex computational problems based on these quantum resources. In addition, as it has been shown here, those operations could be constructed as controlled operations as the Exchange operations, whose prescriptions have been obtained here. Also, Evolution loops state procedures to maintain this quantum resources periodically available when external fields are present, in the terms discussed in the last section.

Also, Evolution loops achieved exactly as  $\mathbf{I}_4$  and Exchange operations achieved with block forms (41) are useful by themselves in discrimination and quantum state correction [61]. Moreover, by combining these operations (14) in different directions, we can increase the possibilities of entanglement control as was stated in Figure 1 in terms of basic results in section 4. Creation of universal procedures to reproduce arbitrary gates is open with the current procedures in terms of elements identified as controlled operations (57). Still, optimal control could be developed because the reducible structure in terms of Bell states. Thus, more structured or alternative control procedures as those in [59] for  $SU(2)$  could be implemented, taking care about the existing correlation between blocks.

Gates to reproduce well-known procedures in circuit-gate quantum computation (as teleportation, quantum Fourier transform, etc.) should be adapted each time as function of quantum system being used in the implementation. Current model is an approach, which unifies magnetic systems to reproduce those gates in terms of discussion in section 5 and possible extensions as those being considered in [57].

Future work, to exploit Heisenberg-Ising model presented here, could be addressed on the analysis under finite temperature based on matrix density evolution as is required to consider realistic decoherence effects in the current development. In addition, error correction analysis is necessary in our procedures, based on experimental limitations (control on time and magnetic field, knowledge and control of interaction strengths, etc.). In our approach, an improvement should be generated through alternative continuous pulses (by example  $B(t) = B_0 + B_p \sin(\omega t)$ , instead of piecewise pulses as those used here. Piecewise pulses are easy to manage

theoretically, but they are experimentally few practical because their discontinuity introduces associated resonant effects.

Nuclear magnetic resonance, Quantum dots and electrons in silicon lattices have been the most successful systems carrying out quantum algorithms based on their coherence and stability [64]. These systems could explore two aspects presented theoretically here, the first is to state non local basis as a natural language because it appears more natural in the interactions involved (despite, of course, their own difficulties to avoid state decoherence, which, nevertheless, can be addressed with the same procedures stated here). In addition, translation of classical gates in circuit-gate model into alternative gates as those presented in this work based on non local states as basic resources, nevertheless that they could do not appear sufficiently clear in terms of human classical bit manipulation.

## Acknowledgements

I gratefully acknowledge the support from Escuela de Ciencias e Ingeniería of Tecnológico de Monterrey to develop the current research work.

## APPENDIX A: Diagonalization and Antidiagonalization Solutions

To diagonalize or antidiagonalize the two pulse generic block (29), some general conditions should be fulfilled. In terms of definitions (4), (12) and noting that  $|e_{h\alpha}^\beta|^2 + |d_{h\alpha}|^2 = 1$ , we obtain for the diagonal form (20):

$$\begin{aligned} j_{h-\alpha} \tan \Delta_{h\alpha}^- + j'_{h-\alpha} \tan \Delta'_{h\alpha}^- &= 0 \\ \text{sign}(b_{h-\alpha} b'_{h-\alpha} \sin \Delta_{h\alpha}^- \sin \Delta'_{h\alpha}^- \cos \Delta_{h\alpha}^- \cos \Delta'_{h\alpha}^-) &= -1 \\ |e_{h\alpha}^\beta| |d'_{h\alpha}| &= |e'_{h\alpha}^\beta| |d_{h\alpha}| \rightarrow |e_{h\alpha}^\beta| = |e'_{h\alpha}^\beta|, |d'_{h\alpha}| = |d_{h\alpha}| \end{aligned} \quad (\text{A1})$$

obtained directly by analyzing arguments and magnitudes of their entries. Similarly for the antidiagonal form (21):

$$\begin{aligned} j_{h-\alpha} \tan \Delta_{h\alpha}^- + j'_{h-\alpha} \tan \Delta'_{h\alpha}^- &= 0 \\ \text{sign}(b_{h-\alpha} b'_{h-\alpha} \sin \Delta_{h\alpha}^- \sin \Delta'_{h\alpha}^- \cos \Delta_{h\alpha}^- \cos \Delta'_{h\alpha}^-) &= 1 \\ |e_{h\alpha}^\beta| |e'_{h\alpha}^\beta| &= |d_{h\alpha}| |d'_{h\alpha}| \rightarrow |e_{h\alpha}^\beta| = |d'_{h\alpha}|, |e'_{h\alpha}^\beta| = |d_{h\alpha}| \end{aligned} \quad (\text{A2})$$

The first requirement in (A1) and (A2) is the same in both cases; the second equation in each set only adjust signs for the necessary combination between  $b_{h-\alpha}$ ,  $b'_{h-\alpha}$ ; finally, third expressions are equivalents to:

$$b_{h-\alpha}^2 \sin^2 \Delta_{h\alpha}^- = b'_{h-\alpha}{}^2 \sin^2 \Delta'_{h\alpha}^- \quad (\text{A3})$$

for the diagonalization case and:

$$b_{h-\alpha}^2 \sin^2 \Delta_{h\alpha}^- + b'_{h-\alpha}{}^2 \sin^2 \Delta'_{h\alpha}^- = 1 \quad (\text{A4})$$

for the antidiagonalization one. Combining each one of these expressions with the first equations in (A1) and (A2), we obtain different solutions. With these conditions fulfilled, the block becomes, for diagonalization and antidiagonalization cases, respectively:

$$e^{i(\Delta'_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}^+)} \text{sign}(\cos \Delta_{h\alpha}^- \cos \Delta'_{h\alpha}^-) \mathbf{I} \quad (\text{A5})$$

$$q i^h e^{i(\Delta'_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}^+)} \text{sign}(\cos \Delta_{h\alpha}^- \sin \Delta'_{h\alpha}^- b'_{h-\alpha}) \times \begin{pmatrix} 0 & -e^{i\beta \varphi_{h\alpha}} \\ (-1)^h e^{i\beta \varphi'_{h-\alpha}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A6})$$

with:

$$\begin{aligned} \varphi_{h\alpha} &= \arctan(j_{h-\alpha} \tan \Delta_{h\alpha}^-) \\ \varphi'_{h\alpha} &= \arctan(j'_{h-\alpha} \tan \Delta'_{h\alpha}^-) \end{aligned} \quad (\text{A7})$$

Thus, the more feasible solution for the diagonalization case can be expressed as:

$$\Delta_{h\alpha}^- + \text{sign}(J_{\{h\}\alpha} J'_{\{h\}\alpha}) \Delta'_{h\alpha}^- = n_\alpha \pi \quad (\text{A8})$$

$$\Delta_{h\alpha}^+ + \Delta'_{h\alpha}^+ = (m_\alpha + n_\alpha) \pi$$

$$\frac{B_{h-\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}} = \frac{B'_{h-\alpha}}{J'_{\{h\}\alpha}}$$

$$\text{with : } m_\alpha, n_\alpha \in \mathbf{Z}$$

Similarly, for the antidiagonalization case, the more feasible solution becomes (obtained as a limit case of (A2) or directly from (29)):

$$\begin{aligned}
\Delta_{h\alpha}^- &= \frac{2n_{\alpha}+1}{2}\pi, \Delta_{h\alpha}'^- = \frac{2n'_{\alpha}+1}{2}\pi & (A9) \\
\Delta_{h\alpha}^+ + \Delta_{h\alpha}'^+ &= -\frac{\pi}{2}(h + \text{sign}(q\beta b'_{h-\alpha} j_{h-\alpha}) + \\
&\quad 2(n_{\alpha} + n'_{\alpha} - s_{\alpha} + 1)) \\
&\equiv \frac{\pi}{2} M_{h,q,\alpha,\beta,n_{\alpha},n'_{\alpha},s_{\alpha}} \\
\frac{B_{h-\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}} &= -\frac{J'_{\{h\}\alpha}}{B'_{h-\alpha}} \\
\text{with :} &\quad s_{\alpha}, n_{\alpha}, n'_{\alpha} \in \mathbf{Z}
\end{aligned}$$

## APPENDIX B: Exchange Operations in Two Pulses

Combining (30) and (32), it is possible write:

$$\begin{aligned}
n_{\alpha} &= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{B_{h-\alpha}^2 + J_{\{h\}\alpha}^2}}{\sqrt{B_{h\alpha}^2 + J_{\{h\}-\alpha}^2}} \cdot \\
&\quad (2n_{-\alpha} + 1) + (2n'_{-\alpha} + 1) \frac{J'_{\{h\}\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}} \left| \frac{B_{h\alpha}}{J'_{\{h\}-\alpha}} \right| & (B1)
\end{aligned}$$

departing from first equation in (30). Thus,  $B_{h\alpha}, B_{h-\alpha}$  could be determined (with several possibilities for their signs). With that, the remaining parameters can be easily obtained:

$$\begin{aligned}
B'_{h-\alpha} &= \frac{B_{h-\alpha} J'_{\{h\}\alpha}}{J_{\{h\}\alpha}}, B'_{h\alpha} = -\frac{J_{\{h\}-\alpha} J'_{\{h\}-\alpha}}{B_{h\alpha}} & (B2) \\
t &= \frac{(2n_{-\alpha}+1)\pi}{2\sqrt{B_{h\alpha}^2 + J_{\{h\}-\alpha}^2}}, t' = \frac{(2n'_{-\alpha}+1)\pi}{2\sqrt{B_{h\alpha}^2 + J_{\{h\}-\alpha}^2}} \left| \frac{B_{h\alpha}}{J'_{\{h\}-\alpha}} \right|
\end{aligned}$$

then, these expressions can be manipulated to write them in terms of  $\xi$  parameter.

## APPENDIX C: Generalized exchange Operations in Two Pulses

As was explained in section 5 for the diagonal block,  $-\alpha$ :

$$\begin{aligned}
\Delta_{h-\alpha}^- + \text{sign}(J_{\{h\}-\alpha} (J'_{\{h\}-\alpha})) \Delta_{h-\alpha}'^- &= n_{-\alpha} \pi \\
\frac{B_{h\alpha}}{J_{\{h\}-\alpha}} &= \frac{B'_{h\alpha}}{J'_{\{h\}-\alpha}} & (C1)
\end{aligned}$$



with  $n_{-\alpha} \in \mathbf{Z}$ . This equation is easier to solve than in section 4 because  $t$  and  $t'$  are only parameters, so this pair of equations are not coupled with those of antidiagonal block. For that block,  $\alpha$ :

$$\begin{aligned} j_{h-\alpha} \tan \Delta_{h\alpha}^- + j'_{h-\alpha} \tan \Delta'_{h\alpha}^- &= 0 \\ \text{sign}(b_{h-\alpha} b'_{h-\alpha} \sin \Delta_{h\alpha}^- \sin \Delta'_{h\alpha}^- \cos \Delta_{h\alpha}^- \cos \Delta'_{h\alpha}^-) &= 1 \\ b_{h-\alpha}^2 \sin^2 \Delta_{h\alpha}^- + b'_{h-\alpha}{}^2 \sin^2 \Delta'_{h\alpha}^- &= 1 \end{aligned} \quad (\text{C2})$$

Similarly, this set of equations can be solved by noting that second equation only adjust to the correct combination of signs. Taking again  $t, t'$  as parameters, which lets consider  $b_{h\pm\alpha}$  independent from  $\Delta_{h\alpha}^-, \Delta'_{h\alpha}^-$ , then, by expressing  $b_{h\pm\alpha}$  in terms of  $j_{h\pm\alpha}$ , first and second equations can be solved simultaneously to find  $\Delta_{h\alpha}^-, \Delta'_{h\alpha}^-$  for specific values of  $j_{h\pm\alpha}$ .

## References

1. R. Jozsa and N. Linden, Proc. Royal Soc. A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences **459** (2036), 2011 (2002).
2. R. Jozsa, *Entanglement and quantum computation*, e-print quant-ph/9707034.
3. C. H. Bennett, D. P. DiVincenzo, J. A. Smolin and W. K. Wootters, Phys. Rev. A **54**, 3824 (1996).
4. R. P. Feynman, Int. J. Theor. Phys. **21**, 467 (1982).
5. D. Deutsch, Proc. R. Soc. London, Ser. A **400**, 97 (1985).
6. A. M. Steane, Phys. Rev. Lett **77**, 793 (1996).
7. C. H. Bennett and G. Brassard, Proc. IEEE Intl. Conf. on Comp. **175**, (1984).
8. A. K. Ekert, Phys. Rev. Lett. **67**, 661 (1991).
9. C. H. Bennet and P. DiVincenzo, Nature (London) **404**, 247 (2000).
10. M. A. Nielsen and I. L. Chuang, *Quantum Computation and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000).
11. R. Horodecki, P. Horodecki, M. Horodecki, K. Horodecki. Rev. Mod. Phys. **81** (2), 865 (2007).
12. E. Ising, Z. Phys. **31**, 253 (1925).
13. S.G. Brush, Rev. Mod. Phys. **39**, 883 (1967).
14. M. A. Nielsen, Ph. D. Thesis, University of New Mexico, 1998; see also LANL e-print: quant-ph/0011036.
15. H. M. Wiseman and G. J. Milburn, Phys. Rev. Lett. **70**, 548 (1993).
16. A. C. Doherty, J. Doyle, H. Mabuchi, K. Jacobs, and S. Habib, in Proceedings of the 39th IEEE Conference on Decision and Control, edited by IEEE Control Systems Society (IEEE, New York, 2000).
17. A. C. Doherty, K. Jacobs, and G. Jungman, Phys. Rev. A **63**, 062306 (2001).
18. H. M. Wiseman and G. J. Milburn, Phys. Rev. A **47**, 642 (1993).
19. H. M. Wiseman, Phys. Rev. A **49**, 2133 (1994).
20. J. W. Clark, D. G. Lucarelli, and T. J. Tarn, Int. J. Mod. Phys. B **17**, 5397 (2003).
21. A.F. Terzis and E. Paspalakis, Phys. Lett. A **333**, 438 (2004).
22. Th. Niemeijer. Physica, 36, p. 377, 1967.
23. P. Pfeuty. Ann. Phys., NY, 57, p. 79, 1970.
24. P. Stelmachovic and V. Buzek, Phys. Rev. A **70**, 032313 (2004).

25. J. Novotny, M. Stefañiak, T. Kiss, and I. Jex, *J. Phys. A: Math. Gen.* **38**, 9087 (2005).
26. M. C. Arnesen, S. Bose and V. Vedral, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 017901 (2001).
27. X. Wang, *Phys. Rev. A* **64**, 012313 (2001).
28. N. Khaneja, R. Brockett, and S. J. Glaser, *Phys. Rev. A* **63**, 032308 (2001).
29. P. Recher and D. Loss, in *Proceedings of SPINTRONICS 2001: International Conference on Novel Aspects of Spin-Polarized Transport and Spin Dynamics* (Springer, New York, 2002), Vol. 15, p. 49.
30. D. S. Saraga, B. L. Altshuler, D. Loss, and R. M. Westervelt, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 246803 (2004).
31. F. H. L. Koppens, C. Buizert, K.J. Tielrooij, I. T. Vink, K. C. Nowack, T. Meunier, L. P. Kouwenhoven and L. M. K. Vandersypen, *Nature* **442** (7104), 766 (2006).
32. D. P. DiVincenzo, in *Mesoscopic Electron Transport*, of NATO Advanced Study Institute, Series E: Applied Sciences (Kluwer, Dordrecht, 1997), Vol. 345, p. 657.
33. G.P. Berman, G. D. Doolen, G.V. López, and V. I. Tsifrinovich, *Generalized Quantum Control-Not Gate in Two-Spin Ising System*, quant-ph/9802013v1.
34. X. Wang, *Phys. Lett. A* **281**, 101 (2001).
35. D. D'alessandro, *Introduction to Quantum Control and Dynamics* (Chapman Hall Applied Mathematics Nonlinear Science 2007).
36. A. M. Brañczyk, P. E. M. F. Mendonça, A. Gilchrist, A. C. Doherty and S. D. Bartlett, *Phys. Rev. A* **75**, 012329 (2007).
37. Z. Xi and G. Jin, *Int. J. Quant. Info.* **5**, 857 (2007).
38. F. Delgado, *Rev. Mex. Fis.* **56** (1) 30 (2010).
39. F. Delgado, *Phys. Rev. A* **81**, 042317 (2010).
40. G. L. Kamta and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 107901 (2002).
41. Y. Sun, Y. Chen and H. Chen, *Phys. Rev. A* **68**, 044301 (2003).
42. L. Zhou, H. S. Song, Y. Q. Guo and C. Li, *Phys. Rev. A* **68**, 024301 (2003).
43. D. Gunlycke, V. M. Kendon, V. Vedral and S. Bose, *Phys. Rev. A* **64**, 042302 (2001).
44. F. Delgado, *International Journal of Quantum Information* **13** (7), 15550055 (2015).
45. F. Delgado, *Journal of Physics: Conference Series* **698**, 012024 (2016).
46. B. Mielnik, *J. Math. Phys.* **27**, 2290 (1986).
47. D. J. Fernandez C., *Int. J. Theor. Phys.* **33**, 2037 (1994).
48. F. Delgado and B. Mielnik, *J. Phys. A* **31**, 309 (1997).
49. F. Delgado and B. Mielnik, *Phys. Lett. A* **249**, 359 (1998).
50. D. Bermúdez and F. Delgado, *Journal of Physics: Conference Series* **839**, 012014 (2017).
51. C. R. Wie, *Bloch sphere model for two-qubit pure states*. arXiv:1403.8069 [quant-ph]
52. I. L. Kirilyuk and S. V. Prants, *Control and chaos of atomic Rabi oscillations in a cavity*, Proceedings of 2nd International Conference in Control of Oscillations and Chaos, vol.2, (2000).
53. Q.T. Meng, G.H. Yang, and K.L. Han, *Int. J. Quant. Chem.* **95**, 30 (2003).
54. S. Cruz y Cruz and B. Mielnik, *Rev. Mex. Fis.* **53** (4), 37 (2007).
55. S. Cruz y Cruz and J. Medina, *Simulation of non-resonant quantum protocols for a single qubit*, AIP Conference Proceedings **1287**, 64 (2009).
56. J. Medina, *Acta Universitaria*, **23** (5) 10 (2013).
57. F. Delgado, *Quantum Information and Computation* **17** (9), 0721 (2017).
58. D. D'Alessandro and M. Dahleh, *IEEE Transactions on Automatic Control* **46** (6) 866 (2001).
59. U. Boscain and P. Mason, *J. Math. Phys.* **47**, 062101 (2006).
60. C. K. Li, R. Jones and X. Yin, *Int. J. Quant. Inf.* **11** (1), 1350015 (2013).
61. F. Delgado, *Journal of Physics: Conference Series* **839**, 012014 (2017).
62. F. Delgado, *Journal of Physics: Conference Series* **624**, 012006 (2015).
63. M. W. Johnson, M. H. S. Amin, S. Gildert, T. Lanting, F. Hamze, N. Dickson, R. Harris, A. J. Berkley, J. Johansson, P. Bunyk, E. M. Chapple, C. Enderud, J. P. Hilton, K. Karimi, E. Ladizinsky, N. Ladizinsky, T. Oh, I. Perminov, C. Rich, M. C. Thom, E. Tolkacheva, C. J. S. Truncik, S. Uchaikin, J. Wang, B. Wilson and G. Rose. *Nature* **473**, 194 (2011).
64. Ch. Kloeffel and D. Loss. *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **4**, 51 (2013).



# Photonic properties of two-dimensional dielectric crystals made of uniaxial polaritonic materials. A finite difference time domain treatment

Hernán Alejandro Gómez-Urrea and Miguel Eduardo Mora-Ramos

## Abstract

The properties of light propagation in two-dimensional photonic crystals made of phonon-polariton materials are investigated in detail using the finite difference time domain method of solving the Maxwell equations for electromagnetic waves. Polaritonic materials such as wurtzite III-V nitride semiconductors are considered to be the constituents of dielectric cores embedded in air matrix, with different cross-section geometries. The properties of the photonic frequency structure are investigated through the calculation of the dispersion relations and the features of the photonic band gaps are particularly discussed.

En este trabajo se investigan las propiedades de la propagación de la luz en cristales fotónicos bidimensionales constituidos por barras dieléctricas de materiales polaritónicos empleando el método de diferencias finitas en el dominio del tiempo para resolver numéricamente las ecuaciones de Maxwell para las ondas electromagnéticas. Los materiales que se consideran son los nitruros semiconductores de tipo III-V con estructura uniaxial de wurzita y las barras dieléctricas se suponen con diferentes formas geométricas en su sección transversal. Se reportan las relaciones de dispersión fotónicas y se discuten las características de las brechas de propagación prohibidas en esta clase de sistemas.

## 1 Introduction

In recent decades, a new branch of research has emerged, based on the possibility of controlling the optical properties of materials; for example, the fabrication of systems that respond to the incidence of electromagnetic radiation with signals restricted only to a certain frequency range or to allow its propagation only along a specific spatial direction. Another desirable property may be to confine one or sev-

---

(HAGU) Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Medellín, Colombia. (MEMR) Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, CP 62209 Cuernavaca, Morelos, Mexico e-mail: memora@uaem.mx

eral particular modes within a certain spatial region; thus allowing the amplification of the optical intensity.

Many systems of this kind have been made possible thanks to the design and manufacture of photonic crystals (PHCs). These are structures created from the periodic spatial arrangement of materials with different refractive indices that behave like a crystal for light waves, in analogy to the phenomenon that takes place in solids for the electron wave functions. In this way, they present constructive interference in well-defined propagation directions, leading to Bragg diffraction. With sufficient contrast in the refractive index of the components, the propagation of the electromagnetic wave within a characteristic range of wavelengths can be avoided. The basic aspects related to a PHC were initially presented in the articles of Yablonovitch [1] and John [2] in 1987. In these works it is established that the PHCs have the property to control and inhibit the spontaneous emission, which significantly impacts the physics of semiconductor lasers [1]. On the other hand, it is also suggested that the presence of some disorder in dielectric super-networks can bring with it the phenomenon of the location of light.

In any case, from those reports it began to be clear that the periodic variations in the dielectric properties can affect the nature of the propagation of light in a system. This occurs in such a way that the PHCs show, for electromagnetic radiation, the same kind of distribution of allowed and forbidden frequencies typical of the energy spectrum of the electron in its movement in a crystal lattice [2].

It is worth noting that the scientific literature contains some background on the formulation of PHCs. In this sense it is possible to mention a review published in 1972 by R. A. Silin [3] that focuses on artificial dielectric systems formed by periodic arrangements of conductive and insulating elements. The peculiarities of the optical propagation in them are explained in terms of the presence of surfaces of equal frequency. In addition, it is proposed that artificial dielectric structures composed of parallel layers can convert a divergent beam into a convergent beam, that total reflection can appear for small incident angles and partial reflection for larger incident angles, and that the increase in the angle of incidence can result in a decrease in the angle of refraction. Another element discussed in this article is the possibility of the appearance of birefringence effects, depending precisely on the angle of incidence on the system. The work also refers to theoretical and experimental results dating from 1947, made by the well-known Soviet physicist L.I. Mandel'shtam, which could be considered as the oldest antecedent for the studies of the mentioned phenomena.

As earlier mentioned, an essential feature of PHCs is the existence of photonic gaps or band gap widths (PBGs). This implies that the propagation through the PHC of signals with frequencies within one or more particular ranges is forbidden. On the other hand, once a PBG is formed it is possible to introduce some kind of defect in the crystal so that it catches or locates the light inside it. Furthermore, the introduction of a line of defects can allow the guidance of light from one location to another, so that an electromagnetic signal whose frequency is within the forbidden region can propagate through this kind of waveguide. The light remains confined, and it is

possible to direct it along such kind of guidance precisely because its frequency can not propagate in the crystal [2].

Extending the study of the PHCs to the two-dimensional (PHC2D) and three-dimensional (PHC3D) cases (in the latter the structure is periodic along its three axes) brings improvements and more possibilities in the handling of the optical properties of the structure. To see this, consider the example of a one-dimensional PHC (PHC1D); a Bragg reflector. In this case two layers of different materials arranged in a regular manner are considered. When there is a normal incidence of light on such a structure, it will undergo reflections and transmissions at each interface between the individual layers. By choosing the width of said layers equal to a quarter of the wavelength, all the different contributions to the transmitted beam will interfere destructively. Then, most of the light will be reflected backwards.

If the structure consists of an infinite number of periods, there will be no transmission of light and you will have a perfect reflector. Besides, due to the one-dimensional nature of these reflectors, only the light that normally hits their surface can be reflected, the light incident parallel to the layers will not suffer any dispersion and therefore does not experience reflection.

A solution to this problem can be achieved, for example, if a PHC2D is considered. In this system the structure is periodic along two of its axes and homogeneous throughout the third. Accordingly, the PHC2D can be considered as a periodic distribution in the plane of a structure with dielectric contrast that has a certain geometry. When these structures are carefully designed, they can reflect the light coming from all directions, with the condition that it propagates in the plane of periodicity of the crystal.

Apart from the aforementioned, there are a lot of possible applications for the PHCs. The research has produced new developments. For example, PHC1D are used as thin films in optical applications. PHC2D fibers are produced by several companies to transmit and control light at frequencies in which conventional optical fibers fail to function [4].

Since the pioneering works of Yablonovitch and John [1, 2], multiple theoretical studies have been carried out in order to find a suitable candidate for the PHC3D. Almost simultaneously, vectorial solution methods were implemented for light propagation equations based on plane wave expansion [5-7]. It is worth saying that the first experimental works only verified a pseudo-PBG, not a true PBG [8]. Shortly afterwards it was possible to identify a structure that had a complete PBG. The theoretical research of Ho *et al.* [7] confirmed the existence of the first PHC3D for the dielectric system with diamond-like symmetry.

At the same time and in a similar way, band structures for two-dimensional systems were calculated by Plihal *et al.* [9]. However McCall *et al.* [10] were the first to calculate and measure the microwave propagation in a two-dimensional array with cylinders of a high dielectric constant. With the confirmation of dielectric structures that can be achieved in two and three dimensions, attention shifted to the applications and search for new designs and architectures.

In recent years, the study has been extended to media in which the permittivity of the material depends on the frequency, in particular, those that exhibit phonon-

polariton type excitations. As in the PHCs composed of non-dispersive media, in the case of the PHCs based on polaritonic materials there is a range of frequencies in which the propagation of the electromagnetic wave is prohibited; the PBG, but unlike the PHCs in non-dispersive media, this PBG is not only related to translational symmetry but is also a characteristic of the functional dependence of the dielectric function with frequency.

The incorporation of polaritonic materials in a PHC introduces a wide range of interesting physical phenomena. At the resonance frequency between the transverse optical phonons  $\omega_T$  and the transverse electromagnetic wave, the phonon-photon coupling induces a radical change in the optical response of the material. For small wave vectors, a simple model (without considering phonon scattering) leads to the dielectric function [11]

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty \left( \frac{\omega^2 - \omega_L^2}{\omega^2 - \omega_T^2} \right), \quad (1)$$

where  $\varepsilon_\infty$  is the dielectric response at high frequency, and  $\omega_L$  is related to  $\varepsilon_\infty$  through the well-known Lyddane-Sachs-Teller relationship (LST)  $\omega_T \sqrt{\frac{\varepsilon_0}{\varepsilon_\infty}}$ . From this it can be seen that the potential of polaritonic materials is in the opportunity to study regimens of  $\varepsilon(\omega)$  positive and negative using the same structure and simply varying the frequency of the light below  $\omega_T$  or inside the polaritonic frequency region between  $\omega_T$  and  $\omega_L$ .

Various aspects of polaritonic PHCs (PHCPs) have been studied using distinct theoretical tools [12-16]. The work of Sigalas *et al.* [12, 13] focuses on determining the PBGs in a PHC2D composed of polar materials, by means of the analysis of the transmission coefficient as a function of the frequency, using the transfer matrix method. The first article published about the calculation of the band structure in a PHCP was published by Zhang *et al.* [14], followed by the work of Kuzmiak, Maradudin and McGurn [15]. In both studies, the authors identified the presence of flat bands, almost without dispersion, below the transversal phonon frequency  $\omega_T$ . In a later work by Huang *et al.* [17] this behavior was verified and, in addition, a quantitative description of the origin of the flat bands could be provided by relating them to the resonance modes located in a layer with a high refractive index.

The well-known method of plane wave expansion has not proved convenient for the calculation of the photonic structure of the PHCs based on materials with polaritonic dispersion in the dielectric constant. Among the different schemes that have been used in order to analyze the structures that involve such kind of dispersive media a large number are associated with a complicated mathematical formulation for the solution of the electromagnetic differential equations, which leads to difficulties in handling structures with the most complex geometries.

A formalism that allows handling these difficulties in a better way is that of finite differences in the domain of time (known by the acronym FDTD). This is one of the most widely used approaches - as far as numerical methods are concerned - for the solution of electromagnetic problems. It provides a simple way for the discretization of Maxwell's equations without complicating the mathematical formulation, and

does not require any specific type of symmetry in the structure being modeled. In addition, the solution is obtained in the time domain, so that the behavior of the structure can be extracted over a wide range of frequencies.

The first FDTD algorithm was introduced by Yee in 1966 [18]. Since then, this method has suffered many modifications. The improvements and extensions continue to this day [19-21]. With computer costs constantly decreasing, this approach is gaining more and more popularity, leading to the realization of a great amount of research related to it including, of course, the solution of electromagnetic problems. The FDTD scheme offers several advantages when used to model systems such as PHCs. This can handle complex structures as well as integration between different structures. It can also deal with a variety of materials including the case of dispersive media, allowing to generate the response of the photonic structure in a wide range of frequencies with a single simulation.

In the present chapter we make use of the FDTD method to calculate the photonic structure of regular 2D dielectric systems (PHC2Ds) based on polaritonic materials with uniaxial anisotropy in the crystalline lattice.

## 2 The calculation of the photonic dispersion relation

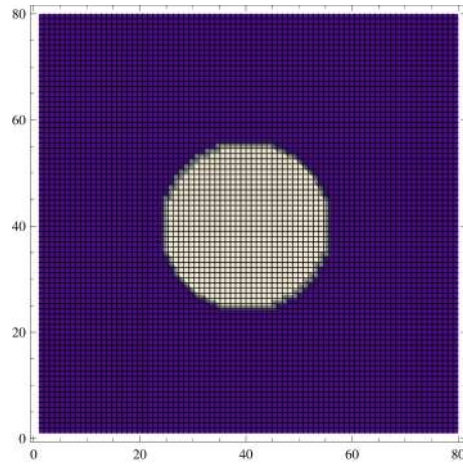
By means of the finite difference time domain (FDTD) method and the auxiliary differential equation (ADE) technique it is possible to calculate the dispersion relations of two-dimensional photonic crystals in ionic media. First, it is necessary to pay attention to the time dependence of the electromagnetic field obtained using the FDTD method. The eigenvalues of the optical structure are obtained by analyzing its temporal response to the initial excitation. Such an excitation is initially launched from a given point of the elementary cell in order to excite the modes (see figure 1) [25-28].

The calculation of the field is carried out inside the elementary cell only. The periodicity of the structure is simulated by imposing periodic boundary conditions. Such conditions give the phase change of the wave vector when it is transferred from one elementary cell to another. After the calculation of the field is complete, the Fourier transform (FFT) is applied to obtain the spectrum response. In accordance, the eigenstates of the crystal correspond to the local maxima of the spectrum since each eigenstate is a resonant frequency of the structure.

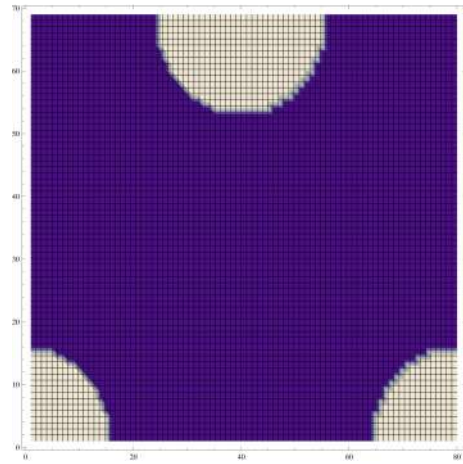
In general, the calculation of the dispersion relation by the FDTD method is performed according to the following procedure:

1. Determine the computation area (see figure 1).
2. Set the periodic conditions. In our case they correspond to Bloch type (see section 2.1).
3. Define the initial excitation. The radiation spectrum should be broad enough to cover the entire range of frequencies investigated (see section 3).
4. Carry out the spectral analysis of the time response of the structure looking for local maxima. The figure 2 shows an example of that response and its associ-





(a) Square unit cell



(b) Triangular unit cell

Fig. 1: Unit cells of two-dimensional photonic crystals: square lattice (a) and triangular lattice (b).

ated spectrum obtained by means of FFT for a specific wave vector in the first Brillouin zone.

5. Repeat steps 2-4 for different values of the wave vector.

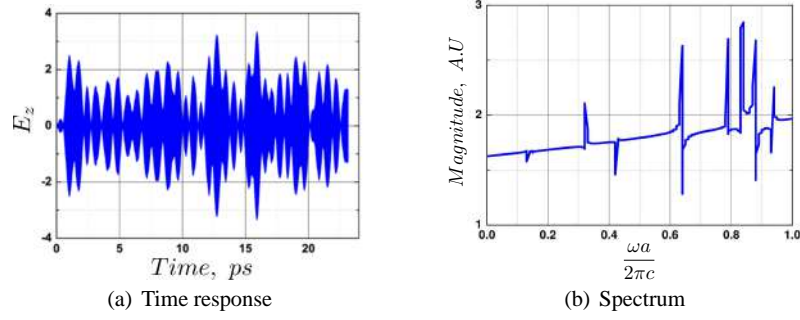


Fig. 2: Time response (a) and its fast Fourier transform spectrum (b).

## 2.1 Periodic boundary conditions

The periodic boundary conditions come directly from Bloch's theorem. They are widely used to analyze the dispersion relations in photonic crystals. Once the unit cell of the crystal is given, the entire crystal structure can be constructed by applying these conditions to it. In the case of two-dimensional photonic crystals the two most common types of lattice geometries are the square lattice and the triangular lattice. The way to express the periodic boundary conditions is the following

$$\Phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}, t) = \Phi(\mathbf{r}, t)e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} \quad (2)$$

where  $\Phi$  is any component of the field ( $\mathbf{E}$  or  $\mathbf{H}$ ),  $\mathbf{a}$  is the period,  $\mathbf{k}$  the wave vector in the first Brillouin zone. Next, we describe how these conditions should be applied for each type of lattice considered.

### 2.1.1 Square lattice

The figure 3-(a) shows the real space picture for the case of the square lattice and the figure 3-(b) the corresponding irreducible Brillouin zone. The vertices of the depicted triangle are the high-symmetry points  $\Gamma$  ( $0, 0$ );  $X$  ( $\pi/a, 0$ ); and  $M$  ( $\pi/a, \pi/a$ ). Consequently, the high symmetry directions are  $\Gamma \rightarrow X$ ,  $X \rightarrow M$ , and  $M \rightarrow \Gamma$ . The boundary defined by this triangle is sufficient to describe the dispersion relation, since any wave vector  $\mathbf{k}$  in its interior can be described as a combination of the wave vectors  $\mathbf{k}$  in the border.

In order to analyze the boundary conditions, two possible polarizations should be taken into account: the transverse electric modes (TE) and the transverse magnetic (TM) modes. In the case of TM modes  $\mathbf{E} = (0, 0, E_z)$  and  $\mathbf{H} = (H_x, H_y, 0)$ , and for them we shall consider (without loss of generality) the non-dispersive case, for which the finite difference field equations are

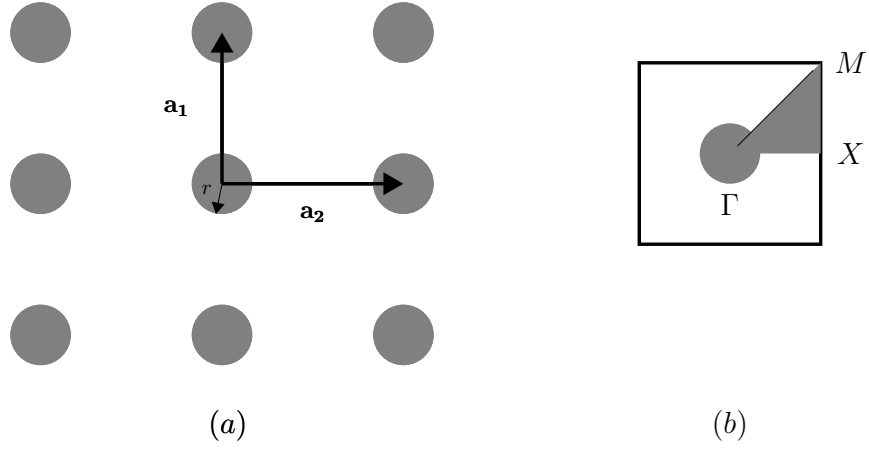


Fig. 3: Real space (a) and reciprocal state (b) for the square lattice.  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  are the unit vectors for the lattice in the real space.

$$H_x^{m,j} = H_x^{m,j} - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta y} (E_z^{m,j+1} - E_z^{m,j}), \quad (3)$$

$$H_y^{m,j} = H_y^{m,j} - \frac{c\Delta t}{\mu\Delta x} (E_z^{m+1,j} - E_z^{m,j}), \quad (4)$$

$$E_z^{m,j} = E_z^{m,j} + \frac{c\Delta t}{\varepsilon\Delta x} (H_y^{m,j} - H_y^{m-1,j}) - \frac{c\Delta t}{\varepsilon\Delta y} (H_x^{m,j} - H_x^{m,j-1}). \quad (5)$$

In the figure 4, the thick lines indicate the whole elementary cell. This cell has been discretized in a system of  $N_x \times N_y$  smaller subcells. The subcell indices run from unity to  $N_x$  (index  $m$ ) and from unity to  $N_y$  (index  $j$ ). According to the system of equations (3)–(5), in the case of the magnetic field the component  $H_x$  has a limit outside the system when  $j = N_y$ , whereas the component  $H_y$  has a limit outside the system when  $m = N_x$ . In the case of the electric field there are two limits outside the system when  $m = 1$  and also when  $j = 1$ . These points that lie outside the elementary cell must be connected with points inside it, according to the Bloch conditions. For a detailed analysis, let us look at the figure 4. There, it can be seen how the point  $A$  -which lies outside the elementary cell- is connected to the point  $A'$ , that locates inside the elementary cell. This assignment is pre-multiplied by the corresponding phase according to Bloch's theorem, in this case  $e^{-ik_x a}$ , where  $k_x$  is the wave vector and  $a$  the lattice constant. This condition corresponds to the magnetic field  $H_x$  when  $j = 0$ , whereby  $H_x^{i,0} = H_x^{i,N_y} e^{-ik_x a}$ . An analogous situation happens with the assignment of the points for the case of  $B \rightarrow B'$ ,  $C \rightarrow C'$  and  $D \rightarrow D'$ , also with the corresponding phases. The case of TE modes is similar to the TM case.

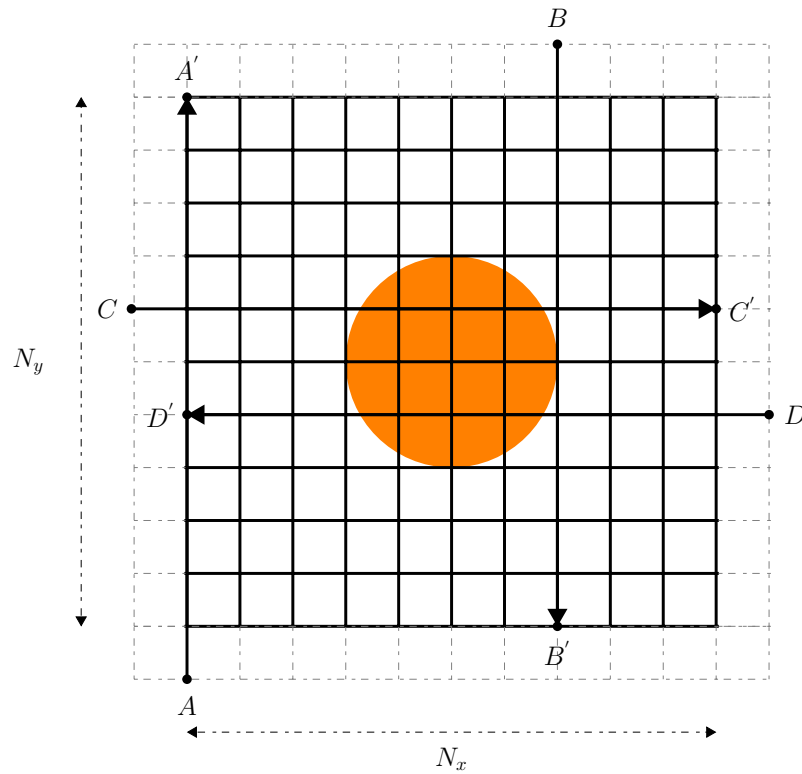


Fig. 4: Periodic boundary conditions for the square lattice.

### 2.1.2 Triangular lattice

In the figure 5-(a) the first Brillouin zone of the triangular lattice is shown, whereas in the figure 5-(b), the shaded triangle represents the irreducible Brillouin zone. The vertices of such triangle are the high-symmetry points  $\Gamma (0,0)$ ;  $M (\pi/a, \pi/ \sqrt{3}a)$ ;  $K (2\pi/3a, 0)$  and, consequently, high symmetry directions are  $\Gamma \rightarrow M$ ,  $M \rightarrow K$ , and  $K \rightarrow \Gamma$ .

The triangular lattice consists of cylinders organized in the form of equilateral triangles of side  $a$ . The rhombus shown in the figure 5-(a) represents the exact unit cell of the triangular lattice. Using this cell in the finite difference scheme implies the use of non-orthogonal meshes, which complicates the method a bit. Explanations of how to implement boundary conditions in this case can be found in [34, 25]. The rectangle (thick line along with the dotted line) shown in the figure 5-(a) contains two unit cells which would result in a degenerate version of the band diagram. Here we make use of the smallest rectangular elementary cell (shown in the figure 5-(a) with the thickest edge) for the calculation of the dispersion relations in the triangu-

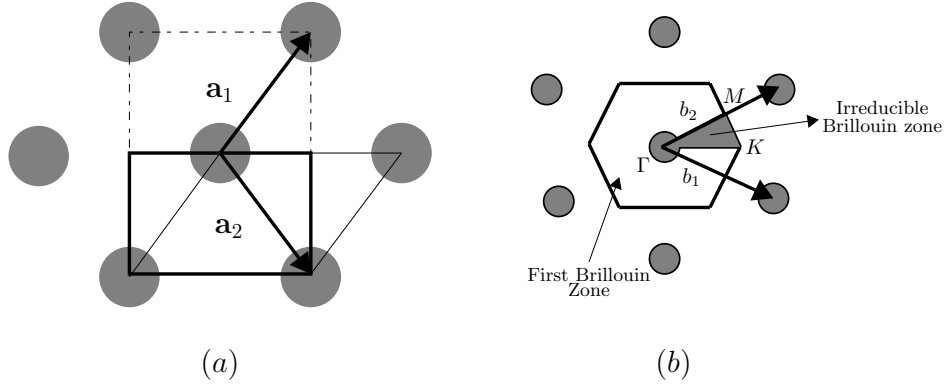


Fig. 5: Real space (a) and reciprocal state (b) for the triangular lattice.  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$  and  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  are the corresponding unit vectors in the real and reciprocal spaces, respectively.

lar lattice [24]. This unit cell is also exactly the unit cell of the triangular lattice, on which the Bloch boundary conditions can be applied, as shown in the figure 6.

The periodic boundary conditions along the  $y$  axis are posed in two stages: In the first, half of the horizontal segment of the rectangle is moved a distance  $a/2$  along the positive  $x$ -axis direction, and a distance  $\sqrt{3}a/2$  along the  $y$ -direction (the point  $A_1$  is moved to the point  $A'_1$ ). In the second stage, the second half of the lower segment is shifted  $a/2$  in the negative direction of the  $x$ -axis and  $\sqrt{3}a/2$  along the direction of the  $y$ -axis (the point  $A_2$  is moved to the point  $A'_2$ ). The above corresponds to  $A'_1 = A_1 e^{-ia(k_x + \sqrt{3}k_y)/2}$  and  $A'_2 = A_2 e^{-ia(-k_x + \sqrt{3}k_y)/2}$ , respectively. For the periodic boundary conditions along the  $x$ -axis, the left side of the small rectangle is moved by  $a$  (the point  $B$  is moved to the point  $B' = B e^{-iak_x}$ ). Besides, the spatial steps  $\Delta x$  and  $\Delta y$  are calculated in such a way that  $\Delta y$  is slightly smaller than  $\Delta x$ . That is, we take  $\Delta x = a/N_x$ ;  $\Delta y = N_y / \lceil N_y / \Delta x \rceil$ , where  $N_x$  and  $N_y$  are the number of points in the mesh.  $\lceil \cdot \rceil$  is the "ceil" function (approximates the value within  $\lceil \cdot \rceil$  to the nearest integer).

### 3 The initial excitation

For the calculation of the dispersion relations, an initial excitation must be placed at some point in the system (in our case, the unit cell). This initial excitation can have different shapes, the simplest being those of a delta type pulse and a modulated Gaussian high frequency signal. The delta type pulse is introduced in a single moment of time while the modulated signal is maintained throughout the calculation. In the case of delta type pulse a typical mathematical description is as follows:

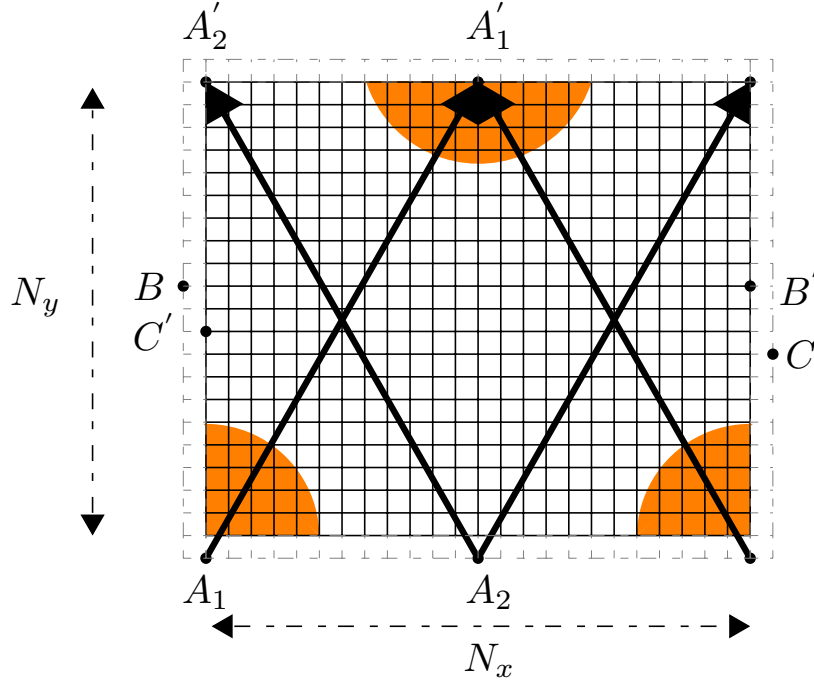


Fig. 6: Periodic boundary conditions for the triangular lattice.

$$\delta(t - t_0, x - x_0, y - y_0, z - z_0) = 1. \quad (6)$$

The spectrum of a delta type pulse is very broad, this helps the structure to respond to any frequency. After the pulse is entered, the excitation is turned off. However, due to the periodic boundary conditions, the radiation in the system is maintained for an infinitely long time in the structure (of course, in the case of zero absorption).

As mentioned, another case of initial excitation (which is the one that will be used in this work) is the modulated Gaussian high frequency excitation. Its expression reads:

$$E_z(x, y, z) = Ae^{-\frac{(t-t_0)^2}{w^2}} \sin(\omega t), \quad (7)$$

where  $t_0$  provides the delay time of the Gaussian envelope function,  $w$  is the pulse width, and  $\omega$  is the frequency of the wave. This excitation is carried throughout the calculation process unlike the delta type pulse. The spectrum of the Gaussian pulse is not as broad as in the previous case. However, by varying the frequency of the carrier wave, it can be concentrated within a specific spectral range to provide high precision and avoid errors in the analysis of the structure [26].

## 4 The system of interest

Based on the calculation method proposed for finding the dispersion relations in two-dimensional systems, we shall consider photonic structures like those schematically depicted in the figure 7. Two types of 2D photonic lattices are shown: In the figure 7-(a), a photonic crystal with dielectric cylinders organized in a square grid, whereas in figure 7-(b) we have a two-dimensional photonic crystal with its dielectric cylinders arranged in a triangular lattice. In both cases the cylinders are made of polaritonic materials and the background environment is an air matrix.

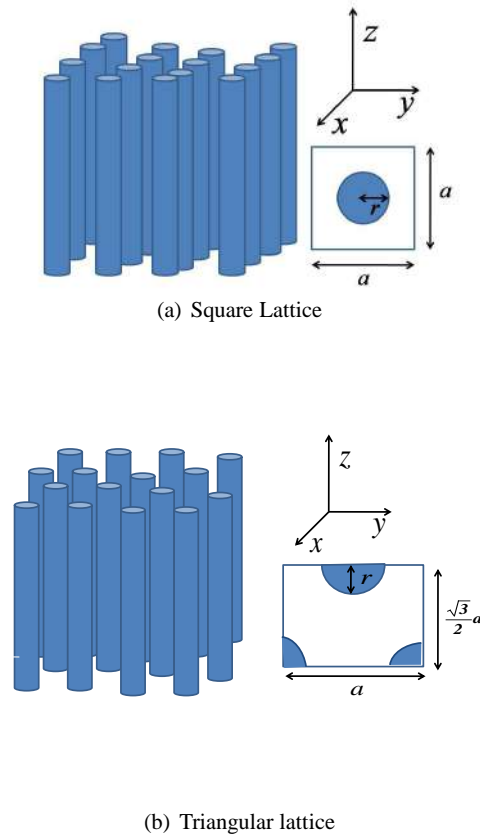


Fig. 7: Two-dimensional photonic crystal and its elementary cell.

With respect to the polaritonic medium, III-V nitrides will be considered in their hexagonal (wurtzite) phase; in particular, the semiconducting GaN, AlN and InN. In this case, due to the anisotropy of the uniaxial material, the polar phonon frequencies and their associated dielectric function become dependent on the spatial direction

in the solid. In 1964, Loudon proposed a model based on macroscopic fields to describe the optical phonons in the uniaxial crystals [31]. In this model the angle between the  $c$ -axis (optical axis) and the phononic wave vector  $\mathbf{q}$  is described by the variable  $\theta$ , and the dielectric constant in this case has different -in principle- components along the directions parallel and perpendicular to the  $c$ -axis,  $\varepsilon_z$  and  $\varepsilon_t$  respectively. In other words, the dielectric tensor is given by

$$\varepsilon(\omega) = \begin{pmatrix} \varepsilon_t(\omega) & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_t(\omega) & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z(\omega) \end{pmatrix},$$

with

$$\varepsilon_t(\omega) = \varepsilon_t^{(\infty)} + \frac{\Delta\varepsilon_t \omega_{t,T}^2}{\omega^2 - \omega_{t,T}^2} \quad (8)$$

$$\varepsilon_z(\omega) = \varepsilon_z^{(\infty)} + \frac{\Delta\varepsilon_z \omega_{z,T}^2}{\omega^2 - \omega_{z,T}^2} \quad (9)$$

where  $\Delta\varepsilon_t = \varepsilon_t^{(0)} - \varepsilon_t^{(\infty)}$ ,  $\Delta\varepsilon_z = \varepsilon_z^{(0)} - \varepsilon_z^{(\infty)}$ .  $\omega_{z,L}$ ,  $\omega_{z,T}$ ,  $\omega_{t,L}$ , and  $\omega_{t,T}$  are the characteristic phonon frequencies of the  $A_1(LO)$ ,  $A_1(TO)$ ,  $E_1(LO)$  and  $E_1(TO)$  modes, respectively, and  $\varepsilon_t^{(\infty)}$ ,  $\varepsilon_z^{(\infty)}$  are the corresponding high-frequency dielectric constants.

Based on this model it is found that there are two types of phonon waves in the crystal: (1) Ordinary waves and (2) extraordinary waves. The ordinary wave is always transverse and polarized in the plane perpendicular to any wave vector  $\mathbf{q}$ . It has  $E_1$  symmetry. In the case of extraordinary waves, there are two types, the first type of wave corresponds to polarized vibrations in the direction  $z$  (parallel to the  $c$ -axis), and the second type corresponds to polarized vibrations in the transversal direction,  $t$ . The  $z$ -polarized mode has  $A_1$  symmetry whilst the  $t$ -polarized mode has  $E_1$  symmetry. When the angle  $\theta = 0$ , a vibration is  $A_1(LO)$  and the other is  $E_1(LO)$ . When  $\theta$  varies between 0 and  $\pi/2$ , these modes gradually become  $A_1(TO)$  and  $E_1(TO)$ , respectively, without having a proper LO or TO character neither a  $A_1$  or  $E_1$  symmetry. For  $\theta \neq 0$ , and  $\pi/2$ , the extraordinary waves are a mixture of modes that are not purely longitudinal (LO) nor purely transversal(TO) [38].

For the calculation of the dispersion relations in the case of ordinary modes we choose the extraordinary axis of the material parallel to the extension of the cylinders ( $z$ -axis). Then Maxwell's equations can be decomposed into equations for the TM modes (electric field parallel to the  $z$ -axis) and TE modes (magnetic field parallel to the  $z$ -axis). The resulting equations are the same as in the isotropic case, except that the dielectric constant for each mode is different [32]. Then,

- In the case of TM modes, the electric field is parallel to the axis of the cylinders (extraordinary axis). In this case we use equation (9) to describe the dielectric constant.



- In the case of TE modes, the electric field is perpendicular to the axis of the cylinders. In consequence, for this polarization we use the equation (8) for the dielectric constant.

For the calculation of the photonic dispersion relations in the polaritonic case related with the extraordinary modes, we propose an empirical approach. It consists of giving different weights to the parallel ( $z$ ) and perpendicular ( $t$ ) polaritonic dielectric contributions, in such a way that the -compound- dielectric function can be expressed as

$$\varepsilon(\omega) = \alpha_z \varepsilon_z(\omega) + \alpha_t \varepsilon_t(\omega), \quad (10)$$

where  $\alpha_z$  and  $\alpha_t$  are dimensionless constants with values in the interval  $(0, 1)$ . The equation (10) is the one used to obtain the auxiliary differential equation in the ADE method.

In the table 1 the characteristic values for the considered materials are shown.

Material	$v_{z,T}$ (THz)	$v_{t,T}$ (THz)	$v_{z,L}$ (THz)	$v_{t,L}$ (THz)	$\varepsilon_t^{(\infty)} = \varepsilon_z^{(\infty)}$
GaN	15.94	16.74	21.99	22.20	5.35
AlN	18.31	20.10	26.67	27.33	4.77
InN	13.42	14.29	17.59	17.80	8.4

Table 1: Characteristic phonon frequencies and dielectric constants used in this work [22]). Here,  $v_{i,j} = \frac{\omega_{i,j}}{2\pi}$ , with  $i = z$  or  $t$ , and  $j = T$  or  $L$ .

## 5 Dispersion relations of uniaxial polaritonic photonic crystals

### 5.1 Ordinary polaritonic modes

The figure 8 shows the dispersion relations for the TM modes in the case of a square lattice of polaritonic cylinders in an air matrix with a filling fraction  $f = \pi r^2/a^2 = 0.24$ ,  $r$  being the radius of the cylinder and  $a = 18\mu m$  is the lattice constant. Three different materials are considered: (a) and (d) AlN, (b) and (e) GaN, (c) and (f) InN. The figures 8(d)-(f) contain a zooming over the characteristic transverse frequency of each material. In this case, the results associated to the coupling of the light and the phonon ordinary modes of the material are presented. According to the description presented in section ??, the dielectric constant in this case is  $\varepsilon_z$ . For the numerical calculation, the unit cell was divided into a  $60 \times 60$  grid ( $N_x = 60$ ,  $N_y = 60$ ), and the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{22}$ . In each of the figures, it is possible to observe the appearance of a forbidden bandwidth

(photonic bandgap) that does not appear in the case of a conventional photonic crystal, and therefore is not related to the translational symmetry of the system. This photonic bandgap is called as *polaritonic* (PBGP, and is located in the frequency range  $\omega_{nzT} < \omega < \omega_{nzL}$ . The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$  represent the characteristic phonon frequencies of the material, normalized to  $a/2\pi c$ . Those PBGP are due to the strong coupling between the transverse electromagnetic incident wave with the optical phonons in the material, which occurs when the energies and the wave vectors of the photons and the phonons of the transverse optical oscillations are almost equal. Under these conditions, the stationary states of the crystal correspond to a mixture of phonons and photons that are called polaritons.

Also, in each of the graphic boxes one may observe two branches of the polaritonic excitation. These branches appear below and above the values  $\omega_{nzT}$  and  $\omega_{nzL}$ , respectively. When the values of  $k$  are large, the excitations of the first branch coincide with the transversal phonons, while those of the second branch behave in a more dispersive way.

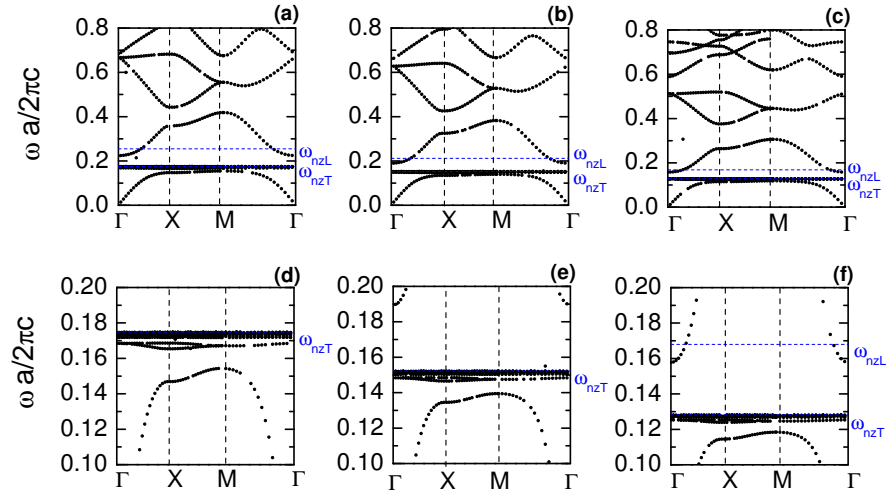


Fig. 8: Dispersion relation of TM modes in two-dimensional photonic crystal made of dielectric polaritonic cylinders in air matrix, with square lattice geometry. The filling fraction is, in this case,  $f = 0.24$ , and the lattice constant is taken as  $a = 18\mu m$  (see figure 7-(a)). (a) and (d) AlN; (b) and (e) GaN; (c) and (f) InN. The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$ , represent the characteristic phonon frequencies of the materials normalized to  $a/2\pi c$ , where  $c$  is the speed of light in vacuum.

The figure 8-d shows the appearance of two absolute photonic band gaps. One locates above the lowest band of the dispersion relation and the other appears below  $\omega_{nzT}$ . In this zone, a great number of bands are present and it can be seen that they become flatter (almost without dispersion) as long as they approach the value of

$\omega_{nzT}$ . The same feature is present in the dispersion relations depicted in boxes 8-(e) and 8-(f).

Besides, in the figures 8-(a) and 8-(b) the reader may observe that around the normalized frequency value of 0.4 -and around 0.3 for figure 8-(c)- a complete photonic band gap opens. These gaps have a width  $\Delta\omega$  equals to 0.01467, 0.02934, and 0.05875 respectively (in units of the normalized frequency).

Another feature that is noticed from boxes (a)-(c) of figure 8 is the penetration of a phononic type mode into the polaritonic gap below  $\omega_{nzL}$ . In this case, near  $\omega_{nzL}$  and inside the polaritonic photonic band gap, the refractive index tends to zero, and therefore the air matrix becomes a material with a higher refractive index. In consequence, the air regions can be treated as defects in a homogeneous polaritonic material, which causes states to appear inside the polaritonic gap near  $k = 0$  cite hu.

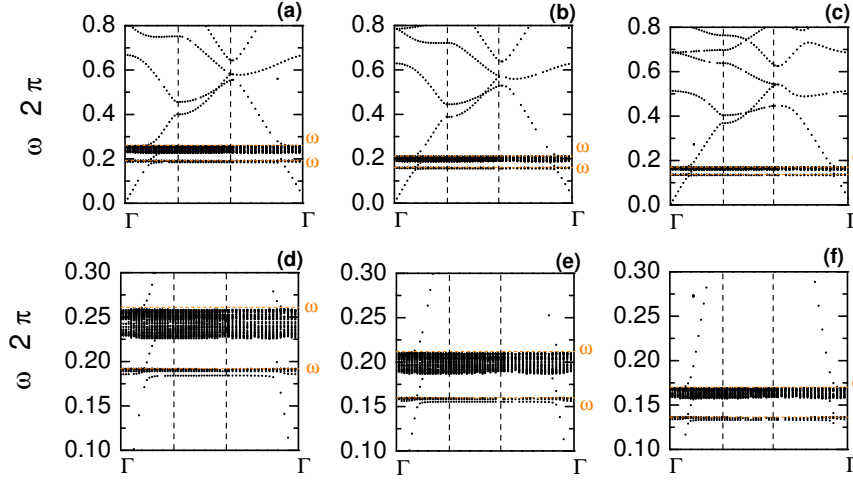


Fig. 9: Dispersion relation of TE modes in two-dimensional photonic crystal made of dielectric polaritonic cylinders in air matrix, with square lattice geometry. The filling fraction is, in this case,  $f = 0.24$ , and the lattice constant is taken as  $a = 18\mu m$  (see figure 7-(a)). (a) and (d) AlN; (b) and (e) GaN; (c) and (f) InN. The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$ , represent the characteristic phonon frequencies of the materials normalized to  $a/2\pi c$ , where  $c$  is the speed of light in vacuum.

In order to continue with the analysis, we have that the figure 9 shows the photonic dispersion relations for the TE modes in the case of a square lattice of polaritonic cylinders in an air matrix, with a filling fraction  $f = 0.24$ , and  $a = 18\mu m$ ; for the same three different materials in the dielectric cores: (a) and (d) AlN, (b) and (e) GaN, (c) and (f) InN. The figures 8(d)-(f) correspond to a zooming around the characteristic transverse frequency of each material. In this case, the ordinary modes of the material are presented and, according to the discussion in section 4, the dielectric constant is, simply,  $\epsilon_r$ . For the numerical calculation the unit cell was

divided into  $60 \times 60$  parts ( $N_x = 60, N_y = 60$ ), and the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{24}$ . When comparing this figure with the figure 8 one can immediately notice that the behavior of the modes is different. In the case of the TE modes, it is observed that in addition to the bands that appear below  $\omega_{mT}$ , a large number of modes appear inside the polaritonic gap. For modes whose frequencies lie below  $\omega_{mT}$  it is possible to see that one of these bands (figures 9-(d), 9-(e) and 9-(f)) presents an almost linear behavior except for certain frequencies near the point  $\Gamma$ . When the values of the wave vector are close to zero, the band is flat, but as it goes along the  $\Gamma \rightarrow X$  direction in the Brillouin zone the band presents a small increment in the frequency value and then continues with a linear behavior until it approaches the  $\Gamma$  point again. This feature will be described in more detail in the section 5.2.

The region  $\omega_{mT} < \omega < \omega_{mL}$  in which the permittivity is negative is usually called the active medium for the surface polaritons. In this case, since  $\epsilon(\omega) < 0$ , a new channel is created in the polaritonic photonic band gap. It supports surface waves and, in this sense, almost flat waves are created. Through analytical reasoning it can be shown that this type of mode is only possible for TE polarization [40].

Another difference that arises when observing the cases of TM and TE dispersion relations for the square lattice comes from the comparison between the figures 8-(a) and 9-(a). In the former, it is observed that around the value 0.4 of the normalized frequency it appears an absolute photonic band gap while for the latter case it does not show up at all. Following Joannopolous [36], this fact can be explained with the aid of the variational theorem and the electric field intensity profiles of the signal: The electric field associated with the mode of lower frequency has a large part of its energy concentrated in the region of higher dielectric constant, whilst the electric field associated with the next state has a nodal plane, in order to remain orthogonal to the first, thus causing that a large part of its energy is concentrated in the region of lower dielectric constant. Therefore, it is associated with a higher frequency than that of the first state. This difference of energies between two consecutive states generates the photonic band gap. The larger the difference in field concentrations of the bands, the greater the probability of finding a gap in the system.

The vector nature of the electromagnetic field and, in particular, its discontinuous boundary conditions at the interface between dielectric materials, is capital to this phenomenon. When moving through a dielectric boundary of a region of high permittivity ( $\epsilon_1$ ) to a low permittivity ( $\epsilon_2$ ); that is,  $\epsilon_2 < \epsilon_1$ , the energy density  $\epsilon|\mathbf{E}|^2$  will decrease discontinuously by  $\epsilon_2/\epsilon_1$  if  $\mathbf{E}$  is parallel to the interface (since  $\mathbf{E}_{\parallel}$  is continuous), and augments by  $\epsilon_1/\epsilon_2$  if  $\mathbf{E}$  is perpendicular to the interface (since  $\epsilon\mathbf{E}_{\perp}$  is continuous). In the TM case,  $\mathbf{E}$  is parallel to all the dielectric interfaces and then a large value of the concentration factor is possible. However, in the TE case, the electric field lines should cross a boundary at the same point, forcing the electric field energy out of the rods and thus avoiding a higher concentration factor. As a result, two consecutive TE modes can not exhibit sharply different concentration factors between the upper band and the lower band so this absolute photonic band gap does not appear.

The variational theorem helps to understand the appearance of photonic band gaps. Nonetheless, the physical mechanism that produces these forbidden zones is the phenomenon of Distributed Bragg Reflection, which is based on events of constructive and destructive interference of the electromagnetic waves involved.

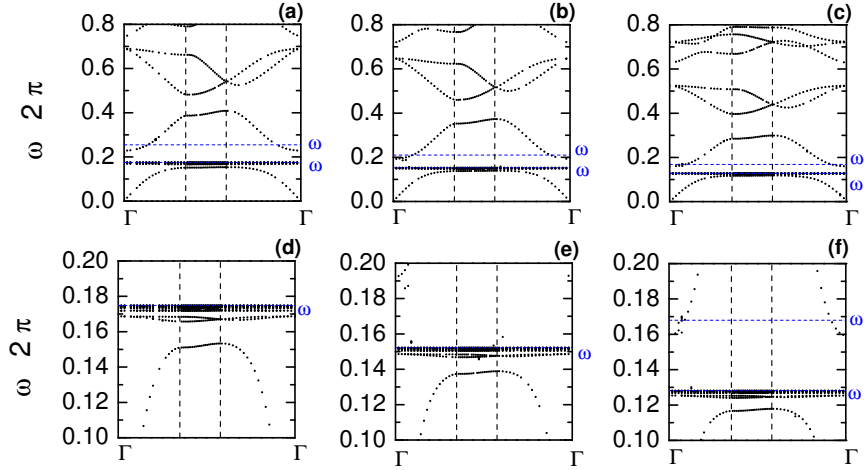


Fig. 10: Dispersion relation of TM modes in two-dimensional photonic crystal made of dielectric polaritonic cylinders in air matrix, with triangular lattice geometry. The filling fraction is, in this case,  $f = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{r^2}{a^2} = 0.28$  and the lattice constant is taken as  $a = 18\mu\text{m}$  (see figure 7-(b)). (a) and (d) AlN; (b) and (e) GaN; (c) and (f) InN. The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$ , represent the characteristic phonon frequencies of the materials normalized to  $a/2\pi c$ , where  $c$  is the speed of light in vacuum.

The figure 10 contains the dispersion relations of the TM modes in the case of a triangular network (see figure 7-(b)) of polaritonic cylinders embedded in an air matrix, with a fraction of filling  $f = \frac{2\pi}{\sqrt{3}} \frac{r^2}{a^2} = 0.28$ , where  $r$  is the radius of the cylinder, and the lattice constant is  $a = 18\mu\text{m}$ . Three different polaritonic materials are, again, taken into account: (a) and (d) AlN, (b) and (e) GaN, (c) and (f) InN. The figures 8(d)-(f) correspond to an enlargement around the characteristic transverse frequency of each material. In this case, we present the ordinary modes of the material and the dielectric constant in this case is  $\epsilon_z$ . For the numerical calculation the unit cell was divided into  $60 \times 60$  parts ( $N_x = 60$ ,  $N_y = 60$ ), while the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{22}$ . Comparing this figure with its corresponding one in the case of the square lattice (figure 8), it can be observed how the triangular geometrical setup favors the enhancement of the photonic band gap provided that the one which opens around the normalized frequency of 0.4 is wider compared to that obtained for the square photonic lattice, as it is noticed from the figures 10-(a), 10-(b), 10-(c), for each of the materials considered. In this case, the widths of the photonic

band gap  $\Delta\omega$  are 0.0661, 0.0879, and 0.0954, respectively (in normalized frequency units). The same happens with the photonic band gaps that appear by below  $\omega_{nT}$ .

## 5.2 The extraordinary polaritonic modes

When the propagation of the electromagnetic field in a two-dimensional photonic crystal composed of uniaxial materials is studied, electric and magnetic fields can meet with a non-isotropic dielectric contrast in the material. Such a fact is due to the combination of the parallel ( $\epsilon_z$ ) and transversal ( $\epsilon_t$ ) components of the dielectric tensor. This feature depends on the particular crystalline orientation of the polaritonic rods with which the photonic crystal is built. In this section we present the results corresponding to the coupling of light and extraordinary oscillation modes of the material within the empirical approach proposed in section 4. Using this approach, the figure 11 shows the dispersion relation for the TM modes in the case of a square lattice of uniaxial polaritonic cylinders in an air matrix with a filling fraction  $f = \pi r^2/a^2 = 0.24$ , with the lattice constant set at  $a = 18\mu m$ , for the same three different III-V nitride materials considered above: (a) and (d) AlN, (b) and (e) GaN, (c) and (f) InN. The figures 8(d)-(f) correspond to an enlargement around the characteristic phonon frequencies of each material. In each case, graphs were made for two different configurations, considering the following parameter setups for the numerical calculation:  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$  and  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$ . Once again, the unit cell is divided into  $60 \times 60$  parts ( $N_x = 60, N_y = 60$ ), and the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{22}$ .

It is possible to observe a behavior similar to that reported in Figure 8. That is, there are two branches of polaritonic excitations in each figure, which respectively lie below and above the characteristic phonon frequencies of the material. Also, the penetration of a mode within the polaritonic photonic band gap -close to the longitudinal phonon frequencies-, as well as the appearance of almost dispersionless (flat) bands below the transverse phononic frequencies, can be seen. In addition, a change in the dispersion relation of the three cases under study is observed when going from one configuration  $\alpha_i$  ( $i = z, t$ ) to another. The most noticeable difference takes place for AlN-based two-dimensional photonic crystal. From Figure 11 it can be observed that when  $\alpha_z > \alpha_t$  the lowest branch runs towards smaller values of the normalized frequency in the large  $k$  region, compared to the case where  $\alpha_z < \alpha_t$ . Such a shift in frequency is also present in the figures 11(b) and 11(c); but they are much less pronounced. Under the same circumstances, there is a redshift in the way it penetrates inside the polaritonic photonic band gap as well.

Continuing with the analysis, the figure 12 shows the dispersion relations for the TE modes in the case of a square photonic lattice of polaritonic cylinders in an air matrix with a filling fraction  $f = 0.24$ , and  $a = 18\mu m$  for three different materials: AlN (a) and (d) AlN, GaN (b) and (e) and InN (c) and (f). The figures 12(d)-(f) correspond to the graphics zoom around the characteristic transverse frequency of each material. In each case, the results are shown for two different extraordinary

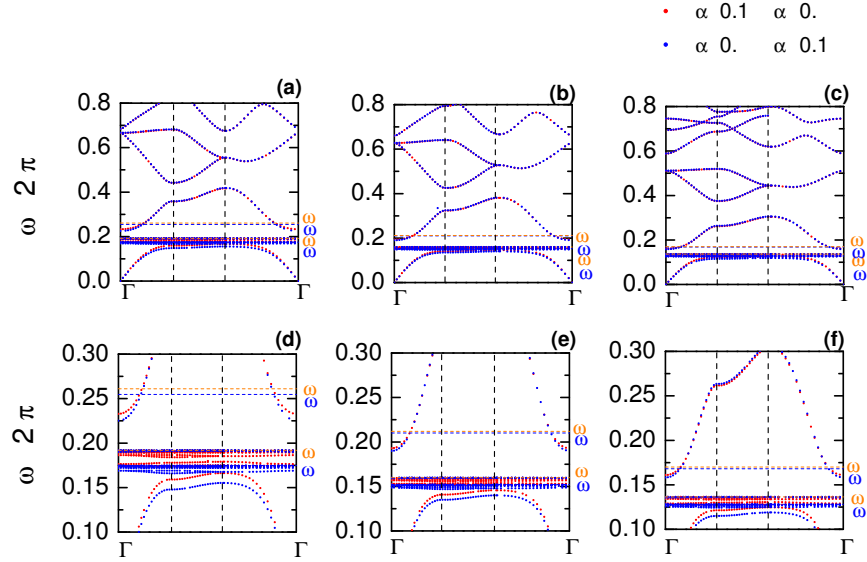


Fig. 11: Photonic dispersion relation corresponding to TM modes in a two-dimensional square lattice photonic crystal of polaritonic uniaxial cylinders in air for a dielectric configuration corresponding to extraordinary phonon modes. The filling fraction is taken as  $f = 0.24$  (see figure 7-(a)). (a) and (d) AlN; (b) and (e) GaN; (c) and (f) InN. The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$ , represent the characteristic phonon frequencies of the materials normalized to  $a/2\pi c$ , where  $c$  is the speed of light in vacuum, and  $a = 18\mu\text{m}$  is the crystal lattice constant.

configurations, taking into account the following parameters:  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$  and  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$ . The unit cell is divided into a  $60 \times 60$  mesh with a number of time steps  $N_t = 2^{24}$ . Analogously to what happened in the case of ordinary modes, when comparing this figure with the figure 11 one can immediately notice that the behavior of the modes is different. In the case of the TE modes, it is observed that in addition to the bands that appear below  $\omega_{nzT}$ , a large number of modes appear inside the polaritonic gap. Furthermore, it can be noted that both the modes inside the PBGP and those below the phonon transversal frequencies are affected by the dielectric anisotropy of the material when going from the configuration  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$  to that with  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$ . In the case of the modes inside the polaritonic photonic band gap, it is seen that they run at a lower frequency when going from the first configuration to the second.

For a better understanding of the modes located inside the polaritonic photonic band gap and below the transverse phononic frequency, the figure 13 shows an enlargement around the characteristic phonon frequencies and along the  $\Gamma \rightarrow X$  direction of figures 11-(a) and 12-(a) with  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$ . The figures 13-(a) and 13-(b) correspond to the zoom of figure 11-(a) (the TM modes of AlN), while the

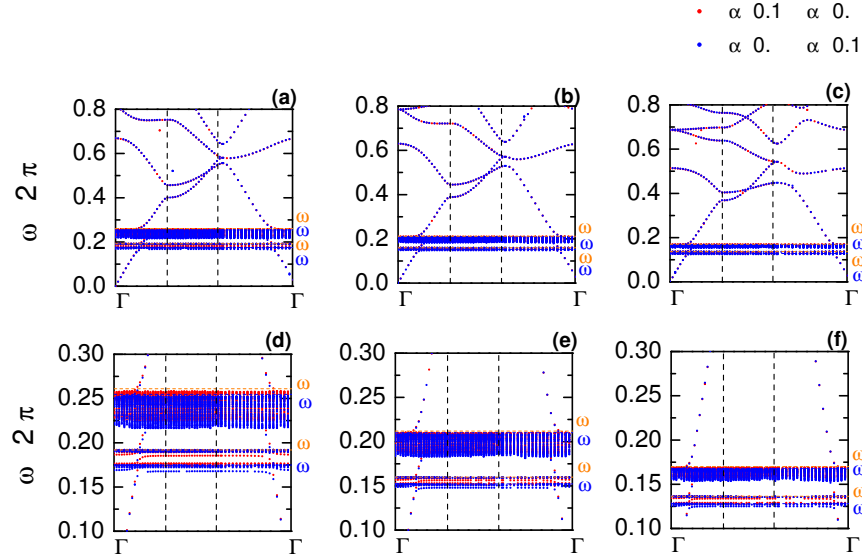


Fig. 12: Photonic dispersion relation corresponding to TE modes in a two-dimensional square lattice photonic crystal of polaritonic uniaxial cylinders in air for a dielectric configuration corresponding to extraordinary phonon modes. The filling fraction is taken as  $f = 0.24$  (see figure 7-(a)). (a) and (d) AlN; (b) and (e) GaN; (c) and (f) InN. The quantities  $\omega_{nzL}$  and  $\omega_{nzT}$ , represent the characteristic phonon frequencies of the materials normalized to  $a/2\pi c$ , where  $c$  is the speed of light in vacuum, and  $a = 18\mu m$  is the crystal lattice constant.

figures 13-(c) and 13-(d) correspond to the zoom of the figure 12-(a) (the TE modes of the AlN).

From this figure one may notice the presence of a phenomenon analogous to that reported in [37] for a two-dimensional photonic crystal whose unit cell is composed of square cylinders of a polaritonic material. There, they observe the appearance of a large number of modes below the transverse phonon frequency. Their behavior depends on the polarization; that is, in the TM case the bands present little dispersion, while for the TE case the bands are more or less linear, except when they are near certain particular frequencies, where a kind of "anti-crossings" take place. By means of a quantitative analysis they come to the conclusion that since in the proximity of  $\omega_T$  the refractive index becomes very large it can be inferred that the behavior of those bands in the region is governed by the localized resonances of an isolated rod with a high refractive index. Furthermore, the "anti-crossing" behavior of the TE modes, in contrast to that of the TM bands can be explained by considering the lowest TE band of a two-dimensional photonic crystal with the same geometry as the polaritonic case; but in this, the cylinders are metallic. With such analysis the authors conclude that the behavior mentioned is due to the interaction of this band



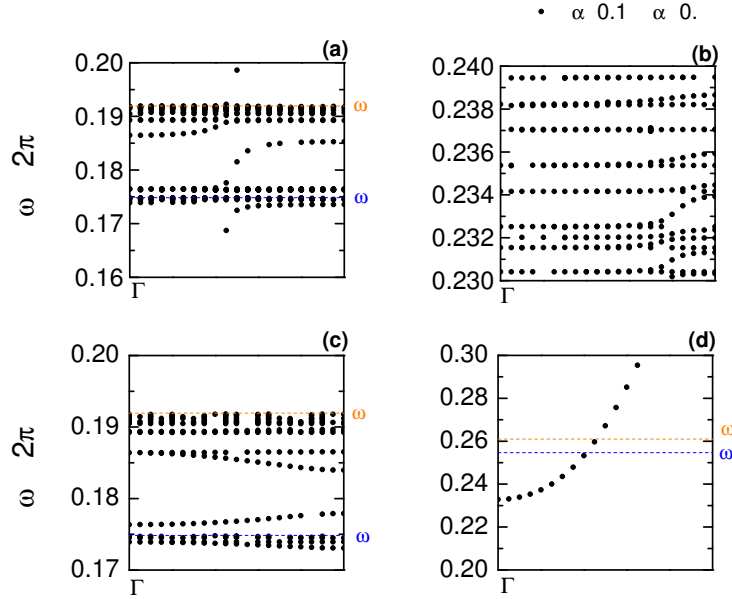


Fig. 13: Enlarged view of the photonic dispersion relations corresponding to TE [(a) and (b)] and TM [(c) and (d)] extraordinary modes in a two-dimensional photonic crystal consisting of a squared lattice of dielectric cylinders made of wurtzite AlN embedded in an air matrix. In this case, the filling fraction in the unit cell is  $f = 0.24$ . The quantities  $\omega_{nij}$   $i = z, t$  y  $j = T, L$  are the normalized phonon frequencies. The extraordinary dielectric configuration corresponds to  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$  [see equation (9)].

with the localized resonances of the high-index dielectric rod. We believe that an explanation analogous to the proposal of [37] can be also given in our case, taking into account that the polaritonic rods are circular.

To explore in more detail the effect of the anisotropy in the dielectric function associated with the so-called extraordinary phonon modes, the figure 14 shows a comparison between the configurations  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$  and  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$  for the same material as in the figure 14, the uniaxial wurtzite AlN, in the regions below the transversal phonon frequency and inside the polaritonic photonic band gap. It can be seen that both the TE and TM modes become affected although little quantitative difference is actually present.

Going over to the triangular geometry of the photonic crystal unit cell, the figure 15 shows the dispersion relation for the TM modes in the case of a filling fraction  $f = 0.28$ ,  $a = 18\mu m$  for the three different uniaxial polaritonic materials here considered: AlN (a) and (d), GaN (b) and (e), and InN (c) and (f). The figures 8(d)-(f) correspond to the enlargement around the characteristic phonon frequencies of the materials. In each case, graphs were made for two different extraordinary configura-

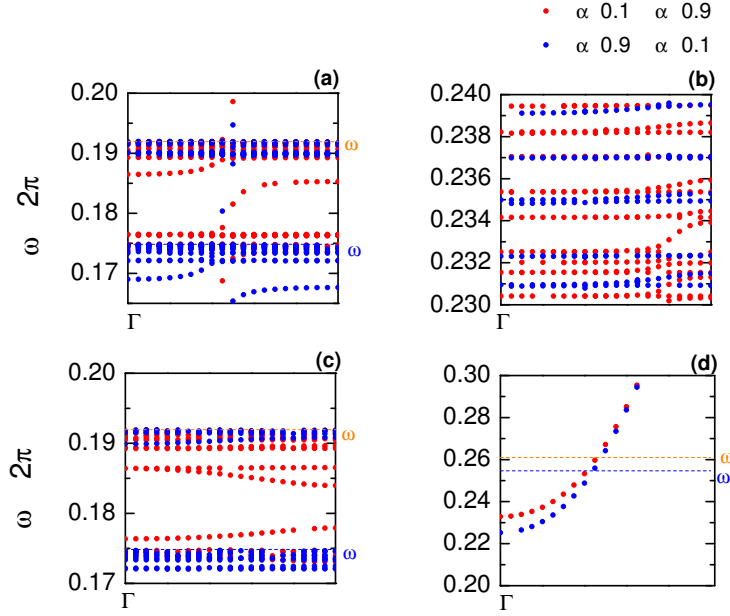


Fig. 14: Enlarged view of the photonic dispersion relations corresponding to TE modes [(a) and (b)] and TM modes [(c) and (d)] in a two-dimensional photonic crystal consisting of a squared lattice of dielectric cylinders made of wurtzite AlN embedded in an air matrix. In this case, the filling fraction in the unit cell is  $f = 0.24$ . For comparison, two different extraordinary dielectric configurations are considered:  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$  and  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$

rations that imply the anisotropy of the dielectric function  $\{\alpha_z = 0.9, \alpha_t = 0.1\}$  and  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$ . The unit cell subdivision is  $60 \times 60$ , and the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{22}$ . Again, it can be noted how the arrangement of the polaritonic cylinders in this type of structure enhances the width of the photonic band gap, due to its particular degree of dielectric contrast.

The fact that the change in the anisotropy of the dielectric function is more relevant in the AlN and less significant when it comes to the GaN and the InN, generates the question: which parameter can be used as an adjustment tool for the photonic properties? Considering the Loudon model, it is found that the dispersion relation of the extraordinary bulk phonons can be written as  $v^2 \approx v_{z,T}^2 \sin^2 \theta + v_{t,T}^2 \cos^2 \theta$  for the case of the transverse-like phonons (TO) and  $v^2 \approx v_{z,L}^2 \cos^2 \theta + v_{t,L}^2 \sin^2 \theta$  for the case of the extraordinary longitudinal-like phonons (LO) [27]. These relations are valid when the quantity  $|v_{z,T} - v_{t,T}|$  is much smaller than  $v_{z,L} - v_{z,T}$  and  $v_{t,L} - v_{t,T}$  [27]. In the case of the III-V wurtzite nitrides, these frequency differences are shown in table 2.

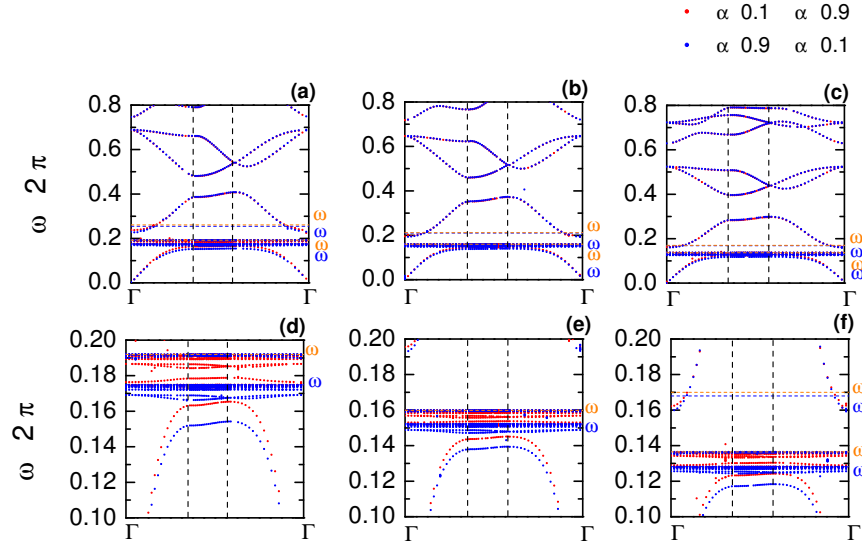


Fig. 15: The TM dispersion relation for a two-dimensional photonic crystal formed by polaritonic dielectric cylinders within an air matrix with triangular lattice geometry. The unit cell filling fraction is  $f = 0.28$  (see figure 7) and the lattice constant is  $a = 18\mu\text{m}$ . The materials considered are: AlN (a,d), GaN (b,e), and InN (c,f).

Material	$ v_{z,T} - v_{t,T} $	$v_{z,L} - v_{z,T}$	$v_{t,L} - v_{t,T}$
GaN	0.8	6.05	5.46
AlN	1.79	8.36	7.23
InN	0.87	4.17	3.51
HM	5	20	18

Table 2: Differences between the bulk  $z$ - and  $t$ -phonon frequencies (in THz units) for TO-like and LO-like modes for each of the wurtzite III-V materials used in the investigation, together with the proposed values for a suitable hypothetical material (HM).  $v_{i,j} = \frac{\omega_{i,j}}{2\pi}$ ,  $i, j = \{z, t\}$ .

From the table 2 it can be concluded that the extraordinary phonon dispersion relations of the III-V nitrides meet relatively well the above established condition, so that one may say that the absolute difference  $|v_{z,T} - v_{t,T}|$  turns out to be a relevant parameter to characterize their polaritonic behaviors. In fact, it is observed that of the three materials considered, the AlN, has the highest value of this quantity and is the one that presents the greatest change in the dispersion relations when considering the region between the characteristic phonon frequencies. This allows us to assume that a greater value in the absolute difference  $|v_{z,T} - v_{t,T}|$  could have a significant influence in the behavior of the polaritonic electromagnetic modes.

With the aim to provide a reason that justifies the above statement, we propose to consider a hypothetical uniaxial material with the following phonon frequencies:  $\nu_{z,T} = 13$  THz,  $\nu_{t,T} = 18$  THz,  $\nu_{z,L} = 33$  THz,  $\nu_{t,L} = 36$  THz. Then, in the figure 16 we present the calculated dispersion relation of extraordinary phonon-polariton TM modes for different values of  $\{\alpha_z, \alpha_t\}$ . With the same lattice constant  $a = 18\mu\text{m}$ , the results for a two-dimensional photonic crystal with square lattice and filling fraction  $f = 0.24$  is depicted in figures 16-(a) and 16-(b) whilst those corresponding to a triangular lattice photonic crystal with filling fraction  $f = 0.28$  appear in figures 16-(c) and 16-(d). In the boxes (b) and (d) we present the enlargement around the TO-like polaritonic frequency region. The numerical procedure included a  $60 \times 60$  spatial mesh and  $2^{22}$  time steps.

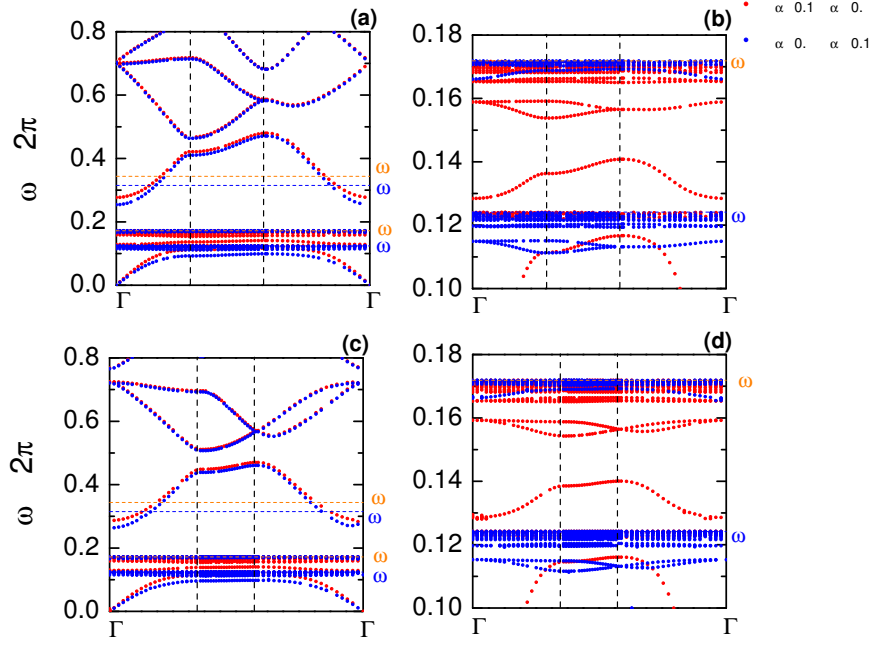


Fig. 16: The dispersion relation of extraordinary phonon-polariton TM electromagnetic modes of a two-dimensional photonic crystal made of dielectric cylinders of a hypothetical uniaxial polar material in an air matrix. The case of a square lattice (with filling fraction  $f = 0.24$ ) system appears in graphics (a) and (b), and the triangular lattice (with a filling fraction  $f = 0.28$ ) one corresponds to graphics (c) and (d). In both cases, the lattice constant is set at  $a = 18\mu\text{m}$ . The assumed characteristic phonon frequencies are  $\omega_{zT} = 13$  THz,  $\omega_{tT} = 18$  THz,  $\omega_{zL} = 33$  THz, and  $\omega_{tL} = 36$  THz. (b) and (d) show the enlarged view of the normalized frequency region around the transversal-like polaritonic dispersion relation.

As can be observed in each of the boxes of figure 16, the increase in the differences between the characteristic phonon frequency values leads to greater possibilities to manipulate the properties of the polariton photonic band gap. It is possible to note that an increase in  $\alpha_z$  enhances the redshift of the mode that penetrates within the photonic gap in the vicinity of the longitudinal frequency. On the other hand, it can be seen, from both figures 16-(b) and 16-(d) how, below the transverse frequencies, some photonic band gaps appear, and this takes place for the two distinct dielectric anisotropic setups considered. The case in which  $\{\alpha_z = 0.1, \alpha_t = 0.9\}$  presents dispersive bands in the normalized frequency range  $\omega_{nzT} < \omega < \omega_{nzL}$ , but as one gets closer to the values of the transverse phonic frequencies these bands flatten out. In comparison with the real III-V materials, in the hypothetical one the difference between the polaritonic photonic responses of a more  $t$ -like and a more  $z$ -like dielectric orientations is, clearly, more apparent. In accordance, should we need to exploit in a suitable manner the phonon-polariton features of a two-dimensional ionic photonic crystal, it is necessary to select a uniaxial material in which the frequency differences discussed above are the greater ones.

## 6 The influence of dielectric rod transversal geometry and unit cell filling fraction in the photonic dispersion relations

A rather obvious question that might appear when discussing the dispersion relations of the two-dimensional photonic crystals based on uniaxial polar materials is whether the shape of the dielectric rods or the amount of dielectric filling in the unit cell actually have an influence on the photonic features. In order to provide an answer to that query we have performed the corresponding FDTD calculations. First, the variation of the filling fraction was investigated in the case of a AlN-based two-dimensional photonic crystal consisting on circular cross-section dielectric cylinders within an air matrix, arranged into a squared unit cell. We limit ourselves to consider just the ordinary phonon modes in the material. The figure 17 contains the results obtained varying the ratio  $r/a$  between the dielectric rod radius and the lattice constant which is fixed at  $a = 18\mu m$ . For the sake of simplicity the calculation used a  $40 \times 40$  two-dimensional mesh and only  $2^{18}$  time steps. But this simplified scheme is sufficient to show the main features of the obtained dispersion relations.

Then, a readily apparent phenomenon comes out. The photonic spectrum becomes denser, with a larger number of allowed modes within the interval of normalized frequencies considered. This is a consequence of the growth in the dielectric contrast. Also, the main photonic band gap, located above  $\omega_{nzL}$ , widens as long as  $r/a$  augments until the value 0.28, and then starts diminishing as it has already been discussed; due to the vector nature of the field and the difference between the concentration factors [36].

An enlarged view of figure 17 in the normalized frequency range  $\{0, 0.27\}$  appears in 18. There it is possible to observe how the way in which the phonon-type mode penetrates in the region  $\omega_{nzT} < \omega < \omega_{nzL}$  -where the polaritonic photonic band

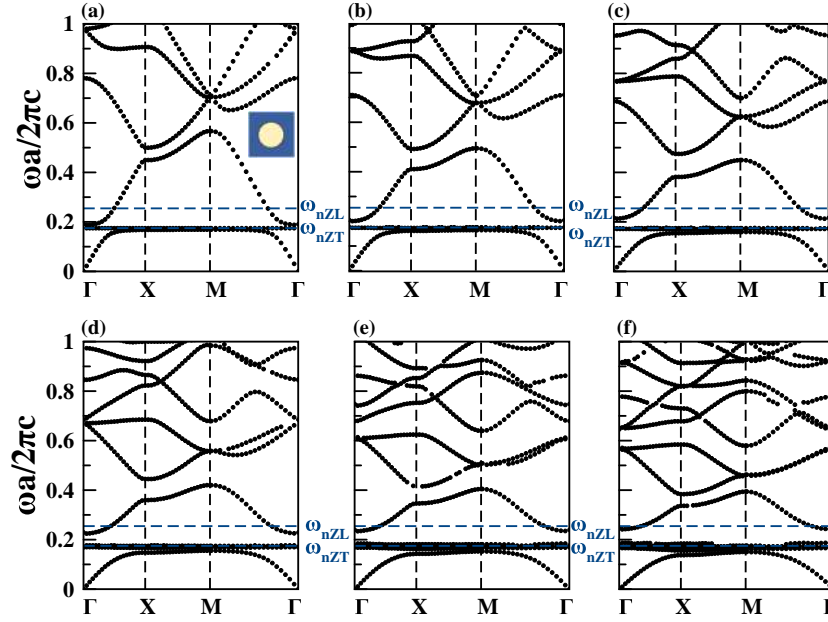


Fig. 17: Dispersion relations of ordinary TM modes in a two-dimensional photonic crystal with square unit cell, made of circular rods of wurtzite embedded in an air matrix. Different rod radius to lattice constant,  $r/a$ , ratio values are considered: (a)  $\frac{r}{a} = 0.1$ , (b)  $\frac{r}{a} = 0.16$ , (c)  $\frac{r}{a} = 0.22$ , (d)  $\frac{r}{a} = 0.28$ , (e)  $\frac{r}{a} = 0.33$ , (f)  $\frac{r}{a} = 0.40$ .

gap localizes- changes as a result of the increment in the filling fraction. In this case, a widening of the polaritonic band gap is produced, which reveals that  $r/a$  can be an adjusting parameter for tuning that gap.

Aiming at a more detailed study of the polaritonic photonic response of the dielectric structures based on uniaxial polar crystals the figure 19 shows the dispersion relations for the case of the TM modes in a photonic crystal with square lattice composed of elliptical cross-section rods of AlN in an air matrix. The graphics depict the region of normalized frequencies  $\{0, 0.27\}$  only. For the numerical calculation, the unit cell was divided in a  $40 \times 40$  mesh, and the number of temporary steps considered was  $N_t = 2^{18}$ . Different configurations of greater and smaller radii of the elliptically shaped cross-section rods,  $r_1$  ( $x$ -oriented) and  $r_2$  ( $y$ -oriented) are considered, with fixed  $r_1 = 5\mu\text{m}$ : (a)  $r_2 = 0.2r_1$ , (b)  $r_2 = 0.3r_1$ , (c)  $r_2 = 0.4r_1$ , (d)  $r_2 = 0.5r_1$ , (e)  $r_2 = 0.6r_1$ , (f)  $r_2 = 0.7r_1$ . The lattice constant is  $a = 18\mu\text{m}$ . It is possible to notice that, compared to the case of circular cylinders, the photonic response shows a narrower band gap and the spectrum around  $\omega_{nZT}$  is significantly denser, due to the lower degree of dielectric filling within the unit cell. The phonon-polariton mode that penetrates within the normalized frequency range  $\omega_{nZT} < \omega < \omega_{nZL}$  becomes affected as long as the proportion of dielectric material inside the unit cell is varied.

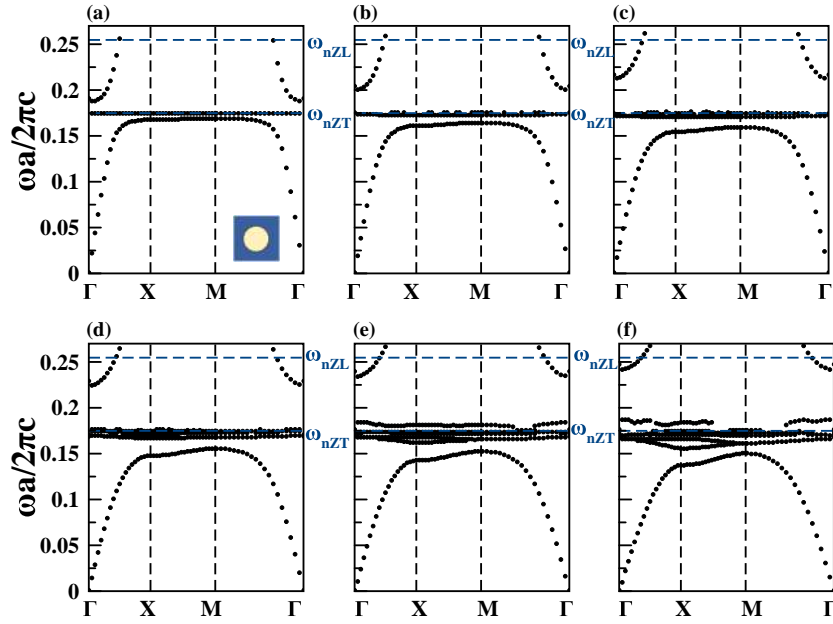


Fig. 18: Enlarged view of figure 17 around the polaritonic region.

However, this change is less pronounced than the one taking place in the case of dielectric rods with circular cross-sections, in which the polaritonic photonic band gaps are wider.

On the other hand, the change in the orientation of the elliptical dielectric rods also provides with quantitative differences for the dispersion relations in the interval of normalized frequencies taken into account. When comparing the figures 19 and 20, in which all parameters are kept but the orientation of the elliptical cylinders of the geometry associated with figure 20 changes (now, the values of  $r_2$  correspond to the  $y$ -oriented major axis and the values of  $r_1$  are those corresponding to the  $x$ -oriented minor axis). The polariton-related dispersion relations exhibit, in this case, smaller values of the main polaritonic band gap compared to the orientation portrayed in figure 19. If one bears in mind the scheme of the square lattice unit cell appearing in the insets of the respective graphics (a), in each case, it is possible to justify the reason for such a difference through the influence of the geometry on the dielectric contrast in the structure.

Finally, the figures 21 and 22 contain the dispersion relations of TM modes in a two-dimensional photonic crystal with a square lattice geometry with dielectric wurtzite AlN rods having square and triangular cross-sections respectively. In both cases, the rods are embedded in an air matrix. The FDTD calculation used a  $40 \times 40$  mesh together with  $2^{18}$  time steps, and was restricted to just show the normalized frequency region  $\{0, 0.27\}$ . In the figure 21 the square-shaped rods have a side length

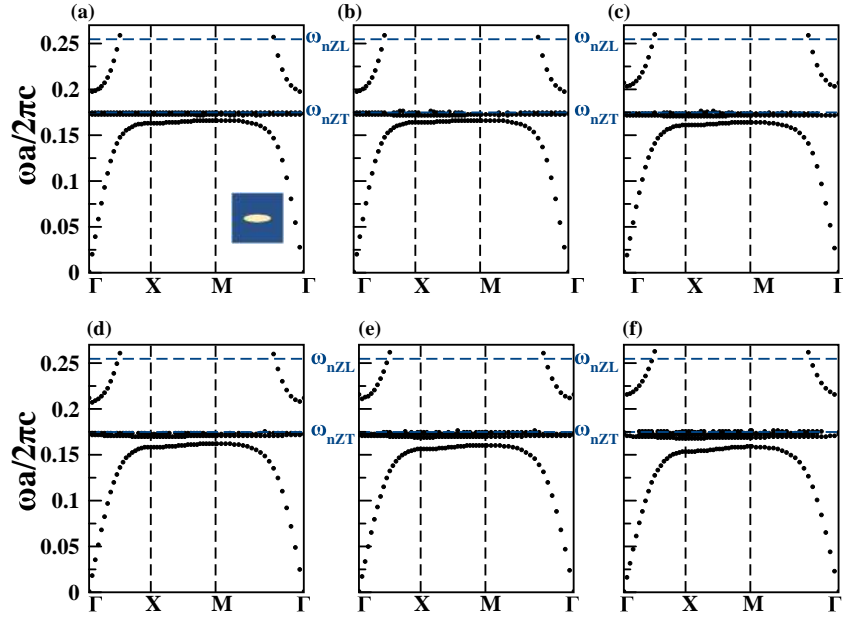


Fig. 19: Photonic dispersion relations of TM modes corresponding to ordinary phonon-polaritonic response in a the case of square lattice photonic crystal of AlN rods with elliptical cross-section embedded in an air matrix. The elliptic major axis is oriented along the  $x$ -direction and the minor axis is oriented along the  $y$ -direction. Different relations between  $r_1$  and  $r_2$  are considered, fixing  $r_1 = 5\mu m$ : (a)  $r_2 = 0.2r_1$ , (b)  $r_2 = 0.3r_1$ , (c)  $r_2 = 0.4r_1$ , (d)  $r_2 = 0.5r_1$ , (e)  $r_2 = 0.6r_1$ , (f)  $r_2 = 0.7r_1$ . The lattice constant is set at  $a = 18\mu m$ .

given by  $a \times (1 - r)$ , where  $a$  is the lattice constant and several values of  $r$  are considered: (a)  $r = 0.2$ , (b)  $r = 0.3$ , (c)  $r = 0.4$ , (d)  $r = 0.5$ , (e)  $r = 0.6$ , (f)  $r = 0.7$  micrometers. In the figure 22, the triangular rods were built with an equilateral cross-section with side length equal to  $a/r$  with: (a)  $r = 14$ , (b)  $r = 12$ , (c)  $r = 10$ , (d)  $r = 8$ , (e)  $r = 6$  micrometers.



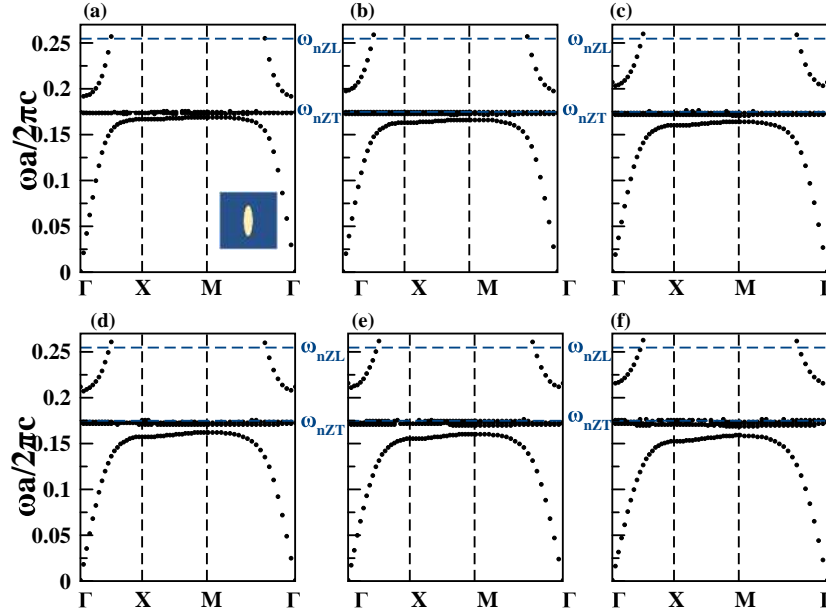


Fig. 20: The same as in figure 19 but for a different setup of the dielectric cylinders. Now, the major axis length is  $r_2$  (y-oriented) and the minor axis length is  $r_1$  (x-oriented). Each graphics correspond to a distinct proportion between major and minor axes with fixed  $r_2 = 5\mu m$ : (a)  $r_1 = 0.2r_2$ , (b)  $r_1 = 0.3r_2$ , (c)  $r_1 = 0.4r_2$ , (d)  $r_1 = 0.5r_2$ , (e)  $r_1 = 0.6r_2$ , (f)  $r_1 = 0.7r_2$ .

Again, the effect of varying the proportion of polaritonic material with respect to the air matrix is observed, mainly, in the features of the defective mode that penetrates the polaritonic photonic band gap. This effect is less pronounced in the case of triangular rods. In fact it can be seen from the figure 22-(a) that the width of the polaritonic photonic band gap is almost zero.

To conclude with this chapter, it is worth saying that these authors are aware of the fact that the development of photonic structures using III-V nitrides in their hexagonal phase constitutes a real technological challenge. This is due, in first place, to the chemical inertia of these materials. On the other hand, since the photonic lattice constant needed to have activity at short wavelengths should be very small, which makes the process of fabrication a very difficult task. However, in spite of the obstacles mentioned, recent advances in the nanofabrication of photonic crystals with these elements have been reported [29, 30, 35]; which shows the usefulness of these materials in electromagnetic regions not covered by others.

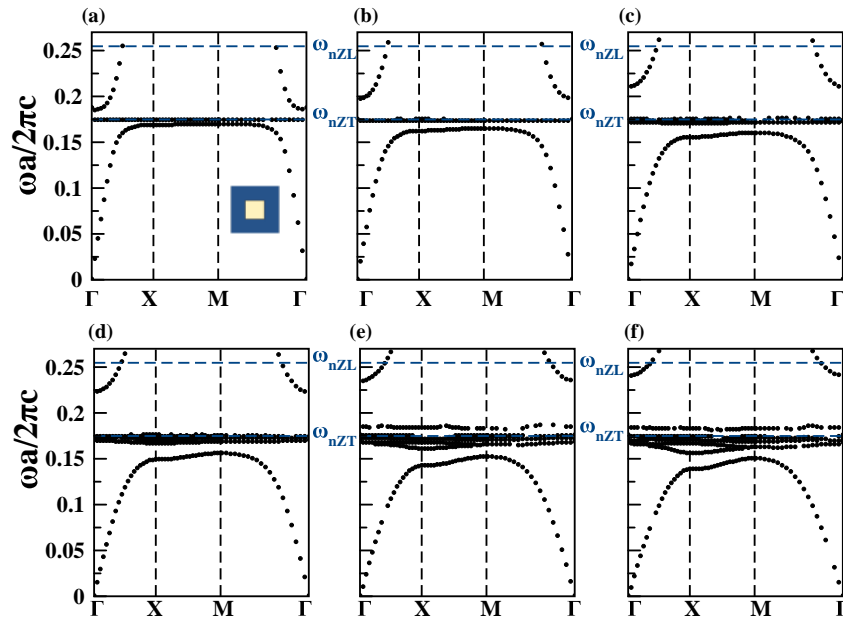


Fig. 21: Dispersion relations of TM modes for a squared photonic lattice made of squared cross-section AlN dielectric rods in an air matrix. The rods have side length  $a \times (1 - r)$  with, (a)  $r = 0.2$ , (b)  $r = 0.3$ , (c)  $r = 0.4$ , (d)  $r = 0.5$ , (e)  $r = 0.6$ , (f)  $r = 0.7$ .

In our investigation we were able to observe the appearance of flat -almost without dispersion- photonic bands. This indicates that group velocity can be greatly reduced so that the radiation-matter interaction time in these structures material would be, actually, longer. This is an element that can help to motivate the construction of this type of two-dimensional photonic crystals and their use in sensing applications.

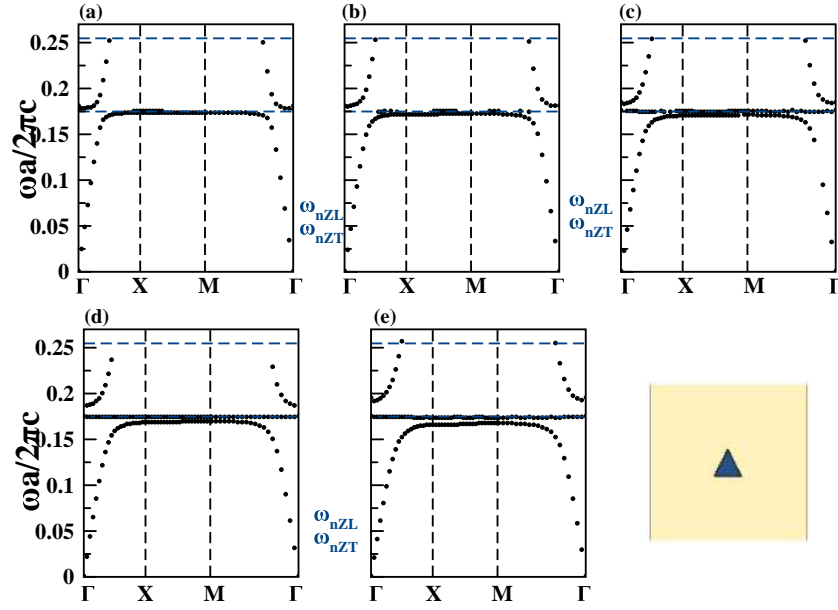


Fig. 22: Dispersion relations of TM modes for a squared photonic lattice made of triangular cross-section AlN dielectric rods in an air matrix. The rods are designed to have equilateral triangular shape of side length  $a/r$ , with (a)  $r = 14$ , (b)  $r = 12$ , (c)  $r = 10$ , (d)  $r = 8$ , (e) 6.

## References

1. E. Yablonovitch, Phys. Rev. Lett. 58, 2059 (1987).
2. S. John, Phys. Rev. Lett. 58, 2486 (1987).
3. R. A. Silin, Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Radio z. 15 (1972).
4. I. Arias, S. Serebrinsky, and M. Ortiz, Acta Materialia 54, 975 (2006).
5. K. M. Leung and Y. F. Liu, Phys. Rev. Lett. 65, 2646 (1990).
6. Z. Zhang and S. Satpathy, Phys. Rev. Lett. 65, 2650 (1990).
7. K. M. Ho, C. T. Chan, and C. M. Soukoulis, Phys. Rev. Lett. 65, 3152 (1990).
8. E. Yablonovitch and T. J. Gmitter, Phys. Rev. Lett. 63, 1950 (1989).
9. M. Plihal, A. Shambrook, A. Maradudin, and P. Sheng, Opt. Commun. 80, 199 (1991).
10. S. L. McCall, P. M. Platzman, R. Dalichaouch, D. Smith, and S. Schultz, Phys. Rev. Lett. 67, 2017 (1991).
11. A. S. Davydov, *Theory of Solids* (Nauka, Moscow, 1980).
12. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, E. N. Economou, C. T. Chan, and K. M. Ho, Phys. Rev. B 48, 14121 (1993).
13. M. M. Sigalas, C. M. Soukoulis, C. T. Chan, and K. M. Ho, Phys. Rev. B 49, 11080 (1994).
14. W. Zhang, A. Hu, X. Lei, N. Xu, and N. Ming, Phys. Rev. B 54, 10280 (1996).
15. V. Kuzmiak, A. A. Maradudin, and A. R. McGurn, Phys. Rev. B 55, 4298 (1997).
16. A. Y. Sivachenko, M. E. Raikh, and Z. V. Vardeny, Phys. Rev. A 64, 013809 (2001).

17. K. C. Huang, P. Bienstman, J. D. Joannopoulos, K. A. Nelson, and S. Fan, *Phys. Rev. B* **68**, 075209 (2003).
18. K. Yee, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **14**, 302 (1966).
19. R. Holland, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **30**, 4589 (1983).
20. C.J. Raiton, D. L. Paul, I. J. Craddock, and G. S. Hilton, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **53**, 4129 (2005).
21. J. Z. Fenghua Zheng, Zhizhang Chen, *Microwave Symposium Digest. 2000 IEEE MTT-S International 2*, 1117 (2000).
22. W. Zhang, A. Hu, X. Lei, N. Xu, and N. Ming, "Photonic band structures of a two-dimensional ionic dielectric medium", *Phys. Rev. B* **54**, 10280A-10283 (1996).
23. E. Yablonovitch, T. J. Gmitter, and K. M. Leung, "Photonic band structure: The face-centered-cubic case employing nonspherical atoms", *Phys. Rev. Lett.* **67**, 2295A-2298 (1991).
24. A. V. Umenyi, K. Miura, and O. Hanaizumi, "Modified Finite-Difference Time-Domain Method for Triangular Lattice Photonic Crystals", *Light. Technol. J.* **27**, 4995A-5001 (2009).
25. A. Taflove and S. C. Hagness, *Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time-Domain Method (3rd. Ed.)* (Artech House 2005).
26. I. A. Sukhoivanov and I. V. Guryev, *Photonic Crystals, Physics and Practical Modeling* (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2009).
27. M. A. Stroschio and M. Dutta, *Phonons in Nanostructures* (Cambridge Univ. Press 2001).
28. C. Rader and N. Brenner, "A new principle for fast Fourier transformation", *Acoust. Speech Signal Process. IEEE Trans.* **24**, 264A-266 (1976).
29. D. Peyrade, Y. Chen, L. Manin-Ferlazzo, A. Lebib, D. Grandjean Nicolas Coquillat, and J.-P. Legros Renée Lascaray, "Fabrication of GaN photonic crystals for 400 nm wavelength", *Microelectron. Eng.* **57A-58**, 843A-849 (2001).
30. W. H. P. Pernice, C. Xiong, C. Schuck, and H. X. Tang, "High-Q aluminum nitride photonic crystal nanobeam cavities", *Appl. Phys. Lett.* **100**, 091105 (2012).
31. R. Loudon, "The Raman effect in crystals", *Adv. Phys.* **13**, 423A-482 (1964).
32. ZZ.-Y. Li, B.-Y. Gu, and G.-Z. Yang, "Large Absolute Band Gap in 2D Anisotropic Photonic Crystals", *Phys. Rev. Lett.* **81**, 2574A-2577 (1998).
33. V. Kuzmiak, A. A. Maradudin, and A. R. McGurn, "Photonic band structures of two-dimensional systems fabricated from rods of a cubic polar crystal", *Phys. Rev. B* **55**, 4298A-4311 (1997).
34. W. Kuang, J. K. Woo, and J. D. O'Brien, "Finite-Difference Time Domain Method for Nonorthogonal Unit-Cell Two-Dimensional Photonic Crystals", *Light. Technol. J.* **25**, 2612A-2617 (2007).
35. A. Z. Khokhar et al., "Nanofabrication of gallium nitride photonic crystal light-emitting diodes", *Microelectron. Eng.* **87**, 2200A-2207 (2010).
36. J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, J. N. Winn, and R. D. Meade, *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light (2nd. Ed.)* (Princeton Univ. Press 2008).
37. K. C. Huang, P. Bienstman, J. D. Joannopoulos, K. A. Nelson, and S. Fan, "Phonon-polariton excitations in photonic crystals", *Phys. Rev. B* **68**, 75209 (2003).
38. J. Gleize, M. A. Renucci, J. Frandon, and F. Demangeot, "Anisotropy effects on polar optical phonons in wurtzite GaN/AlN superlattices", *Phys. Rev. B* **60**, 15985A-15992 (1999).
39. H. A. Gomez-Urrea, C. A. Duque, I. V. Perez-Quintana, M. E. Mora-Ramos, "Light propagation in two-dimensional photonic crystals based on uniaxial polar materials: results on polaritonic spectrum", *Appl. Phys. B* **123:66**, 1-8 (2017).
40. E. L. Albuquerque and M. G. Cottam, *Polaritons in Periodic and Quasiperiodic Structures* (Elsevier Science, 2004).



# Evolución de Paquetes de Ondas de Huecos en Sistemas 1D

J. L. Beltrán-Díaz<sup>1</sup>, Eduardo Serna<sup>2</sup> and L. Diago-Cisneros<sup>1,2</sup>

## Resumen

En este capítulo se presenta un estudio de la dispersión de paquetes gaussianos de ondas cuasi-unidimensionales de gases de huecos (1DHGWP) espín polarizados y desacoplados, en presencia de interacción espín-órbita tipo Rashba (SOI-R). La evolución del 1DHGWP, se simula confinándolo electrostáticamente en un nanohilo semiconductor (nano-cinta de grafeno monocapa). El procesamiento matemático de los modelos, se soporta en el método de diferencias finitas. La fenomenología de interés se simula variando magnitudes topológicas, la fortaleza de la SOI-R y la configuración del espinor (pseudo-espinor), para el 1DHGWP incidente.

*In this chapter we present a theoretical study of the scattering for one-dimensional Gaussian wave-packets of holes (1DHGWP), spin-polarized and mixing-free, under Rashba spin-orbit interaction (SOI-R). The 1DHGWP, is electrostatically confined to a semiconductor nano-wire (thin quantum nanoribbon of monolayer graphene). The mathematical processing of the envisioned models, is supported on the finite-difference scheme. Appealing phenomenology, can be tuned via topological quantities, the SOI-R strength, and the spinor (pseudo-spinor) of the incident 1DHGWP.*

## 1 Introducción General

El reciente interés en el espín del electrón ha abierto un campo de investigación de frontera en las nanociencias, denominado Espintrónica [1, 2]. Entre los mecanismos físicos propuestos para la manipulación del espín, figura la interacción espín-órbita

---

<sup>1</sup>Facultad de Física. Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup>Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Ciudad de México.  
e-mail: sernaed95@gmail.com; e-mail: ldiago@fisica.uh.cu

(SOI). En 1984, Y. A. Bychkov y E.I. Rashba [3, 4] establecieron un modelo que describe apropiadamente SOI en sistemas semiconductores bidimensionales, ampliamente conocido como “efecto Rashba” (SOI-R). Dicha interacción surge como consecuencia de la asimetría en el potencial de confinamiento, referida en la literatura como asimetría de inversión estructural (SIA). La SOI-R constituye la base de uno de los trabajos pioneros en el campo de la Espintrónica: el prototipo de un transistor de efecto de campo de espín (SFET) propuesto en 1990 por S. Datta y B. Das [5]. Posteriormente fue reportada una versión de SFET para huecos [6]. En ambos casos una heteroestructura semiconductor, *e. g.* InAlAs/InGaAs, proporciona un canal de transporte bidimensional para los portadores (electrones o huecos). Dicho canal une dos electrodos ferromagnéticos, uno de los cuales actúa como fuente y el otro como colector. La fuente emite portadores con el espín orientado en la dirección de magnetización de dicho electrodo, mientras que el colector (que posee la misma magnetización que el electrodo fuente) actúa como un filtro de espín, *i. e.*, sólo permite pasar los electrones con espín orientado en la misma dirección que su magnetización. El grado de precesión del espín de los portadores es modulado por un tercer electrodo vía SOI-R.

El modelo SOI-R para sistema bidimensionales de electrones está bien establecido en la literatura. En el caso de los huecos la situación es más complicada por la degeneración cuádruple de los estados  $\bar{\Gamma}_8$  de valencia [7]. En 2005 A. Wong y F. Mireles [8], utilizando el formalismo de la teoría  $k \cdot p$  de masa efectiva dentro de la aproximación de la función envolvente y los modelos de Kane y Kohn-Luttinger extendido, obtuvieron la forma explícita de los hamiltonianos que describen apropiadamente la SOI-R en el caso de los huecos. Se ha mostrado [9] que el fuerte acoplamiento espín-órbita y la mezcla de bandas implican una SOI-R más eficiente para huecos que el caso electrónico. Más recientemente en 2015 R. Cuan y L. Diago-Cisneros, desarrollaron modelos de hamiltonianos efectivos con fórmulas cerradas para la fortaleza de la SOI-R de huecos pesados en sistemas cuasi-bidimensionales (Q2D) y cuasi-unidimensionales (Q1D) [10].

En los últimos años se le ha prestado gran atención al efecto Rashba en sistemas semiconductores Q1D, también llamados hilos cuánticos (QWW), debido a la abundancia de fenómenos físicos y aplicaciones [11]. Lo anterior, apoyado en el hecho de que restringir la distribución angular de los portadores, a un canal Q1D conlleva a mejores resultados en la modulación y coherencia de las corrientes de electrones con espín polarizado [12, 13].

Entre los primeros reportes sobre el efecto de la SOI-R en la conductancia de electrones en QWW resaltan los trabajos de Moroz y Barnes [14] en 1999, y Mireles y Kirzenow [15] en 2001. Ambos mostraron que la SOI-R influye significativamente en la conductancia balística. Luego de estas publicaciones han surgido estudios similares [16, 17, 18, 19] que involucran, además de SOI-R, campos externos.

Se han reportado resultados importantes sobre los huecos en la espintrónica [6, 7, 8, 9, 20, 21, 22], sin embargo son pocos los estudios dedicados al transporte cuántico en presencia de SOI-R. En este trabajo revisamos algunas de las propiedades de los sistemas Q1D de huecos en régimen de bandas desacopladas, con el objetivo de utilizarlos como canal de transporte en un SFET. Asimismo, estudiamos los procesos

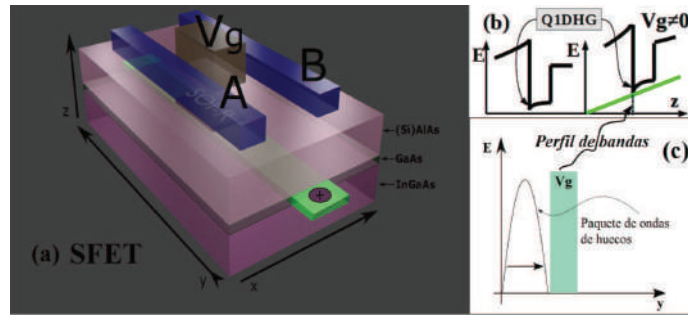


Fig. 1: Dibujos esquemáticos del sistema físico. (a) Heteroestructura semiconductor sobre la que se han colocado las compuertas metálicas A y B de forma que se obtenga un Q1DHG. (b) Esquema del perfil de la banda de valencia para  $V_g = 0$  y  $V_g \neq 0$ . (c) *Gedanken Experiment*.

de dispersión dependiente del espín que ocurren en dicho dispositivo, a través del cálculo de los coeficientes cinéticos de paquetes de onda gaussianos de huecos espín-polarizados.

En las últimas décadas, la ciencia ha dado pasos gigantescos en el desarrollo o mejora de tecnologías que revolucionan incluso la forma en la que pensamos. Cada día, la información se vuelve más accesible y más numerosa; la escalada vertiginosa de *Internet* y el desarrollo que han tenido los transportes, han dado paso al proceso de globalización. Además, la medicina ha mejorado la calidad y la expectativa de vida de la población mundial, implicando con esto, que una mayor cantidad de personas hace investigaciones e incrementa la cantidad de información disponible. Sin embargo, a mayor información, se necesita más almacenamiento.

La miniaturización es algo que los humanos han estado buscando por muchos años para resolver el problema del almacenamiento, dado que al hacer objetos más pequeños se ahorran recursos que pueden ser usados para más almacenamiento.

### 1.1 Ley de Moore

Enfocándonos en la industria electrónica, el elemento con mayor relevancia podría ser el transistor ya que ha impulsado a la miniaturización [23]. Gracias a él, el primer circuito integrado fue construido; se basaba en materiales semiconductores de dimensiones microscópicas. Esta combinación de circuitos y transistores llevaron a Gordon Moore, co-fundador de Intel, a pronunciar una norma dependiente del tiempo que indica la cantidad de transistores que deberían existir en un circuito integrado para un tiempo dado. Esto se conoce como la Ley de Moore [24]. A pesar de que la Ley de Moore ha sido verdadera hasta ahora, no existe una garantía que será cierta para los próximos años ya que depende de la investigación moderna, la cual



está llegando a ciertos límites debido a que los circuitos integrados clásicos fallan a escalas tan pequeñas debido a propiedades cuánticas de los sistemas, un ejemplo es el Efecto Túnel.

## ***1.2 Efecto Túnel***

En mecánica cuántica, este fenómeno propone la idea de que una partícula es capaz de ignorar principios de la mecánica clásica, permitiéndole pasar a través de una barrera cuántica de potencial (QB) mayor que la energía con la que la partícula se mueve [25]. Aplicando esto a dispositivos electrónicos, esto puede resultar en efectos inesperados del dispositivo, por ejemplo, el transistor puede ser visto como una válvula, hasta que apliquemos fuerza a la válvula no habrá flujo; sin embargo, en una escala muy pequeña, aunque la válvula esté completamente cerrada puede existir un flujo, por lo que cada cierto intervalo de tiempo caerá una gota.

Últimamente, podemos ver términos con el prefijo de “nano” siendo usados en la vida cotidiana gracias a muchas mejoras en la tecnología, particularmente hablando de la nanotecnología. Con ella, la manipulación de la materia se puede realizar a escalas tan pequeñas como una molécula de glucosa. Esta manipulación es muy útil debido a que permite el descubrimiento de nuevos materiales que pueden tener propiedades que facilitan ciertas tareas, por ejemplo, la investigación de las propiedades cuánticas o el desarrollo de nuevas tecnologías.

El efecto túnel es de gran relevancia e interés en grafeno debido a efectos anómalos como la Paradoja de Klein que será mencionada con más detalle posteriormente.

## ***1.3 Computación Cuántica***

Esta es la propuesta popular para continuar con la miniaturización, la idea es ocupar sistemas mecano-cuánticos para administrar datos de manera mucho más eficiente que en la computación clásica. Pequeñas computadoras cuánticas manejando docenas de operaciones en unos pocos qubits es uno de los aspectos más avanzados en la investigación de la computación cuántica. Aún existe el reto de mejorar dichas tecnologías para su uso cotidiano, ya que se encuentran limitadas a prototipos.

Una posible solución al problema planteado por la falla eventual de la Ley de Moore es movernos a un paradigma computacional diferente. Este paradigma es proveído por la teoría de la computación cuántica, que se basa en la idea de usar mecánica cuántica para realizar cómputos, en lugar de física clásica. Resulta que mientras una computadora ordinaria puede ser usada para simular una computadora cuántica, parece ser imposible realizar la simulación en una manera *eficiente*. Por lo que las computadoras cuánticas ofrecen una ventaja esencial de rapidez sobre computadoras clásicas. Esta ventaja es tan significativa que muchos investigadores creen que ningún progreso concebible en computación clásica sería capaz de superar

la brecha entre el poder de una computadora clásica y el poder de una computadora cuántica [26]. La computación cuántica usa bits cuánticos (*qubits*) para manejar información, usualmente se asumen como objetos matemáticos abstractos, permitiendo a los investigadores la libertad de escoger cualquier sistema para usar *qubits*. La principal diferencia entre los bits clásicos y los *qubits* es los grados de libertad, un *qubit* puede tener una combinación lineal de estados, usualmente llamados *superposiciones* [26], cuya representación en notación de Dirac es:

$$|\psi\rangle = \alpha|0\rangle + \beta|1\rangle, \quad (1)$$

mientras que el *bit* clásico sólo puede tener estados 0 y 1. Si cualquier sistema puede ser usado para la computación cuántica y consiste en varios grados de libertad, entonces podemos asumir que la espintrónica en el grafeno es un camino viable para desarrollar computación cuántica.

### 1.4 Espintrónica

La espintrónica [27] es similar a la electrónica, sin embargo además del estado de carga, podemos considerar que el espín de los electrones funciona como un grado de libertad, esto significa que habrá una mayor eficiencia en el manejo de información. El principal objetivo de investigadores que trabajan en espintrónica es el entender mecanismos para lograr un control eléctrico eficiente de las corrientes de espín y sus configuraciones, esto se hace estudiando diferentes tipos de materiales y sistemas.

Considerando las propiedades mecánico-cuánticas en sistemas nanométricos ( $10^{-9}$  m), la espintrónica es una de las formas que los investigadores proponen para resolver las dificultades actuales en el desarrollo de computadoras cuánticas. Los *qubits* serán la carga así como el espín de los electrones, dando la posibilidad de varios estados debido a las diferentes polarizaciones de espín.

Los materiales son lo que definen los límites en el desarrollo de la espintrónica, ya que las propiedades electromagnéticas de cada material afectan haciendo más fácil o más difícil el uso eficiente del espín del electrón. Hay algunos materiales y estructuras cuánticas que son considerados candidatos para el desarrollo óptimo de computadoras cuánticas basadas en espintrónica; algunos son:

1. Sólidos Cuánticos.
  - Heteroestructuras semiconductoras a capas.
  - Anillos Cuánticos.
  - Hilos Cuánticos
  - Puntos Cuánticos.
2. Meta-Materiales.
  - Grafeno.
  - Siliceno, Germaneno
  - Aislantes Topológicos.

En las secciones a continuación, presentamos un estudio de varias fenomenologías para nano-hilos(cinta) cuánticos, en sistemas basados en semiconductores(grafeno mono-capa).

## 2 Nano-hilo semiconductor

### 2.1 Sistema Físico

Considérese una heteroestructura semiconductor III-V donde uno de sus compuestos se ha dopado tipo  $p$ , [ver Fig. 1(a)]. Un esquema del perfil de la banda de valencia se muestra en la Fig. 1 (b). En el mínimo de energía que se forma debido al dopaje modulado (interfaz de la heterojuntura  $(Si)AlAs/GaAs/InGaAs$ ), queda confinado un gas de huecos bidimensional en la dirección de crecimiento, dirección  $z$  en lo adelante, pero libre en el plano perpendicular  $[xy]$ . Para llevar este sistema a un gas de huecos Q1D (Q1DHG), siguiendo un mecanismo similar al utilizado obtener gases de electrones Q1D [14, 15], se colocan dos barras metálicas –potenciales repulsores–,  $[A$  y  $B$  en la Fig. 1(a)] sobre la heteroestructura de manera que los huecos queden confinados en la dirección  $x$  [ver Fig. 1(a)]. Tendremos entonces un sistema tipo hilo cuántico a lo largo de la dirección  $y$  (dirección de movimiento en lo adelante) cuya sección transversal se encuentra en el plano  $[xz]$ .

Si sobre la capa de  $(Si)AlA$ , se coloca un electrodo  $V_g$  [paralelepípedo gris transparente en la Fig. 1(a)], el campo eléctrico modificará localmente el perfil de la banda de valencia como se muestra en la Fig.1(b), y como consecuencia, surge una barrera de potencial [ver Fig.1(c)] en la dirección de movimiento. Con el dispositivo propuesto, pretendemos similar al SFET de Datta y Das, sólo que en nuestro caso los portadores son huecos y el canal de transporte es Q1D. El uso exitoso de voltajes de compuerta, para “sintonizar” la energía de Fermi, generar barreras de potencial y manipular la SOI en sistemas de baja dimensionalidad –incluido el grafeno–, ha sido documentado ampliamente en la literatura [28, 29].

En resumen, los huecos se moverán por un nano-hilo cuántico a lo largo de la dirección  $y$  [representado a color verde en la Fig.1(a)], bajo SOI-R en la región espacial donde se encuentra la barrera de potencial. Para estudiar este sistema, nos hemos propuesto el siguiente *Gedanken Experiment*: en el fondo de un pozo cuántico infinito, ubicado en la interfaz de la heteroestructura  $(Si)AlAs/GaAs/InGaAs$  [ver la Fig.1(a)], colocamos el 1DHGWP en régimen de subbandas desacopladas, y lo hacemos evolucionar con cierta polarización inicial del espín (proporcionada por un ferromagnético fuente). Posteriormente, consideramos la interacción del 1DHGWP con un obstáculo dispersor de espesor  $L_b$ , que involucra una barrera de potencial y la SOI-R.

## 2.2 Modelo Teórico

Para describir la dinámica de los huecos sin considerar la SOI-R partimos del modelo Kohn-Luttinger [30] escribiendo el hamiltoniano en la base  $|hh_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}}\rangle, |lh_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}}\rangle, |lh_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}}\rangle, |hh_{\frac{3}{2},-\frac{3}{2}}\rangle$  de la forma [31]:

$$\hat{H}_{KL} = \begin{bmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & 0 \\ H_{12}^* & H_{22} & 0 & -H_{13} \\ H_{13}^* & 0 & H_{22} & H_{12} \\ 0 & -H_{13}^* & H_{12}^* & H_{11} \end{bmatrix}. \quad (2)$$

En la expresión (2) se considerarán únicamente los términos de la diagonal principal. Esta aproximación es válida si se desprecia la no-parabolicidad de las bandas debido al acoplamiento entre ellas. Dicho esto podemos escribir hamiltonianos independientes para cada especie de huecos:

$$\hat{H}_0^{hh} = \left[ \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_+^\mu \hat{k}_T^2 + \gamma_-^\nu \hat{k}_z) + V(r) \right] I_2, \quad (3)$$

$$\hat{H}_0^{lh} = \left[ \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_-^\mu \hat{k}_T^2 + \gamma_+^\nu \hat{k}_z) + V(r) \right] I_2, \quad (4)$$

donde  $I_2$  es la matriz identidad ( $2 \times 2$ ),  $\gamma_\pm^\mu = (\gamma_1 \pm \gamma_2)$  y  $\gamma_\pm^\nu = (\gamma_1 \pm 2\gamma_2)$ , con  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  los parámetros empíricos de Luttinger [31],  $\hat{k}_T = \hat{k}_x e_x + \hat{k}_y e_y$  el operador *cuasi-momentum* transversal a dirección de crecimiento.  $V(r) = V_{AB}(x) + V(y) + V_H(z)$ , donde  $V_{AB}(x)$  representa el potencial de confinamiento dado por las barras A y B que modelamos parabólico:  $V_{AB}(x) = \frac{1}{2} m_0 \omega^2 x^2$ , donde  $\omega^2$  es un parámetro que caracteriza la curvatura del potencial,  $V(x)$  representa la barrera de potencial debido al electrodo  $Vg$  que tomaremos arbitraria en general, y  $V_H(z)$  representa potencial de confinamiento dado por el dopamiento en heteroestructura que modelaremos como un pozo triangular infinito:  $V_H(z) = eFz$ , con  $F$  el campo eléctrico producto de la concentración de cargas. Nótese que los hamiltonianos resultantes aún albergan efectos de la anisotropía de las bandas *i. e.*,  $\gamma_\pm^\mu \neq \gamma_\mp^\nu$ .

La parte correspondiente a la SOI-R en el caso de huecos la expresamos a partir de modelos obtenidos para el caso Q2D [8, 10]:

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}}^{hh} = -i\alpha_{hh} \left[ \frac{\hat{k}_-^2}{\hat{k}_+} \sigma_+ - \frac{\hat{k}_+^2}{\hat{k}_-} \sigma_- \right] - i\beta_{hh} [\hat{k}_-^3 \sigma_+ - \hat{k}_+^3 \sigma_-], \quad (5)$$

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}}^{lh} = i\alpha_{lh} [\hat{k}_- \sigma_+ - \hat{k}_+ \sigma_-], \quad (6)$$

donde  $\hat{k}_\pm = \hat{k}_x \pm i\hat{k}_y$  y  $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ , con  $\sigma_{x,y}$  las matrices de Pauli y  $\alpha, \beta$  parámetros que caracterizan la intensidad de la SOI-R y dependen en general de la asimetría del potencial de confinamiento, *i. e.*, del dopaje modulado y el campo eléctrico externo.

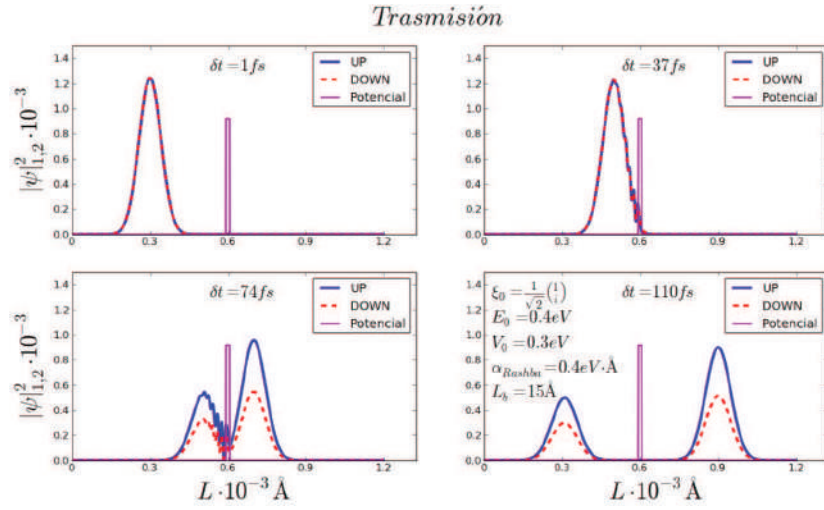


Fig. 2: Dispersión de las componentes espinoriales del paquete de ondas incidente cuando interactúa con el obstáculo dispersor  $\mathbf{V}_g$ . Este caso corresponde a la trasmisión del paquete, i.e., para la energía inicial del paquete mayor que el potencial de la barrera, en los instantes inicial-cerca-interactuando-final.

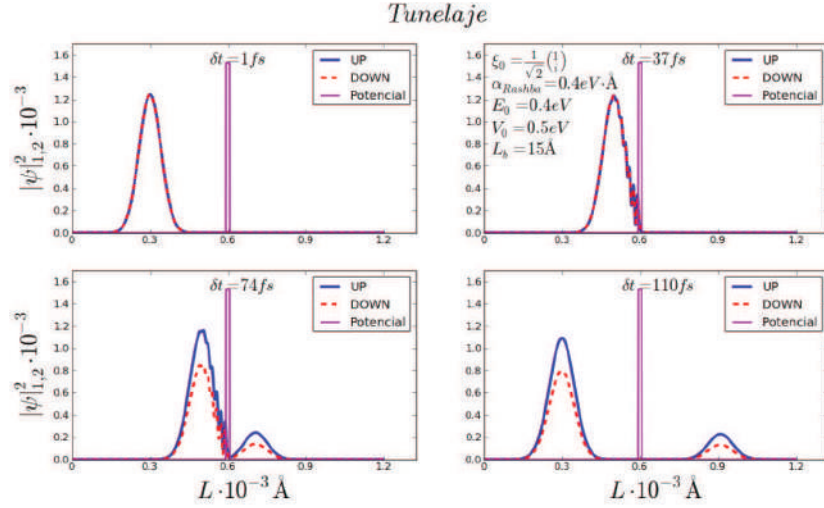


Fig. 3: Dispersión de las componentes espinoriales del paquete de ondas incidente cuando interactúa con el obstáculo dispersor  $\mathbf{V}_g$ . Este caso corresponde al tunelaje del paquete, i.e., para la energía inicial del paquete menor que el potencial de la barrera, en los instantes inicial-cerca-interactuando-final.

Aproximaremos las expresiones (5) y (6) al caso puramente unidimensional (a lo largo de la dirección  $y$ ) sustituyendo  $\hat{k}_x$  por su valor esperado. Puesto que el potencial de confinamiento en  $x$  es parabólico se puede demostrar que  $\langle \hat{k}_x \rangle = 0$ . De esta manera tendremos

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}}^{hh} = (\alpha_{hh}\hat{k}_y + \beta_{hh}\hat{k}_y^3)\sigma_x \quad (7)$$

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}}^{lh} = \alpha_{lh}\hat{k}_y\sigma_x. \quad (8)$$

### 2.3 Transporte Cuántico dependiente del espín

Resolvemos así el problema del transporte de huecos en el sistema físico en cuestión, incluyendo el obstáculo dispersor, tal como se ha visualizado en nuestro *gedanken experiment*. Se mostrará explícitamente el caso de huecos pesados, el caso de huecos ligeros se resuelve análogamente. El hamiltoniano para huecos pesados (a  $\kappa_T = 0$ ) queda escrito como

$$\hat{H}^{hh} = \begin{bmatrix} \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m_0} \gamma^V + V(y) & \alpha_{hh}\hat{k}_y + \beta_{hh}\hat{k}_y^3 \\ \alpha_{hh}\hat{k}_y + \beta_{hh}\hat{k}_y^3 & \frac{\hbar^2 \hat{k}_y^2}{2m_0} \gamma^V + V(y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} H_{11}^{hh} & H_{12}^{hh} \\ H_{21}^{hh} & H_{22}^{hh} \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Por lo tanto, la ecuación completa de Schrödinger  $\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$ , toma la forma

$$\begin{pmatrix} B_{hh}\hat{k}_y^2 + V(y) & \alpha_{hh/lh}\hat{k}_y + \beta_{hh/lh}\hat{k}_y^3 \\ \alpha_{hh/lh}\hat{k}_y + \beta_{hh/lh}\hat{k}_y^3 & B_{hh}\hat{k}_y^2 + V(y) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \quad (10)$$

### 2.4 Esquema en diferencias finitas: Crank-Nickolson

Mediante el método de Crank-Nickolson [32] se puede obtener fácilmente el operador de evolución temporal asociado a la ecuación (10) en su forma discreta (variable espacial:  $j$ , variable temporal:  $n$ )

$$\frac{(\hat{H}_j \psi_j^{n+1} + \hat{H}_j \psi_j^n)}{2} = \frac{i\hbar}{\delta t} (\psi_j^{n+1} - \psi_j^n), \quad (11)$$

la cual re-escribimos en la representación de Cayley-Goldberg [33]

$$\left( I + \frac{i\hbar}{2\delta t} \hat{H}_j \right) \psi_j^{n+1} = \left( I - \frac{i\hbar}{2\delta t} \hat{H}_j \right) \psi_j^n, \quad (12)$$

para finalmente obtener

$$\psi_j^{n+1} = \left( \frac{I_2 - \frac{i\hbar}{2\delta t} \hat{H}_j}{I_2 + \frac{i\hbar}{2\delta t} \hat{H}_j} \right) \psi_j^n \rightarrow \psi_j^{n+1} = \left( \frac{2}{I_2 + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H}_j} - I_2 \right) \psi_j^n. \quad (13)$$

Se expresa en una fórmula de recurrencia la relación de las funciones de onda entre un instante y el instante anterior

1. Haciendo  $\phi_j^n = \left( \frac{2}{I_2 + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H}_j} \right) \psi_j^n$ , obtenemos la siguiente relación de recurrencia:
2.  $\psi_j^{n+1} = \phi_j^n - \psi_j^n$
3. Para  $n = 1$ ,  $\psi_j^1 = \phi_j^0 - \psi_j^0, \forall j$
4.  $\phi_j^0 = \left( \frac{2}{I_2 + \frac{i\delta t}{2\hbar} \hat{H}_j} \right) \psi_j^0$
5.  $\psi_j^0 \Rightarrow$  **"Paquete de ondas gaussiano"**
6. Se realiza el mismo procedimiento para  $n = 2, 3, 4, \dots, N$

Cuando llegamos al paso  $N$ , se obtiene la solución numérica aproximada de la función de onda en todo el espacio y para todo instante. El proceso descrito hasta el momento se puede extender análogamente al caso de huecos ligeros.

Para calcular los coeficientes de transmisión y reflexión podemos utilizar las siguientes expresiones integrales:

$$T_{\uparrow,\downarrow} = \frac{\int_{y_b+L_b}^L |\psi_{\uparrow,\downarrow}(y, t = \infty)|^2 dx}{\int_0^L [|\psi_{\uparrow}(y, t = 0)|^2 + |\psi_{\downarrow}(y, t = 0)|^2] dx} \quad (14)$$

$$R_{\uparrow,\downarrow} = \frac{\int_0^{y_b} |\psi_{\uparrow,\downarrow}(y, t = \infty)|^2 dx}{\int_0^L [|\psi_{\uparrow}(y, t = 0)|^2 + |\psi_{\downarrow}(y, t = 0)|^2] dx}, \quad (15)$$

expresadas numéricamente a través de la regla de los trapecios.

## 2.5 Discusión de resultados

Una vez obtenidas las soluciones aproximadas de las funciones de onda, a través de los métodos numéricos descritos en la SubSec.2.4, pasamos a graficar la dispersión del paquete de ondas incidente para dos casos: Transmisión [ver Fig.2] y Tunelaje [ver Fig. 3]. Los resultados que mostramos corresponden al caso de huecos pesados para una concentración  $n \geq 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ , lo que equivale a un valor de  $\alpha_{hh} = 0.4 \text{ eV\AA}$  y  $\beta_{hh} = 0.05572 \text{ eV\AA}^3$ , este valor depende en general de la concentración de

portadores y del voltaje aplicado en  $V_g$ . El caso de huecos ligeros exhibe un comportamiento similar, menos marcado por la SOI-R debido a que  $\alpha_{hh} = 0.0019 \text{ eV\AA}$  a la misma concentración y no lo mostramos en el presente capítulo. Los restantes parámetros se especifican en las figuras.

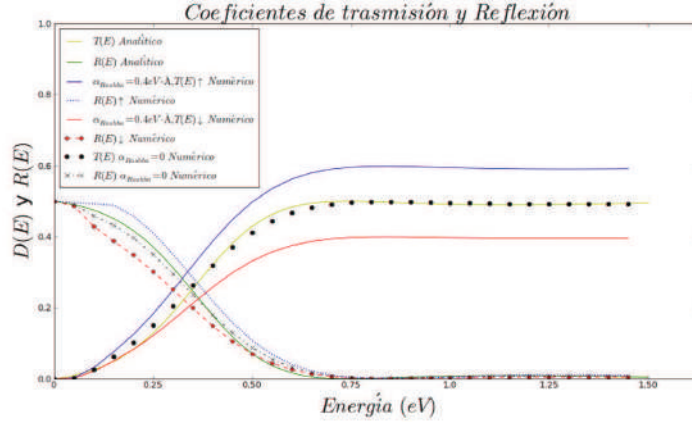


Fig. 4: Coeficiente de transmisión y reflexión para una barrera de potencial  $V_g = 0.3 \text{ eV}$  y una polarización  $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ .

En la Figura 4, se muestran los coeficientes de transmisión y reflexión analíticos y numéricos. Se aprecia que nuestro modelo numérico (círculos negros y cruces azules) se ajusta muy bien al modelo analítico [34] (línea verde clara y oscura), cuando  $\alpha_{hh} = 0$ . Además con una simple inspección de la gráfica se puede ver la conservación del flujo de probabilidad. Estas dos comprobaciones, validan suficientemente nuestro modelo.

Para el caso de  $\alpha_{hh} = 0$ , la transmisión para ambas componentes espinoriales no coinciden lo cual se debe a la constante que acompaña al término cúbico, y que es exclusivo de la subbanda de huecos pesados [ver Fig.5]. Se puede observar que entre mayor es el valor de  $\alpha_{hh}$ , mayor es el desdoblamiento de ambas componentes debido a la precesión del espín, inducida por el acoplamiento SOI-R.

Las Fig.6 y Fig.7 muestran los coeficientes de transmisión para diferentes valores altura de la barrera de potencial y diferentes polarizaciones de espín del 1DHGWP incidente, respectivamente. En la Fig. (6) a medida que aumenta el valor de  $V_g$  la curva se hace de pendiente más "suave". Por lo tanto si la energía inicial del paquete es pequeña, el desdoblamiento de las componentes espinoriales es pequeño y casi no tenemos transmisión. Observamos además que a partir de un valor energético (aproximadamente para  $E > 0.75 \text{ eV}$ ) la transmisión se satura, lo cual apunta a un comportamiento anómalo, que requerirá mayor estudio, para entender sus causas. Las curvas de la Fig.7, se obtienen variando las polarizaciones de espín del 1DHGWP



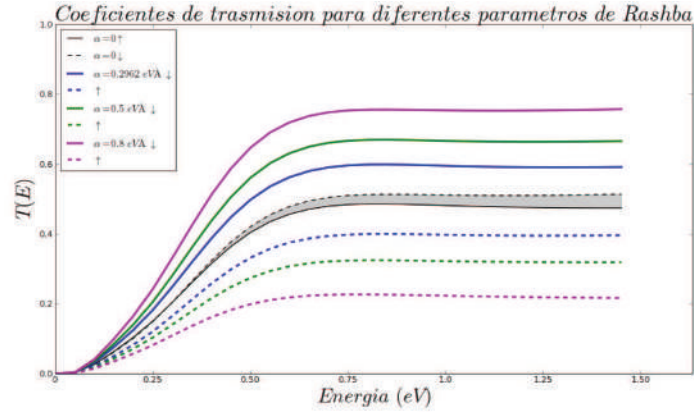


Fig. 5: Coeficiente de transmisión para diferentes valores del parámetro de acoplamiento de Rashba  $\alpha_{hh}$ . La barrera de potencial  $V_g = 0.3eV$  y la polarización inicial del paquete es  $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$ .

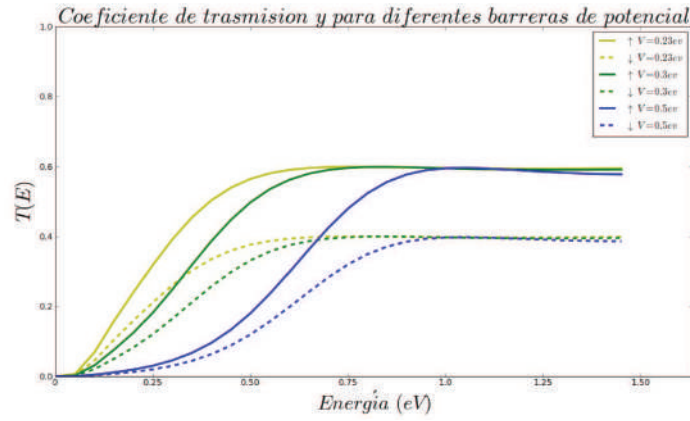


Fig. 6: Coeficiente de transmisión para diferentes valores de la barrera de potencial  $V_g$  (ver Fig. 1). La polarización inicial del paquete es  $\xi_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$  y el parámetro de Rashba  $\alpha_{hh} = 0.4 \text{ eV\AA}$ .

incidente y manteniendo fija la altura barrera de potencial, *i. e.*,  $V_g = 0.3$  eV. Se puede ver que para ciertos valores de polarización ( $\xi_{0,\uparrow(\downarrow)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1(0) \\ 0(1) \end{pmatrix}$ ) tendremos o no transmisión [ver Fig. 7].

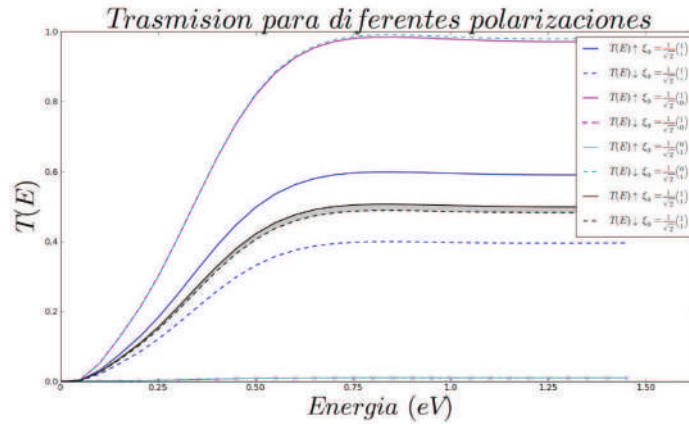


Fig. 7: Coeficiente de transmisión para diferentes polarizaciones del espín del paquete de ondas incidentes. La barrera de potencial  $V_g = 0.3$  eV y el parámetro de Rashba  $\alpha_{hh} = 0.4$  eVÅ.

### 3 Nano-cinta de grafeno

#### 3.1 Caracterización del Grafeno

El grafeno es una mono(multi)-capa de átomos de carbono ubicados en un arreglo hexagonal bi-dimensional, y es la forma básica para los alótropos de carbono [35]. Al principio era un objeto de estudio teórico, ya que se suponía ser inexistente porque una estructura plana es termodinámicamente inestable con la disminución del grosor. Sin embargo, fue demostrado por Geim y Novoselov [36] que el grafeno puede existir si se considera semi-plano (con pequeñas arrugas). En experimentos posteriores, se confirmó que sus portadores de carga eran en realidad fermiones de Dirac (pares electrón-hueco, sin masa en reposo) [37].

En 1940 aproximadamente, se argumentaba que los cristales bi-dimensionales eran termodinámicamente inestables y que no podían existir. La temperatura de fusión de películas delgadas, decrece rápidamente con el grosor, y las películas se vuelven inestables. Esto fue ciencia establecida hasta los años 2000, cuando se de-

scubrió experimentalmente el grafeno, junto con otros cristales bi-dimensionales. Estos se pueden obtener encima de substratos no-cristalinos, en suspensión líquida y como membranas suspendidas. Estos cristales demostraron tener alta calidad cristalina, y ser continuos [35, 36, 37]. Un plano atómico es un cristal bidimensional, mientras que 100 capas se considerarían como una película delgada de un material 3D. Para el caso del grafeno, la distinción entre grafito y grafeno (debido a la estructura electrónica) se da a las 10 capas. Sólo el grafeno mono-capa tiene un espectro electrónico simple: es un semiconductor de gap nulo.

Se han intentado varios métodos para formar grafeno, pero todos terminaron en crear materiales 3D con diferentes propiedades no muy útiles que no generaron suficiente atención. Hasta que recientemente se logró obtener grafeno de pocas capas, que mostró propiedades de transportes de carga con alta movilidad [36]. El crecimiento epitaxial del grafeno puede ser la única ruta viable para aplicaciones electrónicas. Muchos grupos experimentales, trabajan con muestras obtenidas por escisión micro-mecánica del grafito, la misma técnica que permitió el aislamiento del grafeno por primera vez [36, 37]. Después de perfeccionada, esta técnica provee de sistemas basados en grafeno de hasta  $100\ \mu\text{m}$ , que es suficiente para la mayoría de las investigaciones. La técnica consiste en separar la capa más externa del grafito tridimensional. Para hacer esto, todavía no se tiene un método preciso, pero las aproximaciones comunes son:

1. Un raspado fino del grafito mediante el empleo de una superficie sólida.
2. Usando una cinta adhesiva colocada sobre el grafito, se raya sobre la cinta y se desprende, haciendo que capas muy delgadas del grafito se desprendan.

El problema con el grafeno, es que al estar sobre un substrato, es muy difícil encontrarlo entre muchos pedazos de grafito, por ejemplo, el *Scanning Probe Microscope* (SPM) tiene muy baja resolución para buscar grafeno, mientras que el *Scanning Electron Microscope* (SEM) es inadecuado debido a la ausencia de señales claras para el número de capas atómicas que se necesita. El ingrediente crítico, fue observar que el grafeno se vuelve visible a la detección, en un microscopio óptico si se coloca encima de una oblea de *Si* con un grosor definido de dióxido de silicio ( $\text{SiO}_2$ ). Hasta la fecha, la configuración más confiable para configurar dispositivos basados en: grafeno bi-dimensional mono-capa (2DMLG), pocas capas de grafeno (FLG) y nano-tubos, es el  $\text{SiO}_2$  aislante, comúnmente acoplado a una oblea de silicio [38].

### 3.2 Estructura Cristalina y Espacio Inverso

La estructura cristalina del 2DMLG, es una red hexagonal periódica semi-plana, parecida a un panal de abejas [ver Fig.8(a)]. La estructura específica del 2DMLG, que reproduce el sistema usado para este estudio, puede ser descrita por una red triangular con base de dos átomos por celda unitaria. De acuerdo a esto, los vectores de la celda unitaria son  $\mathbf{a}_1 = a_0(1, 0)$  y  $\mathbf{a}_2 = a_0/2(1, \sqrt{3})$  [35], que generan los vec-

tores de la Zona de Brillouin (BZ), que están dados por  $\mathbf{b}_1 = 4\pi/(2a_0\sqrt{3})(\sqrt{3}, -1)$  y  $\mathbf{b}_2 = 4\pi/(a_0\sqrt{3})(0, 1)$ , con  $a_0 = \sqrt{3}a$  donde  $a \approx 1.42 \text{ \AA}$ , es la constante de la red de carbono. Podemos encontrar los puntos de Dirac, ubicados en los siguientes pares de coordenadas  $(k_x, k_y)$  de la red recíproca:  $K = (0, 0)$ ; y  $K' = \pm(8\pi/3a_0, 0)$  [ver Fig.8(b)], son conocidos como "puntos de Dirac". En cuanto a su estructura física molecular, el grafeno es una forma alótropa del carbón, es una estructura nano-métrica, bidimensional, de átomos de carbono cohesionados en una superficie ligeramente plana, con ondulaciones de un átomo de espesor, con una apariencia semejante a una capa de un panal de abejas ya que tiene una configuración atómica hexagonal formada por subredes **A** y **B** [ver Fig.8(a)]. Los alótropos del carbono se clasifican por su dimensionalidad como:

- Cero-dimensionales - fullerenos.
- Uni-dimensionales - nanotubos.
- Bi-dimensionales - grafeno.
- Tri-dimensionales - diamante, grafito.

Los tres puntos de alta simetría:  $\Gamma$ , M y K( $K'$ ), forman un triángulo que se utiliza para calcular las relaciones de dispersión de la energía. El rombo observado en la Figura 8(a), es la celda unitaria del espacio directo. Por otro lado, la Figura 8(b), es la BZ que pertenece a la red recíproca en el dominio de las frecuencias. La importancia de la BZ, radica en la descripción de las ondas que se propagan en un medio periódico, las cuales pueden ser descritas a partir de ondas de Bloch, que tienen la periodicidad de la red.

Los vectores  $\delta$  que vemos en la Figura 8(a), están dados por

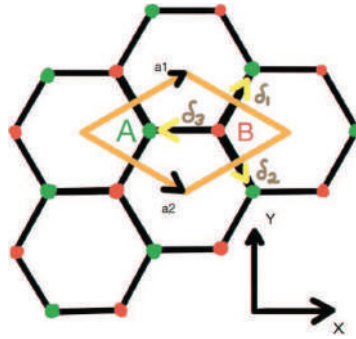
$$\delta_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}), \delta_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}), \delta_3 = -a(1, 0), \quad (16)$$

mientras que los seis vectores vecinos segundos más cercanos son:

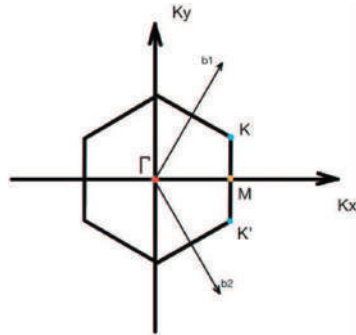
$$\delta'_1 = \pm\mathbf{a}_1, \delta'_2 = \pm\mathbf{a}_2, \delta'_3 = \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1). \quad (17)$$

Una evidencia de la calidad en las propiedades electrónicas en el grafeno, es el transporte de carga el cual puede ser sintonizado continuamente entre electrones y huecos en altas concentraciones del orden de  $10^{13} \text{ cm}^{-2}$  y sus movilidades pueden exceder los  $15 \times 10^3 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$  en condiciones ambientales. Incluso las movilidades observadas dependen muy poco de la temperatura, haciendo que en gran parte sólo dependa de la impureza, la cual se puede mejorar en gran medida. Otra prueba de la calidad electrónica es el efecto Hall cuántico, que puede ser observado en el grafeno incluso a temperatura ambiente [35, 36, 37].

Otra razón importante para el interés en el grafeno, es la particular naturaleza de sus portadores de carga. Éstos imitan partículas relativistas y son más fáciles de describir partiendo de la ecuación de Dirac, en lugar de la ecuación de Schrödinger. Es oportuno subrayar, que el movimiento del par electrón-hueco alrededor de los átomos de carbono con desplazamientos entre sub-celdas del tipo A y B [ver la Fig.8(a)], no es un efecto relativista. Sin embargo, la interacción con el potencial



(a) Celda unitaria del grafeno, donde  $\mathbf{a}_1$  y  $\mathbf{a}_2$  son los vectores unitarios,  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  son las subredes y  $\delta_i = 1, 2, 3$  son los vectores que apuntan a las subredes vecinas más cercanas.



(b) Zona de Brillouin correspondiente, los conos de Dirac se encuentran en los puntos  $K$  y  $K'$ .  $\Gamma$ ,  $M$  y  $K(K')$  son puntos de alta simetría.

Fig. 8: Celda unitaria y recíproca del grafeno.

periódico de la red del grafeno, nos conduce a unas cuasi-partículas –que a bajas energías–, son descritas por la ecuación de Dirac, y que tienen una rapidez de luz efectiva  $v_F \approx \frac{c}{300} \approx 10^6 m s^{-1}$  (velocidad de Fermi). Estas cuasi-partículas llamadas fermiones de Dirac (sin masa en reposo), pueden ser vistas como electrones (huecos) que han perdido su masa en reposo o como neutrinos que adquirieron carga de electrón. Cabe subrayar, que algunos eventos anómalos, *e. g.* el tunelaje anti-Klein, ocurre para fermiones con quiralidad definida, que se transforman en huecos con masa efectiva finita dentro del QB [39]. Lo anterior, conduce a que tales huecos masivos, posean *momentum* imaginario, y a la no conservación del índice de la quiralidad del pseudo-espín dentro-fuera de la barrera [39]. El grafeno obtenido experimentalmente, provee un banco de pruebas muy atractivo, para la observación

de los fenómenos de electrodinámica cuántica, dadas las características físicas mencionadas brevemente arriba.

### 3.3 Sistema Físico

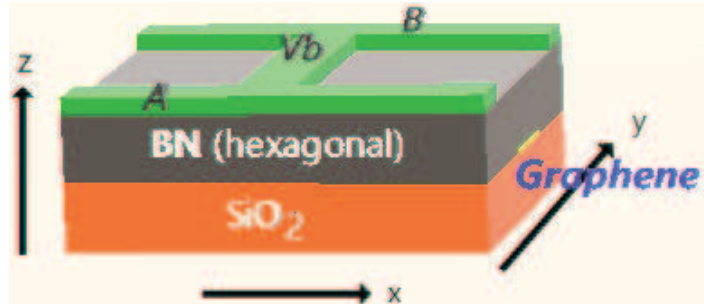


Fig. 9: Representación esquemática del dispositivo propuesto basado en grafeno. La nano-cinta (franja amarilla) se “imprime” litográficamente, a partir del confinamiento electrostático de los fermiones de Dirac a una región Q1D (franja amarilla), producido por las placas A y B, en un 2DMLG, embebido entre nitruro de boro hexagonal (*hBN*, gris oscuro) y el sustrato aislante de dióxido de silicio (*SiO<sub>2</sub>*, anaranjado). El electrodo de compuerta  $V_b$  genera la barrera de potencial en la nano-cinta de grafeno, que es a la vez la región donde estamos considerando la acción del acoplamiento SOI-R sobre los fermiones de Dirac.

En el dispositivo bajo estudio [ver Fig.9], consideramos un 2DMLG, embebido entre nitruro de boro hexagonal (*hBN*, gris oscuro) y el sustrato aislante de dióxido de silicio (*SiO<sub>2</sub>*, anaranjado). Los fermiones de Dirac, son confinado electrostáticamente por los electrodos de compuerta representados por las placas A y B (verde) a un hilo cuántico Q1D y estudiamos la evolución temporal de un 1DHGWP de fermiones de Dirac, que va de un lado al otro de la nano-cinta pasando por el QB [ver Fig.10]. En la presente aproximación, no consideramos el acoplamiento SOI-R, ni la acción de un potencial dispersor en la región de espacio libre (fuera del QB) y sólo observamos que el paquete se mueva adecuadamente a lo largo del canal cuántico Q1D. Después observamos qué sucede con el 1DHGWP, durante su interacción con el QB, cuya región adicionalmente presenta acoplamiento del tipo SOI-R.

Experimentos de SEM muestran invariablemente, que el 2DMLG depositado sobre *SiO<sub>2</sub>/Si*, reproduce sólo parcialmente la morfología del sustrato aislante –sin replicarlo rígidamente–, dando lugar entonces a la aparición de regiones localmente espaciadas de fuerte perturbación de la simetría hexagonal de la red del grafeno [38]. Lo anterior, es el origen de la SIA, que a su vez genera el acoplamiento SOI-R en el 2DMLG, con un carácter marcadamente localizado. En nuestro dispositivo, asumi-

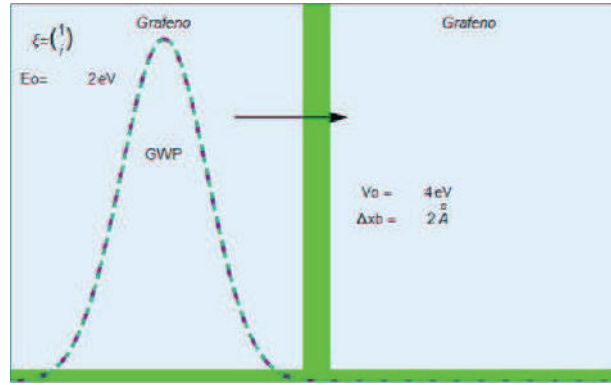


Fig. 10: Simulación del 1DHGWP bajo estudio en su estado inicial, que evoluciona en el espacio libre en el sentido indicado por la flecha horizontal negra. Nótese que en ausencia de acoplamiento SOI-R, ambas componentes  $A$  (puntos rojos) y  $B$  (trazos verdes) del pseudo-espín aparecen degeneradas. El rectángulo vertical (verde) representa el QB, cuyo potencial  $V_0 = 4 \text{ eV}$ , se anula en el resto del espacio. El espesor del QB, lo asumimos como  $\Delta x_b = 2 \text{ \AA}$ , mientras que la polarización del pseudo-espín incidente  $\xi$ , asimismo como la energía de partida  $E_0$  del 1DHGWP viajero, aparecen indicadas.

mos que tales zonas de SIA, se encuentran en la región del QB. La configuración 2DMLG/ $\text{SiO}_2$ / $\text{Si}$ , es ampliamente usada en la actualidad [38]. Por otro lado, se ha reportado recientemente que el  $h\text{BN}$  acopla con el 2DMLG, mejor que el resto de los candidatos, debido a que las diferencias de ambas redes, son apenas del 1.5%. De esta manera, se garantizan las propiedades morfológicas, ópticas y electrónicas del 2DMLG [40].

### 3.4 Modelo Teórico

Una forma aproximada para calcular las propiedades del grafeno, es a través del método *tight binding*. Es útil porque preserva la simetría exacta del sistema. Los fermiones de Dirac, pueden ser descritos por medio de ondas de Bloch. Para construir la matriz hamiltoniana, se requiere de una base de funciones, que en este caso deben ser soluciones de la ecuación de Schrödinger que incluya la periodicidad del sistema. En aras de mayor completitud y con fines didácticos, presentamos someramente el hamiltoniano *tight binding* para fermiones de Dirac en el grafeno, considerando que estos pueden brincar a los átomos vecinos más cercanos y segundos más cercanos [35]

$$\hat{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left( a_{\sigma,i}^\dagger b_{\sigma,j} + h.c. \right) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left( a_{\sigma,i}^\dagger a_{\sigma,i} + b_{\sigma,j}^\dagger b_{\sigma,j} + h.c. \right), \quad (18)$$

siendo  $a_{\sigma,i}$  ( $a_{\sigma,i}^\dagger$ ) y  $b_{\sigma,i}$  ( $b_{\sigma,i}^\dagger$ ) los operadores de creación (aniquilación) en la región de la subred **A** y la subred **B**,  $\sigma$  es el espino ( $\sigma = \uparrow, \downarrow$ ),  $t$  es la energía de salto a los vecinos más cercanos (saltando entre diferentes subredes) y  $t'$  es la energía de salto a los segundos vecinos cercanos (saltando en la misma red). Las bandas de energía derivadas de (18) tienen la forma

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k})} - t' f(\mathbf{k}), \quad (19)$$

$$f(\mathbf{k}) = 2 \cos(\sqrt{3}k_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x a\right), \quad (20)$$

donde el signo  $+$  aplica para la banda de electrones y el  $-$  para la banda de huecos. Queda claro que si  $t' = 0$  entonces el espectro energético es simétrico.

Cerca de los puntos de Dirac el Hamiltoniano para el grafeno prístino [Revisar apéndice 5.1] se escribe como [36]

$$\hat{H}_G = v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{P}, \quad (21)$$

con  $\boldsymbol{\sigma} = \hat{\sigma}_x \hat{i} + \hat{\sigma}_y \hat{j}$ , siendo las matrices de espín Pauli  $\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ , y  $\mathbf{P} = \hat{P}_x \hat{i} + \hat{P}_y \hat{j}$ , es el vector operador del momento lineal con sus componentes  $\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ,  $\hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}$ ; y finalmente las bandas de energía quedarían como:

$$E = \pm |\hbar \mathbf{k}| v_F. \quad (22)$$

Para que estos resultados sean equivalentes a los obtenidos en la electrodinámica cuántica relativista de Dirac, se considera que los fermiones de Dirac se comportan como partículas sin masa en reposo. Se puede demostrar, a partir de la relación de dispersión lineal (22) que los electrones siempre van acompañados de los huecos por lo que los portadores de cargas eléctricas y de espín en el grafeno, siempre aparecen en pares llamándosele al conjunto cuasi-partícula. Otra característica importante es que los fermiones de Dirac en la subred **A** tienen una dirección preferencial de su espín (proyectándose en la dirección de propagación) mientras que los espines en la subred **B** se encuentran completamente opuestos, a esto se le llama quiralidad. Por esta razón se les denomina pseudoespines y al conjunto total pseudoespino, cuya forma es

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A \\ \Psi_B \end{pmatrix} \quad (23)$$



### 3.4.1 Hamiltoniano híbrido: Acoplamiento Espín-órbita

La interacción del grado de libertad rotacional de un electrón con su grado de libertad de traslación orbital, causa un efecto electromagnético relativista. En el caso de los materiales espintrónicos, la estructura de bandas se ve afectada, produciendo por consecuencia, propiedades que pueden ser benéficas o perjudiciales dependiendo de la aplicación buscada. La SOI a nivel atómico, es la antesala de la inclusión del término correspondiente en el hamiltoniano no-relativista de Dirac [41]. Llegando a la siguiente expresión

$$\hat{H}_{\text{soi}} = -\frac{\hbar}{4m_0^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \times (\nabla V), \quad (24)$$

donde  $m_0$  es la masa de un electrón libre,  $c$  es la velocidad de la luz,  $\mathbf{p}$  es el operador momento,  $V$  es el potencial de Coulomb del núcleo atómico, y  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  es el vector de las matrices de espín de Pauli.

Se ha discutido ampliamente en la literatura, la necesidad de un entendimiento detallado de los fenómenos relacionados a la SOI en sistemas 2D, tanto para la investigación fundamental misma, como para las aplicaciones en dispositivos electrónicos y en este caso espintrónicos [25, 35]. También se ha demostrado que el comportamiento de la estructura de bandas de un material 2D, depende de la simetría del potencial de confinamiento y de la partición de espín resultante de la banda de valencia [42]. Datta y Das [5] propusieron un dispositivo, donde se puede controlar y/o detectar orientaciones específicas del espín en una corriente, con ayuda de contactos magnetizados. Una de las contribuciones a la manipulación del espín sin un campo magnético externo, es el efecto Rashba [4]. En este caso, es la acción de un campo magnético efectivo sobre el espín de los portadores de carga confinados, la que produce los resultados esperados.

En nuestro modelo teórico-matemático para el estudio de la dinámica de los fermiones de Dirac en un sistema 1D de MLG, usaremos la ecuación completa de Schrödinger en forma discreta, la cual ha sido empleada exitosamente en la mencionada dimensionalidad [42]

$$(\hat{H}\Psi(y,t))_j^n = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(y,t)_j^n, \quad (25)$$

donde  $n$  es la discretización del tiempo y  $j$  es la discretización del espacio, de forma que  $t \rightarrow \delta t$ ,  $y \rightarrow j\delta y$ ;  $n = 1, 2, \dots, N$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$ . El hamiltoniano híbrido a discretizar, que describe la fenomenología del dispositivo de la Fig.9, va a estar definido de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \hat{H}_G + V(y)I_2 + \hat{H}_{\text{soi-R}}, \quad (26)$$

donde  $\hat{H}_G$  es el hamiltoniano del grafeno pístino presentado por (21) en la Sec.3.4;  $V(y)$  es el potencial rectangular e independiente del tiempo en una dimensión, y finalmente  $\hat{H}_{\text{soi-R}}$  es el hamiltoniano que incorpora el acoplamiento SOI-R [10].

La solución para la ecuación (26), la proponemos en la forma

$$\Psi(y,t) = \hat{U}(t,t_0)\Psi(y,t_0), \quad (27)$$

siendo  $\hat{U}(t, t_0)$  el operador de evolución temporal del [Revisar apéndice 5.2], que definimos sobre bases generales como:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{\frac{i}{\hbar} \delta t \hat{H}}, \quad (28)$$

y que representamos a los efectos del cálculo numérico, a través de la aproximación de Cayley-Goldberg [33]

$$\hat{U}(t, t_0) = \frac{2\mathbf{I}_2}{I_2 + \frac{1}{2} \frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}} - I_2, \quad (29)$$

para después sustituir en (27), para obtener

$$\Psi(y, t) = \Phi(y, t_0) - \Psi(y, t_0), \quad (30)$$

y llegar finalmente a que:

$$\Phi(y, t_0) = \frac{2\Psi(y, t_0)}{I_2 + \frac{1}{2} \frac{i\delta t}{\hbar} \hat{H}}. \quad (31)$$

Desarrollando el álgebra correspondiente y tomando en cuenta el resultado obtenido del apéndice 5.3; llegamos al siguiente resultado

$$2\Psi_j^n = -C\Phi_{j-1}^n + [I_2 + DV_j I_2]\Phi_j^n + C\Phi_{j+1}^n, \quad (32)$$

donde  $C = \frac{v_f \delta t \sigma_y}{4\delta y}$  y  $D = \frac{i\delta t}{2\hbar}$ . Este resultado hay que separarlo en sus componentes, sumándolas y restándolas convenientemente

$$2(\Psi_{A,j}^n \pm \Psi_{B,j}^n) = \mp C \frac{E_{j-1}^n}{F_{j-1}^n} + [1 + DV_j] \frac{E_j^n}{F_j^n} \pm C \frac{E_{j+1}^n}{F_{j+1}^n}, \quad (33)$$

donde  $E_j^n = \phi_{A,j}^n + \phi_{B,j}^n$  y  $F_j^n = \phi_{A,j}^n - \phi_{B,j}^n$ . La ecuación (33), es un sistema de ecuaciones que se resuelve numéricamente para obtener los valores de  $\Phi_j^n$ , de manera que podamos utilizar cíclicamente la ecuación (30) en su forma discreta, hasta llegar a  $N$  pasos, o sea:

$$\Psi_j^{n+1} = \Phi_j^n - \Psi_j^n. \quad (34)$$

Es necesario imponer las condiciones de frontera, para que el 1DHGWP evolucione correctamente tanto pen el espacio libre, como en presencia de las interacciones mencionadas anteriormente, *i. e.*,

$$\Psi_{j=1}^{n=1} = \Psi_{j=J}^{n=1} = 0. \quad (35)$$

Hemos tomado en cuenta, el hecho relevante de la detección experimental de  $hh$ , con masa efectiva  $m_{hh} \approx 0.1m_o$  *via* oscilaciones Shubnikov-de Haas, en sistemas de FLG [43]. A partir de lo anterior y agregando la reciente predicción de tunelaje anti-Klein en 2DMLG, donde los autores concluyen que los fermiones de Dirac con

quiralidad definida, se transforman en huecos con masa efectiva finita dentro de una barrera [39], asumimos que los términos momentum-dependientes del bien conocido hamiltoniano efectivo Rashba para  $hh$ , en heteroestructuras semiconductoras Q1D [10, 44], pueden ser extendidos a la nano-cinta de MLG. Entonces tenemos que

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}} = -i\alpha \left[ \frac{\hat{k}_-^2}{\hat{k}_+} \sigma_+ - \frac{\hat{k}_+^2}{\hat{k}_-} \sigma_- \right] - i\beta [\hat{k}_-^3 \sigma_+ - \hat{k}_+^3 \sigma_-], \quad (36)$$

donde  $\hat{k}_\pm = (\hat{k}_x \pm i\hat{k}_y)$  y  $\sigma_\pm = \frac{1}{2}(\sigma_x \pm i\sigma_y)$ . Después de algunos desarrollos algebraicos e igualando a cero las componentes que contienen a  $\hat{k}_y$  (no hay propagación en esa dirección), obtenemos finalmente

$$\hat{H}_{\text{SOI-R}} = (\alpha\hat{k}_y + \beta\hat{k}_y^3)\sigma_x. \quad (37)$$

También en este caso consideraremos la masa de los  $hh$ , en el hamiltoniano híbrido (26) le sumaremos el modelo Kohn-Luttinger (KL):

$$\hat{H}_{\text{KL}} = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)\hat{k}_y^2 I_2, \quad (38)$$

siendo  $\gamma_{1,2}$  los parámetros de Luttinger para el grafeno, y definiendo  $B = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2)$

Finalmente, llegamos a la expresión crucial del hamiltoniano híbrido, que considera los efectos de interés en el sistema bajo estudio, con el presupuesto de las aproximaciones descritas arriba, *i. e.*,

$$\hat{H} = (B\hat{k}_y^2 + V(y))I_2 + (\alpha\hat{k}_y + \beta\hat{k}_y^3)\sigma_x + v_F\hbar\hat{k}_y\sigma_y, \quad (39)$$

donde Fourier transformamos  $\hat{k}_y = -i\frac{\partial}{\partial y}$ . Repetiremos el proceso descrito anteriormente, usando nuevamente las ecuaciones (30) y (31), modificadas adecuadamente [ver el apéndice 5.4]. Luego de los desarrollos correspondientes sobre (33), obtenemos

$$2(\psi_{A,j} + \psi_{B,j}) = FAG_{j-1} - \frac{FE}{3}K_{j-1} + (1+FB)G_j - \frac{FE}{2}K_j + FCG_{j+1} + FEK_{j+1} + FDG_{j+2} - \frac{FE}{6}K_{j+2}, \quad (40)$$

al restar:

$$2(\psi_{A,j} - \psi_{B,j}) = FAK_{j-1} - \frac{FE}{3}G_{j-1} + (1+FB)K_j - \frac{FE}{2}G_j + FCK_{j+1} + FEG_{j+1} + FDK_{j+2} - \frac{FE}{6}G_{j+2}, \quad (41)$$

donde  $A = -\frac{B}{\delta y^2} + \frac{i\alpha}{3\delta y} - \frac{i\beta}{\delta y^3}$ ,  $B = V(y) + \frac{2B}{\delta y^2} + \frac{i\alpha}{2\delta y} + \frac{3i\beta}{\delta y^3}$ ,  $C = -\frac{B}{\delta y^2} - \frac{i\alpha}{\delta y} - \frac{3i\beta}{\delta y^3}$ ,  
 $D = \frac{i\alpha}{6\delta y} + \frac{i\beta}{\delta y^3}$ ,  $E = \frac{\hbar v_f}{\delta y}$  y  $F = \frac{i\delta t}{2\hbar}$ .

Si sumamos las dos ecuaciones anteriores obtenemos:

$$2\psi_{A,j} = \phi_{A,j-1}\left(FA - \frac{FE}{3}\right) + \phi_{A,j}\left(1 + FB - \frac{FE}{2}\right) \\ + \phi_{A,j+1}(FC + FE) + \phi_{A,j+2}\left(FD - \frac{FE}{6}\right), \quad (42)$$

y restándolas se llega a:

$$2\psi_{B,j} = \phi_{B,j-1}\left(FA + \frac{FE}{3}\right) + \phi_{B,j}\left(1 + FB + \frac{FE}{2}\right) \\ + \phi_{B,j+1}(FC - FE) + \phi_{B,j+2}\left(FD + \frac{FE}{6}\right). \quad (43)$$

Las ecuaciones (42) y (43), son las que hay que resolver con la ayuda del método computacional que describimos a continuación.

### 3.5 Algoritmo Computacional

El código de cálculo funciona de manera que, a partir de un paquete de ondas dado, con parámetros definidos, podamos observar gráficamente cómo evoluciona éste paquete a través del tiempo en un ambiente definido.

1. Primero, definiremos las constantes que se usarán, tanto para el ambiente como para el 1DHGWP.
2. Discretizamos el potencial y el 1DHGWP [hamiltoniano (39)].
3. Construimos las matrices con las que trabaja el código (aquí se construye la matriz del sistema de ecuaciones a resolver).
4. Resolvemos el sistema de ecuaciones: (42), y (43) para toda  $j$  y evaluamos (34) para conseguir el siguiente estado discreto en el tiempo. A continuación se repite este paso para toda  $n$ .
5. Se grafican los datos y se almacenan en forma de video con formato ".avi". En el sitio de la Ref.[45], el lector puede visualizar y/o descargar ficheros multimedia con animaciones de la línea de tiempo del 1DHGWP bajo estudio. Algunas de las fenomenologías, no han sido descritas en el presente capítulo.

### 3.6 Discusión de resultados

Se logró obtener animaciones como las que se esperaban para los casos en los que incluimos la SOI-R y cuando la excluimos [Fig.11]. Es posible distinguir, cómo se

mueve el 1DHGWP a lo largo del canal Q1D de la nano-cinta [ver Fig.9]] en el espacio libre [paneles (a), (c) y (e)]. Al aplicar el acoplamiento SOI-R en la sección de la barrera, la polarización del espín cambia como se esperaba [paneles (b), (d) y (f)].

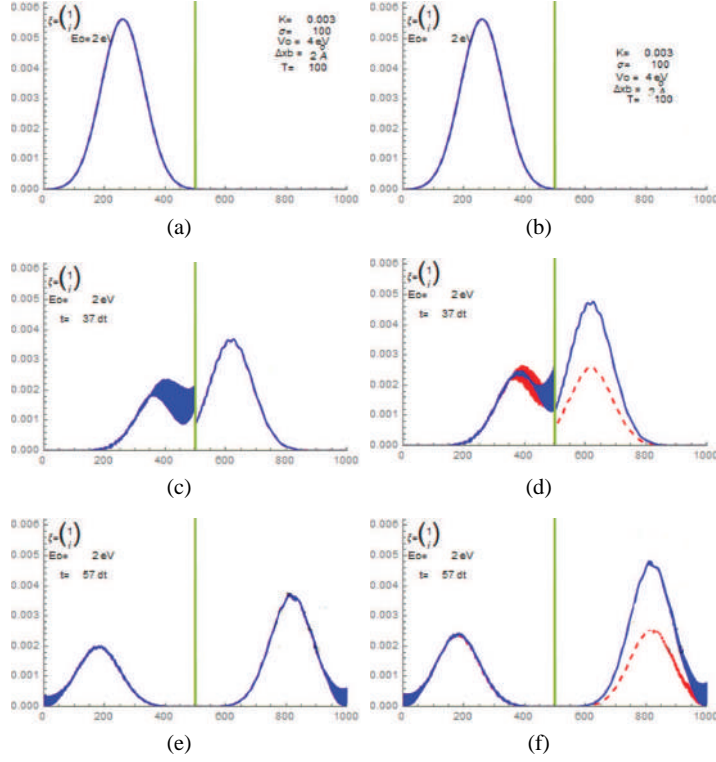


Fig. 11: Densidad de probabilidad del 1DHGWP en la dirección  $x$  en el espacio libre: sin SOI-R [paneles (a), (c) y (e)], y bajo SOI-R [paneles (b), (d) y (f)]. Tomamos:  $\alpha = 0.4 \text{ eV\AA}$   $\beta = 0.2 \text{ eV\AA}^3$ ; donde  $\xi$  es la polarización inicial del paquete incidente,  $E_0$  es la energía del paquete,  $t$  es el tiempo transcurrido,  $K$  es el vector de onda del paquete,  $\sigma$  es la dispersión del paquete,  $V_0$  es la altura del QB,  $\Delta x b$  es el ancho del QB y  $T$  es el tiempo total de la simulación.

En la obtención de las gráficas de la Figura 11], se hicieron ajustes arbitrarios al hamiltoniano del grafeno prístino (21), el cual re-escribimos de la siguiente manera

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hbar v_F \hat{k}_x & 0 \\ 0 & \hbar v_F \hat{k}_x \end{pmatrix}, \quad (44)$$

que hemos sometido a un análisis más detallado, que será publicado en otro lugar. No obstante algunas consideraciones al respecto, se presentan brevemente a continuación.

Al observar las gráficas de la Figura 12 (en ausencia del acoplamiento SOI-R), observamos como desde el inicio, el paquete de ondas se separa y parte del mismo se mueve en dirección de  $x$  mientras que la otra se va en dirección opuesta [paneles (a), (c), (e), (g) e (i)]. Cuando el 1DHGWP interactúa con el QB, parte del paquete se transmite y parte se refleja, produciendo un efecto aún mayor en la superposición de los paquetes divididos por efecto del potencial dispersor del QB. Si incluimos la SOI-R, la ruptura de la degeneración del pseudoespín es más evidente pero ocurre un efecto similar al descrito arriba. En los paneles de la izquierda [(a), (c), (e), (g), e (i)], introduciendo la corrección (44), el 1DHGWP se comporta como en otros semiconductores, que no están sujetos a una ecuación tipo Dirac de la forma (21). Por otro lado, en los paneles de la derecha [(b), (d), (f), (h) y (j)], no se introdujeron los cambios del tipo (44) y es evidente la ruptura de la degeneración del pseudoespín, lo cual no debería ser admisible en el espacio libre (ausencia de potenciales dispersores y de acoplamiento SOI).

## 4 Conclusiones

En este capítulo se presenta un estudio de la dispersión de paquetes gaussianos de ondas cuasi-unidimensionales de gases de huecos (1DHGWP) espín polarizados y desacoplados, en presencia de interacción espín-órbita tipo Rashba (SOI-R). La evolución del 1DHGWP, se simula confinándolo electrostáticamente en un nanohilo semiconductor y en una nano-cinta de MLG. El procesamiento matemático de los modelos, sobre el método de diferencias finitas, resulta ventajoso, para la obtención de una línea del tiempo en la evolución de los paquetes bajo estudio. La fenomenología de interés en ambos casos, se puede manipular variando convenientemente: las magnitudes topológicas de los sistemas (espesor y altura del QB), la fortaleza de la SOI-R y la configuración del espín (pseudo-espín), para el 1DHGWP incidente. Para el caso de la evolución del 1DHGWP a lo largo de una nano-cinta de MLG en el espacio libre (sin dispersores cuánticos, ni acoplamiento SOI-R), se logró un excelente acuerdo cualitativo con la dinámica reportada para el 2DMLG, bajo condiciones similares [46, 47].

## 5 Apéndices

### 5.1 A: Obtención del Hamiltoniano del Grafeno

Partiendo de la ecuación original de Dirac:

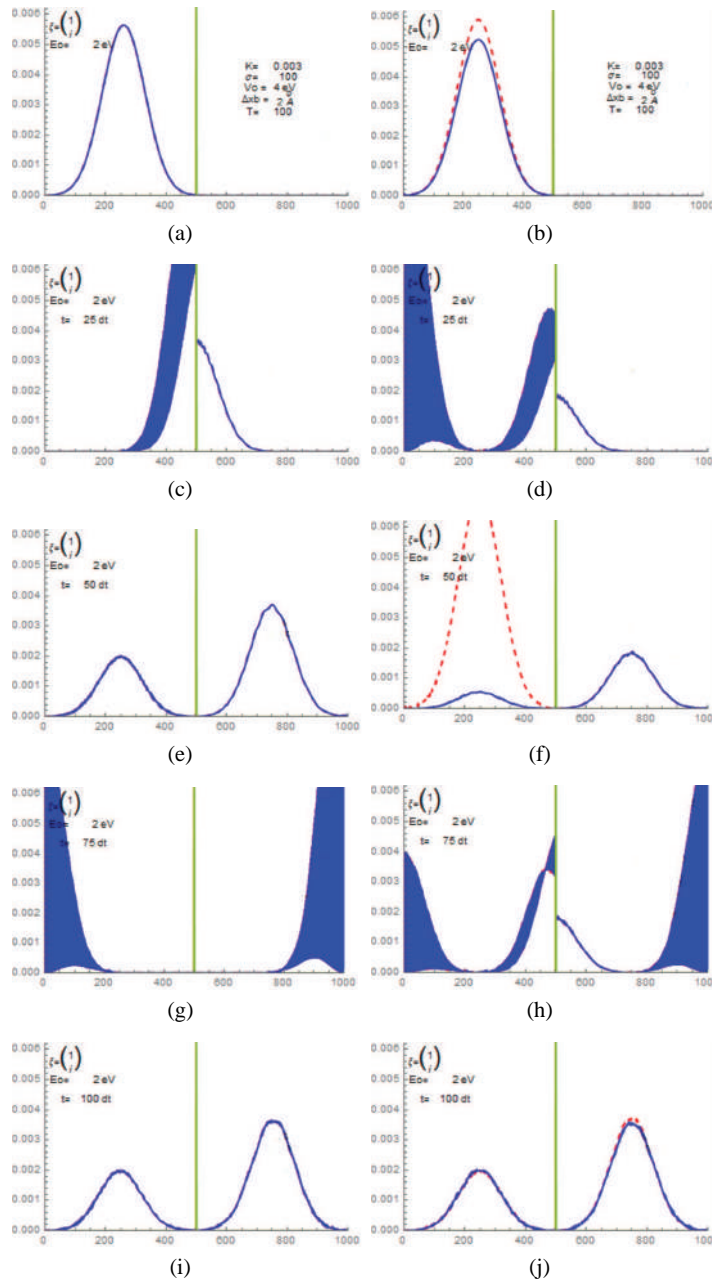


Fig. 12: Comparación entre lo obtenido con el hamiltoniano del grafeno corregido [paneles (a), (c), (e), (g) e (i)] y lo obtenido con las ecuaciones sin corregir [paneles (b), (d), (f), (h) y (j)]; en ambos casos sin considerar el acoplamiento SOI-R.

$$\left( \beta mc^2 + c \left( \sum_{n=1}^3 \alpha_n P_n \right) \right) \psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t}. \quad (45)$$

El hamiltoniano de Dirac sería:

$$\hat{H}_D = \beta mc^2 + c \left( \sum_{n=1}^3 \alpha_n P_n \right). \quad (46)$$

Sabiendo que la masa en reposo de los electrones es cero:

$$\hat{H}_D = c \left( \sum_{n=1}^3 \alpha_n P_n \right). \quad (47)$$

En el grafeno, contamos para una capa con sólo dos dimensiones, por lo que la suma se limita hasta 2. Los  $\alpha_i$  son operadores lineales que gobiernan la función de onda, escritos como una matriz y son matrices de 4x4 conocidas como matrices de Dirac. Sin embargo, en este caso, construimos las matrices de Dirac con matrices de Pauli. Las  $P$ 's son los operadores momento lineal aplicados al vector número de onda.

El hamiltoniano para el grafeno al cambiar la velocidad de la luz por la de los fermiones (que se puede aproximar ya que varía aproximadamente en dos ordenes de magnitud):

$$\hat{H}_G = v_f \hbar \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} = v_f \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{K}. \quad (48)$$

## 5.2 B: Operador de Evolución Temporal

El operador de evolución temporal  $\hat{U}(t, t_0)$  sirve para transformar la función de estado en el tiempo  $t_0$ , a una nueva función al tiempo  $t$  posterior y al mismo tiempo su valor tiene que ser igual a uno. Entonces se puede escribir una ecuación diferencial de primer orden:

$$\left[ \frac{i}{\hbar} \hat{H} \hat{U}(t, t_0) + \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t, t_0) \right] \Psi(x, y; t_0) = 0, \quad (49)$$

cuya solución está dada por:

$$\hat{U}(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \hat{H}(x, y) dt}. \quad (50)$$

Al integrar al hamiltoniano que es independiente del tiempo obtenemos el factor  $\delta t = (t - t_0)$ .



### 5.3 C: Hamiltoniano en diferencias finitas sin SOI-R

El hamiltoniano (en una sola dimensión) aplicado a una función de onda, antes de las diferencias finitas, se ve así:

$$\hat{H}\Psi = -i\hbar v_f \sigma_y \frac{\partial}{\partial y} \Psi + V\Psi, \quad (51)$$

donde  $v_f$  es la velocidad de los fermiones de Dirac,  $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$  es la matriz de Pauli para la componente  $y$ .

Tomando en cuenta ahora la discretización de una función de onda, la desarrollamos en serie de Taylor (hasta el tercer elemento ya que la aproximación de Cayley hecha en la ecuación 29, sólo es válida hasta  $\delta y^2$ ):

$$\begin{aligned} \psi_{j+1} &= \psi_j + \delta y \psi'_j + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi''_j \\ \psi_{j-1} &= \psi_j - \delta y \psi'_j + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi''_j \end{aligned}$$

Al restarlas, obtenemos  $\psi'_j$  que sustituimos en 51 para obtener:

$$\hat{H}\Psi_j = -\frac{\hbar v_f \sigma_y}{2\delta y} (\Psi_{j+1} - \Psi_{j-1}) + V\Psi_j. \quad (52)$$

### 5.4 D: Hamiltoniano en diferencias finitas con SOI-R

En este caso, el hamiltoniano aplicado a una función de onda, antes de las diferencias finitas, queda de la siguiente manera:

$$\hat{H}\Psi = V(y)\Psi - i(\hbar v_f \sigma_y + \alpha \sigma_x) \Psi' - B\Psi'' + i\beta \sigma_x \Psi''' \quad (53)$$

Si desarrollamos en serie a una función de onda para el 3er orden:

$$\begin{aligned} \psi_{j-1} &= \psi_j - \delta y \psi'_j + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi''_j - \frac{1}{6} \delta y^3 \psi'''_j \\ \psi_{j+1} &= \psi_j + \delta y \psi'_j + \frac{1}{2} \delta y^2 \psi''_j + \frac{1}{6} \delta y^3 \psi'''_j \\ \psi_{j+2} &= \psi_j + 2\delta y \psi'_j + 2\delta y^2 \psi''_j + \frac{8}{6} \delta y^3 \psi'''_j, \end{aligned}$$

Son 3 ecuaciones con 3 incógnitas que son las derivadas de  $\psi$ , al resolver el sistema de ecuaciones y sustituyendo en el hamiltoniano, nos quedan:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi_A = & -\frac{B}{\delta y^2}\psi_{j-1,A} + \left(V(y) + \frac{2B}{\delta y^2}\right)\psi_{j,A} - \frac{B}{\delta y^2}\psi_{j+1,A} \\
& \left(\frac{\hbar v_f}{3\delta y} + \frac{i\alpha}{3\delta y} - \frac{i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j-1,B} + \left(\frac{\hbar v_f}{2\delta y} + \frac{i\alpha}{2\delta y} + \frac{3i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j,B} \\
& + \left(-\frac{\hbar v_f}{\delta y} - \frac{i\alpha}{\delta y} - \frac{3i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j+1,B} + \left(\frac{\hbar v_f}{6\delta y} + \frac{i\alpha}{6\delta y} + \frac{i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j+2,B}, \quad (54)
\end{aligned}$$

y:

$$\begin{aligned}
\hat{H}\psi_B = & \left(-\frac{\hbar v_f}{3\delta y} + \frac{i\alpha}{3\delta y} - \frac{i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j-1,A} \\
& + \left(-\frac{\hbar v_f}{2\delta y} + \frac{i\alpha}{2\delta y} - \frac{3i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j,A} + \left(\frac{\hbar v_f}{\delta y} - \frac{i\alpha}{\delta y} - \frac{3i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j+1,A} \\
& + \left(-\frac{\hbar v_f}{6\delta y} + \frac{i\alpha}{6\delta y} + \frac{i\beta}{\delta y^3}\right)\psi_{j+2,A} - \frac{B}{\delta y^2}\psi_{j-1,B} \\
& + \left(V(y) + \frac{2B}{\delta y^2}\right)\psi_{j,B} - \frac{B}{\delta y^2}\psi_{j+1,B}, \quad (55)
\end{aligned}$$

## Bibliografía

1. I. Žutić, J. Fabian and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **74**, 2 (2004).
2. D. D. Awschalom and M. E. Flatté, *Nature Phys.* **3**, 153 (2007).
3. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17**, 6039 (1984).
4. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 2 (1984).
5. S. Datta and B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
6. M. G. Pala, M. Governale, J. König, U. Zülicke and G. Iannaccone, *arXiv:cond-mat/0307354v2* (2004).
7. R. Winkler, *Phys. Rev. B* **62**, 4245 (2000).
8. A. Wong, "Acoplamiento espín-órbita en heteroestructuras semiconductoras". Tesis de Maestría en Ciencias e Ingeniería de Materiales (UNAM-Ensenada, 2005).
9. D. M. Gvozdic and U. Ekenberg, *Physica E* **34**, 377 (2006).
10. R. Cuan and L. Diago-Cisneros, *Eur. Phys. Lett.* **110**, 67001 (2015).
11. V. A. Guzenko, J. Knobbe, H. Hardtdegen, T. Schäpers and A. Bringer, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 032102 (2006).
12. T. Schäpers, J. Knobbe, A. van der Hart and H. Hardtdegen, *Sci. Technol. Adv. Mater.* **4**, 19 (2003).
13. W. Häusler, *Phys. Rev. B* **70**, 115313 (2004).
14. A. V. Moroz and C. H. W. Barnes, *Phys. Rev. B* **60**, 14272 (1999).
15. F. Mireles and G. Kirczenow, *Phys. Rev. B* **64**, 024426 (2001).
16. Y. V. Pershin, J. A. Nesteroff and V. Privman, *Phys. Rev. B* **69**, 121306 (2004).
17. J. Wang, H. B. Sun and D. Y. Xing, *Phys. Rev. B* **69**, 085304 (2004).
18. H. Su and B. Y. Gu, *Phys. Lett. A* **341**, 198 (2005).
19. D. Sánchez, L. Serra and M. S. Choi, *Phys. Rev. B* **77**, 035315 (2008).
20. A. H. MacDonald, P. Schiffer and N. Samarth, *Nature Materials* **4**, 195 (2005).
21. S. Murakami, N. Nagaosa and S. C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003).

22. J. P. Lu, J. B. Yau, S. P. Shukla, M. Shayegan, L. Wissinger, U. Rössler and R. Winkler, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 1282 (1998).
23. H. van Leuken, R. A. de Groot, W. van Roy, M. W. J. Prins, H. van Kempen and J. De Boeck, *J. Phys.: Condens. Matter*, **7**, 49 (1995).
24. J. C. Cheang, *Rev. Dig. Univ.* **6**, 7 (2005).
25. Pedro Pereyra Padilla. “*Fundamentos de Física Cuántica.*” Reverté UAM, (2011).
26. M. A. Nielsen and I. L. Chuang. “*Quantum Computation and Quantum Information.*” Cambridge University Press, (2012).
27. D. Pesin and A. H. MacDonald, *Nat. Mater.* **11**, 409 (2012).
28. A. Young and P. Kim *Nature* **5**, 222 (2009).
29. J. M. Pereira, F. M. Peeters, A. Chaves and G A Farias *Semicond. Sci. Technol.* **25**, 033002 (2010).
30. J. M. Luttinger and W. Kohn, *Phys. Rev.* **97**, 869 (1955).
31. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez and P. Pereyra, *Phys. Rev. B* **74**, 045308 (2006).
32. J. M. Antuña, “*Métodos Matemáticos de la Física*” (Editorial Universitaria, La Habana, 2014).
33. A. Goldberg, H. Schey and L. Schwartz, *Am. J. Phys.* **35**, 177 (1967).
34. M. de Dios Leyva, “*Mecánica Cuántica*” (Editorial Félix Varela, La Habana, 2006).
35. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
36. M. I. Katsnelson and A. K. Geim, *Nat. Phys.* **2**, 620 (2006).
37. A. K. Geim and K. S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
38. M. Ishigami and E. D. Williams, *Nano Lett.* **7**, 1643 (2007).
39. L. DellAnna, P. Majari and M R Setare, *J. Phys.: Condens. Matter* **30**, 415301 (2018).
40. Jingang Wang, Fengcai Ma and Mengtao Sun, *RSC Adv.* **7**, 16801 (2017).
41. J. J. Sakurai, “*Modern Quantum Mechanics*” Addison-Wesley, (1994).
42. R. Cuan and L. Diago-Cisneros, *J. App. Phys.* **110**, 113705 (2011).
43. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigoriev and A. A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
44. R. Cuan and L. Diago-Cisneros, *Rev. Cub. Fís.* **27**, 212 (2010).
45. <https://sernaed95.wixsite.com/animaquantrix/animations>  
Multimedia of the 1DGWP wordline dynamic
46. G. M. Maksimova and E. V. Frolova, *Phys. Rev. B* **78**, 235321 (2008).
47. Ming-Hao Liu and J. Bundesmann and K. Richter, *Phys. Rev. B* **85**, 085406-1 (2012).

# Acoustic modes in composite with cylindrical inclusions

J. A. Otero, R. Pérez-Álvarez, Ernesto M. Hernández, Suset G. Rodríguez, H. H. Cabanas

## Abstract

The following chapter is devoted to investigating the dispersion curves in a waveguide using Finite Element Method. A square bar waveguide formed by a composite material with periodically located cylindrical inclusions is considered. A study of the symmetry in waves and the cross-section of the compound was performed to reduce the dimensions of the problem. Elements of group theory are used for the study of symmetry of the compound. The study of these symmetries allow to obtain the longitudinal, flexural and torsional modes separately. It is observed the behavior of the dispersion curves when number of inclusions is increased. It is demonstrated the feasibility of performing a prior homogenization process in cases with a large number of inclusions. A graphical user interface for obtaining dispersion curves in square bars with cylindrical inclusions was developed in this work.

Se investigan las curvas de dispersión de una guía de ondas de sección cuadrada de un material compuesto con inclusiones cilíndricas periódicamente localizadas empleando el método de elementos finitos. A partir del estudio de las simetrías, usando teoría de grupos, se identifican individualmente los modos longitudinales, flexurales y de torsión. Se determinan los efectos de la variación del número de inclusiones y se demuestra la factibilidad de realizar de inicio un proceso de homogeneización cuando este número es grande. Se desarrolló una interfaz gráfica de usuario para obtener las curvas de dispersión en esta clase de guía.

## 1 Introduction

Ultrasonic waveguide inspection has proven to be much more efficient than traditional point to point tests; hence, a great deal of work related to this field has been done. The calculation of dispersion curves for different waveguides is very appealing because these curves contain fundamental information about wave propaga-

---

J. A. Otero, Ernesto M. Hernández and Suset G. Rodríguez  
Instituto Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México, Car. Lago de Guadalupe Km 3.5, CP 52926, Atizapán de Zaragoza, México, México. e-mail: j.a.otero@itesm.mx R. Pérez-Álvarez and H. H. Cabanas  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México. e-mail: rpa@uaem.mx

tion. A Semi-Analytical Finite Element Method, developed to obtain the dispersion curves for a bar with an arbitrary cross-section [10], constitutes the basis for later works. Some of them deal with the calculation of viscoelastic wave guides [1, 14]. A generalization of the Semi-Analytical Finite Element Method for obtaining dispersion curves by using higher order elements [16], and a thorough mathematical analysis of the Finite Element Method applied to laminates was performed by F Schopfer [21]. S Sharma and A Mukherjee provide methods for corrosion studies of steel reinforcement in concrete by using guided longitudinal waves [22]. L Laguerre and F Treysede presented an extensive review about state of the art studies of guided waves within seven-wire steel cables [12]. Another interesting work is about the use of finite element methods for the analysis of guided waves reflection caused by a holder, within a pipe [7].

The earliest work on the field of commercial software designed for the calculation of dispersion curves, dates back from the year 2000. Brian Pavlakovic uses analytical methods to obtain dispersion curves in multilaminates and bars with cylindrical geometry [18]. These results were used in DISPERSE V.2 [19], which is among the first of the few existing commercial softwares for modeling guided waves. Dispersion curves of some composites can be obtained with this software, but only in the case of multilaminates, or one single fiber embedded in a matrix. Another commercial application is the software GUIGUW 2011 [1], which is based on the semi-analytical formulation of the Finite Element Method, designed for the analysis of bars with arbitrary cross-sections. The calculation of waveguide's dispersion curves in composite materials is limited to multilaminates and waveguides with only one reinforcing fiber. This is because the complexity of the bar geometry is such that results are very difficult to obtain through analytical methods. On the other hand, the amount of works dealing with the discretization of such problems by means of the Finite Element Method and other numerical techniques is very slim; this is because the resulting numerical problem becomes almost impossible to solve computationally, due to the dimensions involved. In this work, a proposal based on the modeling of highly heterogeneous composite materials by an homogeneous equivalent problem is developed in order to solve the complications just mentioned.

Among one of the most popular homogenization methods is the asymptotic homogenization method. One of the most important works on this topic has been developed by J. Bravo-Castillero, where they calculated the effective coefficients of thermo-electro-magneto-elastic multilaminated composite materials [3]. It is also important to stress the relevance of the work on laminates by J. H. Cabanas, where the influence of the polarization direction in a magneto-electro-elastic laminate, is studied [4]. Furthermore, among some works on fibrous composites, we found that J. Bravo-Castillero considered periodic composites with square and hexagonal distributions [2]. R. Rodriguez-Ramos studied parallelogram cells by analytical and numerical means, and their results are compared with the theoretical results of [20]. A. Georgiades developed the homogenization of a smart composite material with an orthotropic grid-reinforced shell by using the Asymptotic Homogenization Method. This work is inspired on a theoretical study [5] and another paper where some applications of this material are presented [8]. Moreover, D. A. Hadjiloizi developed

a multi-scale asymptotic homogenization model for composite thermo-magneto-electro-elastic materials [9], and a semi-analytical homogenization method for obtaining the effective elastic coefficients on a fiber-type composite material with imperfect contact, has been presented by J. A. Otero [17].

U. Gabbert links the Finite Element Method with the asymptotic homogenization method, in order to solve the inverse problem. He finds a microscale distribution that optimizes the desired macroscale properties for a given application [6]. Moreover, A. L. Kalamkarov made a review on state of the art in homogenization methods. They perform a study, where the most convenient method is chosen according to the case being analyzed, and finally they also introduce new approaches on these methods [11].

The feasibility of using an asymptotic homogenization method will be tested, in order to obtain dispersion curves in periodic composite waveguides, when a large number of inclusions prevents the use of finite element methods in a direct fashion. A square cross sectional waveguide with a metallic composite matrix reinforced with periodically distributed cylindrical fibers, will be considered in this paper. The symmetry axis of the fibers will be assumed to be parallel to the axial axis of the waveguide, and the unit cell defining the cross section of the composite material is assumed to be square shaped. All this is shown schematically on Figure 1.

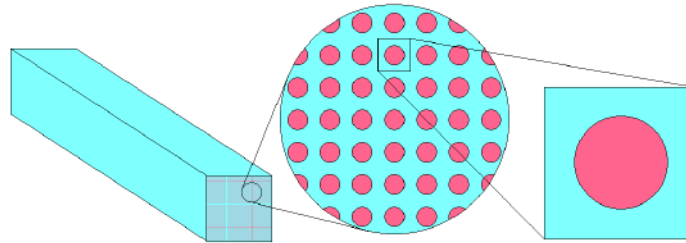


Fig. 1: Square bar, cylindrical fiber square periodical distribution and unitary cell.

The components are isotropic materials defined by the Poisson's Ratio, Young Modulus and volumetric mass density. In this work, a composite material consisting of an aluminum matrix with silicon carbide fibers, whose properties are shown in Table 1, will be considered.

The model used to study the mechanical waves within the guide is described in the next section, along with a symmetry study of displacement functions and waveguide geometry. Group theory elements are used to study the waveguide's symmetry, and a Semi-Analytical Finite Element Method which is used to calculate the dispersion curves will be introduced in section 3. The Asymptotic Homogenization Method used to obtain the effective coefficients of the equivalent homogeneous material, will be described in section 4. Finally, the results and conclusions are presented in sections 5 and 6, respectively.

Table 1: Elastic constants for constituents, Silicon carbide (SiC) and Aluminum (Al), [23].

	(SiC)	(Al)
Young Module (GPa)	450	70
Poisson's ratio	0.17	0.3
Density (kg/m <sup>3</sup> )	3210	2700

## 2 Elastic Guided Waves Model

From Newton's equations (1) and Hooke's law (2)

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}, \quad (1)$$

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l}, \quad (2)$$

the mechanical wave equation in the case of an homogeneous material can be obtained as

$$c_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2}. \quad (3)$$

Where  $\sigma_{ij}$ ,  $c_{ijkl}$  and  $u_i$  is the stress tensor, elastic tensor and displacement vector components, respectively and  $\rho$  is the volumetric mass density of the material.

Restricting the waves to a periodically composed waveguide with an isolated outer boundary  $S$  and a contact boundary between faces  $\Gamma$ , we have

$$c_{ijkl}(x) \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (4)$$

$$c_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} n_j \Big|_S = 0 \quad (5)$$

$$u_i^m \Big|_\Gamma = u_i^f \Big|_\Gamma \quad (6)$$

$$c_{ijkl}^m \frac{\partial u_k^m}{\partial x_l} n_j \Big|_\Gamma = c_{ijkl}^f \frac{\partial u_k^f}{\partial x_l} n_j \Big|_\Gamma, \quad (7)$$

where  $m$  and  $f$  represent the volumes occupied by the matrix and inclusions, respectively

$$c_{ijkl}(x) = \begin{cases} c_{ijkl}^m & \text{if } x \in m \\ c_{ijkl}^f & \text{if } x \in f \end{cases}, \quad (8)$$

and  $n_j$  is the normal vector component to  $S$  and  $\Gamma$ . It's normal to  $S$  in isolated boundary conditions (5) and normal to  $\Gamma$  in ideal contact conditions (6 - 7).

This problem can be complicated, depending on the boundary and geometry of the inclusions. A finite element method is used to solve these kind of problems, and in this case, the method is started from the formulation of the virtual work principle.

## 2.1 Symmetry Analysis

Assuming a time dependence for the solutions to the wave equation (3) as

$$\begin{aligned} u_1 &= u_1(x_1, x_2, x_3) \exp(i(-\omega t)), \\ u_2 &= u_2(x_1, x_2, x_3) \exp(i(-\omega t)), \\ u_3 &= u_3(x_1, x_2, x_3) \exp(i(-\omega t)), \end{aligned} \quad (9)$$

the wave equation can be written in expanded form as

$$\begin{aligned} & c_{1111} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_1} + c_{1122} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_3} \right) \\ & + c_{1212} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_1} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_1} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3 \partial x_3} \right) \\ & = -\rho \omega^2 \ddot{u}_1, \\ & c_{2222} \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_2} + c_{2211} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2 \partial x_1} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_3} \right) \\ & + c_{2112} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1 \partial x_1} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3 \partial x_3} \right) \\ & = -\rho \omega^2 \ddot{u}_2, \\ & c_{3333} \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_3 \partial x_3} + c_{3311} \left( \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_3 \partial x_2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_3 \partial x_1} \right) \\ & + c_{3113} \left( \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1 \partial x_3} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_1 \partial x_1} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2 \partial x_3} + \frac{\partial^2 u_3}{\partial x_2 \partial x_2} \right) \\ & = -\rho \omega^2 \ddot{u}_3. \end{aligned} \quad (10)$$

From (10) it can be seen that the parity of each displacement  $u_i$  relative to a given component  $x_j$  when  $i = j$  is different to that when  $i \neq j$ . Since the displacements only depend on  $x_1$  and  $x_2$ , the solutions can be written in any of the following ways



$$\text{Torsional : } \begin{cases} u_1 = c_1(x_1) s_4(x_2) \\ u_2 = s_2(x_1) c_5(x_2) , \\ u_3 = s_3(x_1) s_6(x_2) \end{cases} \quad (11)$$

$$\text{Flexural X : } \begin{cases} u_1 = c_1(x_1) c_4(x_2) \\ u_2 = s_2(x_1) s_5(x_2) , \\ u_3 = s_3(x_1) c_6(x_2) \end{cases} \quad (12)$$

$$\text{Flexural Y : } \begin{cases} u_1 = s_1(x_1) s_4(x_2) \\ u_2 = c_2(x_1) c_5(x_2) , \\ u_3 = c_3(x_1) s_6(x_2) \end{cases} \quad (13)$$

$$\text{Longitudinal : } \begin{cases} u_1 = s_1(x_1) c_4(x_2) \\ u_2 = c_2(x_1) s_5(x_2) . \\ u_3 = c_3(x_1) c_6(x_2) \end{cases} \quad (14)$$

Where these are the only four possible symmetry forms of the solutions. It is also possible to associate each one of these solutions with a longitudinal, flexural and torsional oscillation modes as seen in (11 - 14). The occurrence of two symmetries corresponding to flexural modes is also observed, one on the X axis (12) and another on the Y axis (13). For this reason they are identified as "Flexural X" and "Flexural Y" respectively.

The symmetries that are present along the squared cross-section of the bar, can be seen on Figure 2. Four reflection planes are present  $\sigma$  and one rotation axis  $C_4$  with a step of  $\pi/2$ .

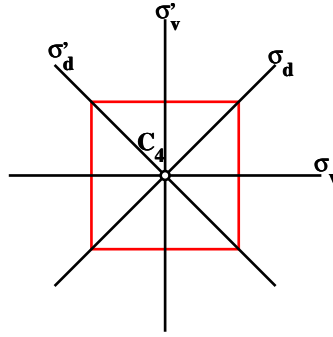


Fig. 2: Square bar cross-section symmetries.

Using group theory and the observed symmetries, it is possible to realize that the point group of the squared cross-section is  $C_{4v}$ . The character table of  $C_{4v}$  is presented below in Table 2 [13].

Using the projection operators obtained with the character table of  $C_4$ , it is possible to construct symmetry-adapted basis functions that belong to irreducible representations of the group. The projection operators corresponding to the irreducible

Table 2: Characters table of  $C_{4v}$ 

$C_{4v}$	$E$	$2C_4$	$C_2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
$E$	2	0	-2	0	0

representations are constructed as

$$\begin{aligned}
P_{A_1} &= E + C_4 + C_4^3 + C_2 + \sigma_v + \sigma_v' + \sigma_d + \sigma_d', \\
P_{A_2} &= E + C_4 + C_4^3 + C_2 - \sigma_v - \sigma_v' - \sigma_d - \sigma_d', \\
P_{B_1} &= E - C_4 - C_4^3 + C_2 + \sigma_v + \sigma_v' - \sigma_d - \sigma_d', \\
P_{B_2} &= E - C_4 - C_4^3 + C_2 - \sigma_v - \sigma_v' + \sigma_d + \sigma_d', \\
P_E^1 &= E - C_2 - \sigma_v + \sigma_v', \\
P_E^2 &= E - C_2 + \sigma_v - \sigma_v'.
\end{aligned} \tag{15}$$

From which it is possible to obtain basis functions of the irreducible representations of  $C_{4v}$  as

$$\begin{aligned}
A_1 : u_x &= x, & u_y &= y, & u_z &= x^2 + y^2; \\
A_2 : u_x &= y, & u_y &= -x, & u_z &= xy(x^2 - y^2); \\
B_1 : u_x &= x, & u_y &= -y, & u_z &= x^2 - y^2; \\
B_2 : u_x &= y, & u_y &= x, & u_z &= xy(x^2 + y^2); \\
E : u_x &= \{x^2, y^2\}, & u_y &= xy, & u_z &= x; \\
&: u_x &= xy, & u_y &= \{x^2, y^2\}, & u_z &= y.
\end{aligned} \tag{16}$$

Using the projection operators, it is possible to find a vector basis for the square plane oscillator and for each irreducible representation of the group. It is possible to obtain the separation of modes corresponding to the irreducible representation by calculating the basis for these representations. The obtained modes are shown in Figure 3, where the arrows and  $\pm$  indicate displacements along the  $XY$  plane and  $Z$  axis respectively [15].

It is possible to compare the schematic representation of the nodes, obtained from the analysis of group theory, with the separation obtained from the wave functions (11 - 14). The associations that will be shown, follow from these comparisons. Modes  $A_1$  and  $B_1$  are obtained from the equations for longitudinal modes, while modes  $A_2$  and  $B_2$  are obtained from the equations for torsional modes. Both equations for flexural modes, Flexural X and Flexural Y, respond to the same two-dimensional representation  $E$ . It is possible to conclude that flexural modes are degenerate; therefore, dispersion curves corresponding to these modes, are exactly the same.

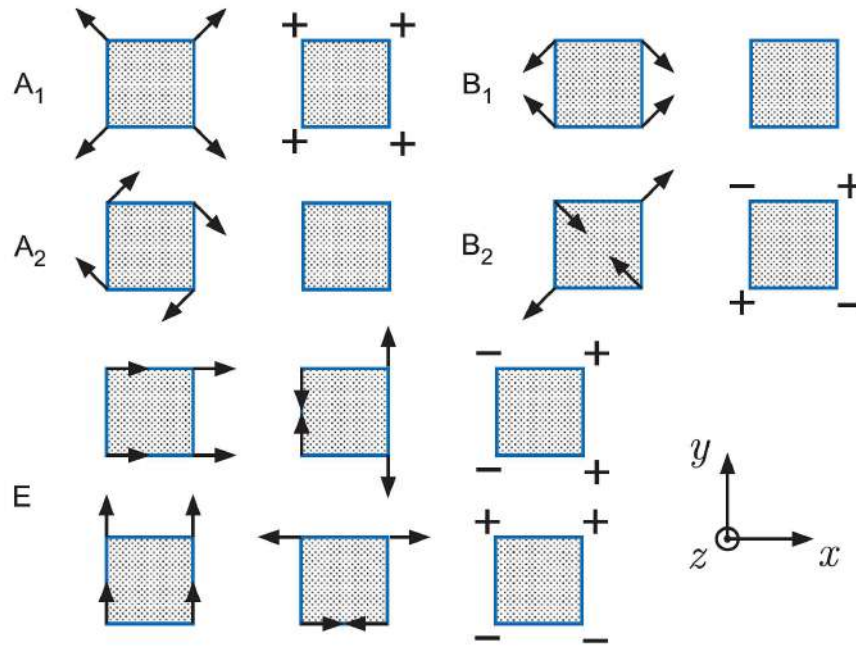


Fig. 3: Schematization of the symmetry-adapted basis function belonging to the irreducible representations of  $C_{4v}$

### 3 Semi-Analytical Finite Element Method

To obtain dispersion curves by the Semi-Analytical Finite Element Method (SAFEM), the cross-section must be divided by using two-dimensional elements. Furthermore, along the direction of propagation,  $z$ , the wave is described by the orthogonal function  $\exp(i\xi z)$ , where  $\xi$  is the wave number. Taking an arbitrary element, the displacement (17), strain (18), stress (19) and the external traction vector (20) can be written for any point  $(x, y, z)$  as

$$u = (u_x \ u_y \ u_z)^T, \quad (17)$$

$$\varepsilon = (\varepsilon_{xx} \ \varepsilon_{yy} \ \varepsilon_{zz} \ \gamma_{yz} \ \gamma_{zx} \ \gamma_{xy})^T, \quad (18)$$

$$\sigma = (\sigma_{xx} \ \sigma_{yy} \ \sigma_{zz} \ \sigma_{yz} \ \sigma_{zx} \ \sigma_{xy})^T, \quad (19)$$

$$t = (t_x \ t_y \ t_z)^T, \quad (20)$$

the virtual work principle equation takes the form

$$\int_{\Gamma} \delta u^T t d\Gamma = \int_V \delta u^T (\rho \ddot{u}) dV + \int_V \delta \varepsilon^T \sigma dV. \quad (21)$$

Where the superscript  $T$ , represents the transpose of the corresponding matrix,  $\rho$  is the density,  $\ddot{\bullet}$  represents the second derivative with respect to time,  $\int_{\Gamma} d\Gamma$  is the integral over the outer surface and  $\int_V dV$  is the volume integral of the element. The left hand side corresponds to the work done by the external traction  $t$ . The first and second terms on the right hand side are the kinetic and potential energy increments respectively. Considering the harmonic wave,  $\exp(-i\omega t)$ , the displacement vector at an arbitrary point (17) can be written as

$$u = N(x, y) U^j(z) \exp(-i\omega t), \quad (22)$$

where the  $(3 \times h)$ -matrix  $N(x, y)$  is the interpolation function and the  $h$ -dimensional vector  $U^j(z)$  is the  $j$ -th element nodes displacement. The variable  $h$  is three times the number of nodes in the element. Since  $U^j(z)$  depends only on  $z$ , it can be rewritten using the Fourier transform as follows

$$U^j(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{U}^j(\xi) \exp(i\xi z) d\xi. \quad (23)$$

Taking a certain wavenumber  $\xi$ , the displacement vector of an arbitrary point (22) within the  $j$ -th element is

$$u = N(x, y) \bar{U}^j \exp(i\xi z - i\omega t). \quad (24)$$

Similarly, we find that the external traction vector at an arbitrary point can be written in terms of a nodal external traction vector acting on the element as

$$t = N(x, y) \bar{T}^j \exp(i\xi z - i\omega t). \quad (25)$$

The deformation vector can be expressed in terms of the displacement vector in the form

$$\varepsilon = \left( L_x \frac{\partial}{\partial x} + L_y \frac{\partial}{\partial y} + L_z \frac{\partial}{\partial z} \right) u, \quad (26)$$

where

$$L_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, L_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, L_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Substituting the displacement at the point  $(x, y, z)$  within the  $j$ -th element (24) in equation (26), we have

$$\varepsilon = (B_1 + i\xi B_2) \bar{U}^j \exp(i\xi z - i\omega t), \quad (28)$$

where

$$B_1 = L_x N_{,x} + L_y N_{,y}, B_2 = L_z N, \quad (29)$$

Here  $N_{,x}$  and  $N_{,y}$  are the  $x$  and  $y$  partial derivatives of the interpolation function  $N$  respectively. Finally, depending on the deformation, the stress vector is expressed as

$$\sigma = c\varepsilon, \quad (30)$$

where  $c$  is the elastic coefficient matrix of the element.

Substituting equations (24), (25), (28) and (30) in equation (21) and after regrouping, we have

$$f^j = \left( K_1^j + i\xi K_2^j + \xi^2 K_3^j \right) \bar{U}^j - \omega^2 M^j \bar{U}^j, \quad (31)$$

where

$$\begin{aligned} f^j &= \int_{\Gamma'} N^T N \bar{T}^j d\Gamma', \\ K_1^j &= \int_y \int_x B_1^T c B_1 dx dy, \\ K_2^j &= \int_y \int_x (B_1^T c B_2 - B_2^T c B_1) dx dy, \\ K_3^j &= \int_y \int_x B_2^T c B_2 dx dy, \\ M^j &= \int_y \int_x \rho N^T N dx dy, \end{aligned} \quad (32)$$

here  $\Gamma'$  is the cross-section of the boundary. Performing calculations by numerical integration for all elements and adding the results to common nodes, the following is obtained

$$f = (K_1 + i\xi K_2 + \xi^2 K_3) \bar{U} - \omega^2 M \bar{U}. \quad (33)$$

Here  $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$  and  $M$  are  $(h \times h)$ -matrices determined by the geometry, and  $f$  is an  $h$ -dimensional vector of traction forces acting upon the nodes, that results from the boundary conditions. In this case, the variable  $h$  represents three times the total number of nodes within the system. Considering  $f = 0$ , we have that the square roots of the system eigenvalues,  $\omega^2$  (33) up to the  $n$ -th wave number  $\xi_n$ , satisfy the resonance conditions of the bar. The phase velocity of the  $n$ -th mode for a frequency  $\omega$ , is given by

$$V_n^f = \frac{\omega}{\xi_n}. \quad (34)$$

The model is scaled, so that every quantity is expressed in multiples of the fundamental constants of the problem. The fundamental scale for a bar with an arbitrary cross section, when using SAFEM, is given by the cross-section of the bar, the elastic constants and density of the material. For this reason, a coordinate transformation

in the  $XY$  plane is performed, in such a way that in the new  $(x', y')$  coordinates, the size of each side enclosing the cross-section of the bar is equal to 1 instead of  $D$ , as in the original  $(x, y)$  coordinates. Densities and elastic constants of the constituents are scaled respectively by dividing over the matrix material density and matrix constant  $C_{44}$ .

## 4 Asymptotic Homogenization Method

The Asymptotic Homogenization Method (AHM) with double scale is based on the introduction of two spatial coordinate systems. Fast or local coordinates  $Y = (y_1, y_2, y_3)$  defined over the periodic cell and slow or global coordinates  $X = (x_1, x_2, x_3)$  defined over the composite material. The relationship between them is given by

$$y_i = \frac{x_i}{\varepsilon}, \quad (35)$$

where  $\varepsilon$  is a small parameter obtained from the ratio between the characteristic dimensions of the cell  $l$  and the characteristic dimensions of the material  $L$  by

$$\varepsilon = \frac{l}{L}. \quad (36)$$

An asymptotic expansion for the displacements  $u_k$ , with respect to the parameter  $\varepsilon$  is proposed

$$\begin{aligned} u_k &= u_k^{(0)}(x) + \varepsilon u_k^{(1)}(x, y) + \varepsilon^2 u_k^{(2)}(x, y) + \dots \\ &= u_k^{(0)}(x) + \varepsilon^i u_k^{(i)}(x, y). \end{aligned} \quad (37)$$

In this framework, the non-zero terms are periodic with respect to  $y$  and their periodicity is determined by the cell length  $l$ .

Substituting equation (37) into Hooke's law, equation (2), we obtain

$$\sigma_{ij} = c_{ijkh} \frac{\partial \left( u_k^{(0)}(x) + \varepsilon^n u_k^{(n)}(x, y) \right)}{\partial x_h}. \quad (38)$$

Taking the corresponding derivative on equation (38) and considering that  $u_k^{(0)}(x) = u_k^{(0)}(x, y)$ , the following is obtained

$$\sigma_{ij} = \varepsilon^n \left( c_{ijkh} \left( \frac{\partial u_k^{(n)}(x, y)}{\partial x_h} + \frac{\partial u_k^{(n+1)}(x, y)}{\partial y_h} \right) \right). \quad (39)$$

Where  $\sigma_{ij}^{(n)}$  will be defined as

$$\sigma_{ij}^{(n)} = c_{ijkh}(y) \left( \frac{\partial u_k^{(n)}}{\partial x_h} + \frac{\partial u_k^{(n+1)}}{\partial y_h} \right), \quad (40)$$

so the notation is simplified to

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \sigma_{ij}^{(0)}(x, y) + \varepsilon \sigma_{ij}^{(1)}(x, y) + \varepsilon^2 \sigma_{ij}^{(2)}(x, y) + \dots \\ &= \varepsilon^n \sigma_{ij}^{(n)}(x, y). \end{aligned} \quad (41)$$

By substitution of the expressions that appear in equation (37) and (41) in Newton's equation (1) and rearranging the terms in powers of  $\varepsilon$ , the following equations are obtained.

For  $\varepsilon^{-1}$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}(x, y)}{\partial y_j} = 0, \quad (42)$$

and for  $\varepsilon^0$

$$\frac{\partial \sigma_{ij}^{(0)}(x, y)}{\partial x_j} + \frac{\partial \sigma_{ij}^{(1)}(x, y)}{\partial y_j} = \rho(y) \frac{\partial^2 u^{(0)}(x)}{\partial t^2}. \quad (43)$$

Applying the average operator

$$\langle \langle \dots \rangle \rangle = \frac{1}{|Y|} \int (\dots) dy, \quad (44)$$

on equation (43), and using the symmetry of  $\sigma_{ij}^{(1)}(x, y)$ , an homogenized expression for Newton's law is obtained as

$$\frac{\partial \bar{\sigma}_{ij}^{(0)}(x)}{\partial x_j} = \bar{\rho} \frac{\partial^2 u^{(0)}(x)}{\partial t^2}, \quad (45)$$

where  $\bar{\rho} = \langle \rho(y) \rangle$  is the effective density and

$$\bar{\sigma}_{ij}^{(0)}(x) = \langle \sigma_{ij}^{(0)}(x, y) \rangle. \quad (46)$$

As seen in equation (40), the expression appearing on equation (46), does not depend only on the order of the approximations of the displacement  $u_n^{(0)}$ , but also depends on  $u_n^{(1)}(x, y)$ . To obtain this expression explicitly and the desired effective coefficients, the following function is proposed

$$u_n^{(1)}(x, y) = N_n^{kl}(y) \frac{\partial u_k^{(0)}(x)}{\partial x_l}. \quad (47)$$

Where the  $N_n^{kl}(y)$  factors are periodic functions which are called local functions. Substituting equation (47) into equation (40) for  $n = 0$ , the following expression is obtained

$$\sigma_{ij}^{(0)} = \left[ c_{ijkh}(y) + \tau_{ij}^{kh}(y) \right] \frac{\partial u_k^{(0)}}{\partial x_h}, \quad (48)$$

where  $\tau_{ij}^{kl}$  is the auxiliary function

$$\tau_{ij}^{kl}(y) = c_{ijnh}(y) \frac{\partial N_n^{kl}(y)}{\partial y_h}. \quad (49)$$

From equation (48),  $\sigma_{ij}$ , can be expressed explicitly and the effective coefficients may be determined. This involves the solution of local problems with the average given by equation (48), under the condition appearing in equation (42); therefore

$$\frac{\partial \tau_{ij}^{kl}(y)}{\partial y_j} = -\frac{\partial c_{ijkl}(y)}{\partial y_j}, \quad (50)$$

and the effective coefficients can be calculated as

$$\bar{c}_{ijkh} = \left\langle c_{ijkh}(y) + \tau_{ij}^{kh}(y) \right\rangle. \quad (51)$$

This way, the local problem is solved by using finite element methods.

## 5 Results and Discussion

When performing a geometry analysis of the composite material it is easily seen that the allowed volumetric fraction values in the case of cylindrical fibers is in the range  $(0, \pi/4)$ . For this reason, the effective elastic coefficients are calculated for the study of composites with different volumetric fractions of silicon carbide (SiC), between 0.1 and 0.7. The effective coefficients are calculated from the elastic properties given in Table 1. By analyzing such properties, it is observed that the isotropic property of the constituents is lost in the composite material, which behaves as a material with tetragonal symmetry. This feature is shown in Table 3.

A study of the symmetries obtained from (11 - 14) is performed on a bar with a volumetric fraction of 0.4, and the symmetries found are used in order to reduce the calculation of the previously homogenized cross section, to one quarter of the total surface. Dispersion curves for this bar are obtained without symmetry restrictions and also by applying the (11 - 14) symmetries. The curves are shown in Figure 4. It can be seen that the application of these symmetries as a whole, reproduces all calculated curves without any symmetry consideration. The reduction to one quarter of the original region is possible without any loss of information. The coincidence between the curves obtained from the two symmetries of flexural modes, can be observed. This proves that these modes are degenerate and their behavior is identical as shown in Figures ?? and ?. This resemblance can be explained since the bar geometry is symmetrical about the  $x = y$  plane, and therefore it is invariant under reflections about this plane. Using group theory also justifies the response of the



Table 3: Elastic effective coefficient to different volumetric fractions of SiC.

VF	$C_{11}$ (GPa)	$C_{12}$ (GPa)	$C_{13}$ (GPa)
0.1	105.26273	43.624520	42.253506
0.2	118.79638	46.703185	44.428877
0.3	135.56290	49.549692	46.997188
0.4	156.54774	52.170120	50.088282
0.5	183.17175	54.809171	53.920259
0.6	217.69622	58.362678	58.906543
0.7	264.29845	65.430909	65.934650

VF	$C_{33}$ (GPa)	$C_{44}$ (GPa)	$C_{66}$ (GPa)
0.1	132.12855	31.316891	30.325175
0.2	170.10660	36.494488	33.974813
0.3	208.18756	42.702496	38.123568
0.4	246.40543	50.342310	43.152588
0.5	284.81735	60.115917	49.736933
0.6	323.53157	73.404299	59.249799
0.7	362.78054	93.478412	75.390178

displacements given by equations (12) and (13) to modes of the two-dimensional representation  $E$ , of  $C_{4v}$ .

A program with a SAFEM implementation was developed in Matlab, in order to obtain the dispersion curves for a square bar with periodic cylindrical inclusions by using a square distribution. The graphical user interface is shown in Figure 5, and the implementation is based on the creation of a mesh with higher order elements, defined by eight-node quadrilaterals. Data for meshing, elastic properties of the materials, number of curves which are to be calculated and desired wave numbers are entered by the user. It can plot, phase velocity vs. frequency and frequency vs. wavenumber curves, and data from the numerical simulations can be saved for later use.

A convergence study of the dispersion curves by increasing the number of inclusions is performed. The calculations are done by changing the amount of inclusions from  $3 \times 3$  to  $11 \times 11$ . The invariance of the bar geometry under reflections about the  $x = y$  plane is proven as well. For this reason, the curves of the flexural modes are calculated in only one of the proposed symmetries for these modes. The dispersion curves for different amounts of inclusions in the heterogeneous material bar with a volumetric fraction of 0.4, are shown in Figures 6 and 7. In Figure 6 the phase velocity vs. frequency curves are shown, and in Figure 7 the frequency vs. wavenumber curves are also illustrated. In both cases these curves are shown together with the curves that correspond to the homogenized material. The convergence to the homogenized material can be appreciated by increasing the number of inclusions from  $3 \times 3$  to  $11 \times 11$ .

Another way of checking the convergence is by calculating maximum relative differences. These relative differences can be computed for each wave number as

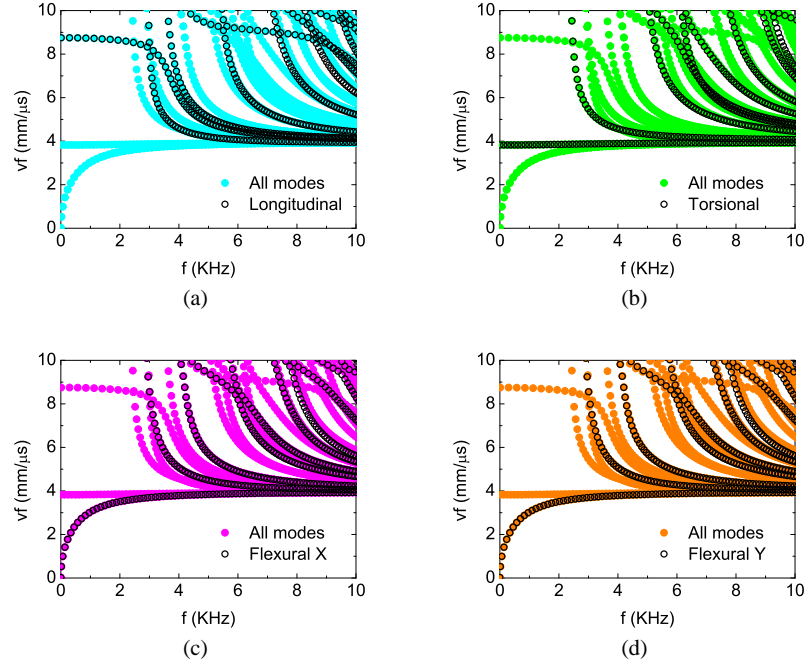


Fig. 4: Comparative graphics of dispersion curves for each symmetry and those calculated without any symmetry considerations.

$$d_{\xi} = \max \left( \left\| \left( \frac{f_{he}^{c\xi} - f_{ho}^{c\xi}}{f_{ho}^{c\xi}}, \frac{v_{he}^{c\xi} - v_{ho}^{c\xi}}{v_{ho}^{c\xi}} \right) \right\|_{\infty} \right), \quad (52)$$

where  $d_{\xi}$  is the relative difference associated with a wavenumber  $\xi$ ,  $f^{c\xi}$  and  $v^{c\xi}$  are the frequency and phase velocity respectively for an specific curve  $c$  with wavenumber  $\xi$ . The maximum of these differences may be obtained as

$$d_m = \max (d_{\xi}) \quad (53)$$

Maximum relative differences are shown in Table 4 as percentages, for different symmetries and different inclusion numbers for volumetric fractions of 0.4. The convergence of the heterogeneous material curves to the homogenized ones, can be confirmed by a monotonic decrease of these differences.

The value of 0.4 was chosen, since it is the mean value on the interval of possible values for the volumetric fraction. After analyzing the convergence behavior for this mean value it is necessary to study the behavior of the dispersion curves near the interval boundaries. This study is performed by using volumetric fractions of 0.1 and

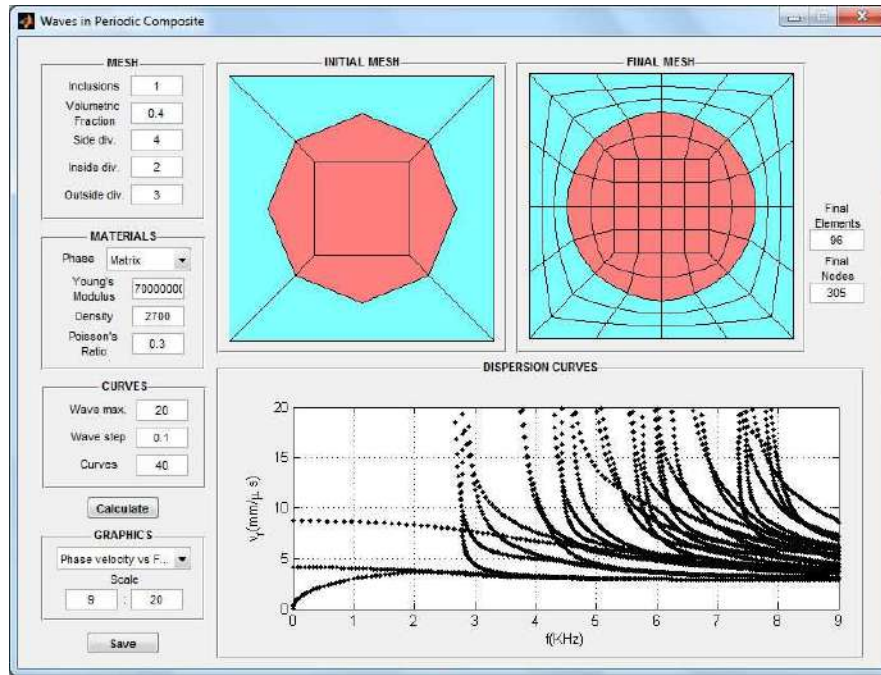
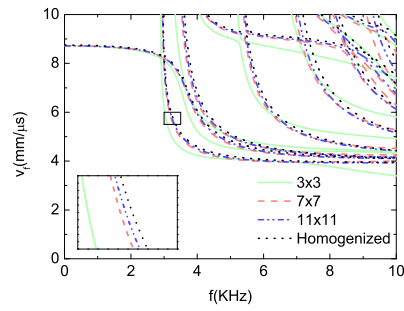


Fig. 5: Graphical Interface used to calculate dispersion curves for a square bar with periodic cylindric inclusions.

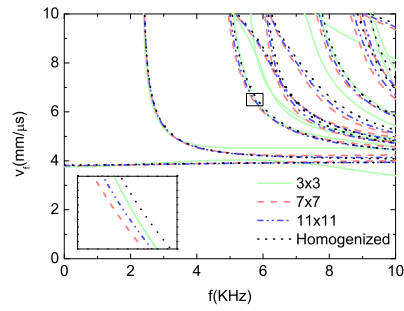
Table 4: Maximum relative difference between different inclusions number curves and homogenized curves for volumetric fraction 0.4.

Inclusion	Longitudinal	Torsional	Flexural
3 x 3	15.67 %	16.92 %	15.60 %
5 x 5	8.86 %	8.94 %	8.19 %
7 x 7	5.81 %	6.46 %	5.90 %
9 x 9	3.72 %	4.45 %	3.65 %
11 x 11	2.70 %	3.12 %	2.41 %

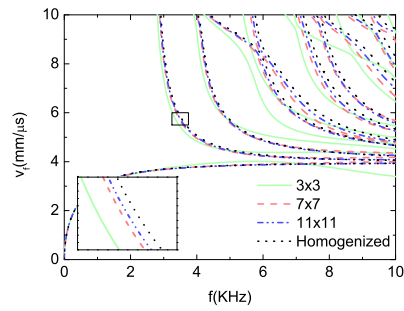
0.7 as the lower and upper limits of the interval. For an easier comparison, the results of these studies are shown in Table 5. From this table, it can be appreciated that in both cases, the convergence is faster than the 0.4 volumetric fraction case, shown in Table 4. Furthermore, for an initial case of  $3 \times 3$  inclusions, the values of maximum relative differences increase with volumetric fraction, where the smaller and higher difference corresponds to a volumetric fraction of 0.1 and 0.7, respectively.



(a)

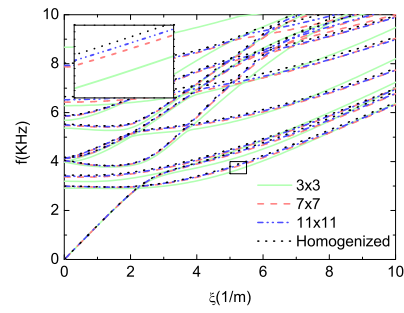


(b)

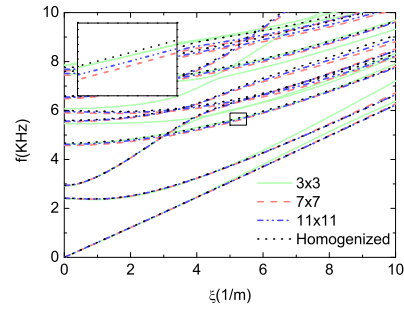


(c)

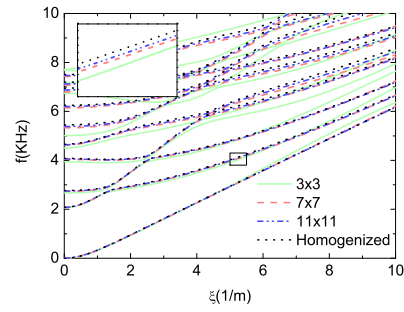
Fig. 6: Comparative graphics of dispersion curves (phase velocity vs. frequency) for each symmetry and those calculated without symmetry.



(a)



(b)



(c)

Fig. 7: Comparative graphics of dispersion curves (frequency vs. wavenumber) for each symmetry and these calculated without symmetry.

Table 5: Maximum relative difference between curves with different number of inclusions and homogenized material curves for volumetric fractions of 0.1 and 0.7.

VF=0.1			
Inclusion	Longitudinal	Torsional	Flexural
3 x 3	5.04 %	5.81 %	7.25 %
5 x 5	5.03 %	5.15 %	4.03 %
7 x 7	3.50 %	2.03 %	3.09 %
9 x 9	2.51 %	1.90 %	2.19 %
11 x 11	1.91 %	1.86 %	1.86 %
VF=0.7			
Inclusion	Longitudinal	Torsional	Flexural
3 x 3	19.85 %	19.93 %	19.84 %
5 x 5	6.61 %	6.72 %	6.20 %
7 x 7	4.17 %	4.71 %	4.23 %
9 x 9	2.98 %	2.86 %	2.39 %
11 x 11	1.66 %	1.93 %	1.91 %

## 6 Conclusions

This chapter describes the finite elements method for obtaining phase velocity and frequency in squared waveguide bars with periodical cylindrical inclusions. A user interface application for obtaining dispersion curves in this study case is presented. Effective properties of equivalent homogeneous material are obtained through the Asymptotic Homogenization Method. The convergence of the obtained curves by increasing the number of inclusions in a composite compared to curves that belong to a homogeneous material is shown. It can guarantee that for a  $10 \times 10$  inclusions number, the maximum relative error being committed is less than 5% when calculated from the equivalent homogeneous material. A bar and waves symmetries study is performed allowing a problem size reduction to a bar with a quarter cross-section. Furthermore, these symmetries analysis allows the obtention of separated curves by the oscillation mode associated with each one.

## Acknowledgements

H.H. C and S.G. R acknowledges support from CONACyT. J.A. O acknowledges support from UAEM and ITESM. The authors deeply acknowledge discussions with Profs. R. Rodríguez-Ramos and J. Bravo-Castillero from Havana University.

## Bibliografía

1. P. Bocchini, M. ASCE, A. Marzani, and E. Viola. Graphical user interface for guided acoustic waves. *Journal of Computing in Civil Engineering*, 25(3):202–210, May 2011.
2. J. Bravo-Castillero, R. Guinovart-Díaz, R. Rodríguez-Ramos, F. J. Sabina, and R. Brenner. Unified analytical formulae for the effective properties of periodic fibrous composites. *Materials Letters*, 73:68–71, April 2012.
3. J. Bravo-Castillero, R. Rodríguez-Ramos, H. Mechkour, J. A. Otero, J. H. Cabanas, L. M. Sixto, R. Guinovart-Díaz, and F. J. Sabina. Homogenization and effective properties of periodic thermomagnetoelastic composites. *Journal of Mechanics of Materials and Structures*, 4(5):819–836, May 2009.
4. J. H. Cabanas, J. A. Otero, J. B. Castillero, R. Rodríguez-Ramos, and G. M. Galindo. Magneto-electro-elastic layered composite with variations in the magnetization orientation. *Nova Scientia*, 2010(4):58–76, 2010.
5. K. Challagulla, A. V. Georgiades, and A. L. Kalamkarov. Asymptotic homogenization modeling of smart composite generally orthotropic grid-reinforced shells: Part i theory. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 29(4):530–540, July–August 2010.
6. U. Gabbert, S. Kari, N. Bohn, and H. Berger. *Mechanics and Model-Based Control of Smart Materials and Structures*, chapter Numerical homogenization and optimization of smart composite materials, pages 59–68. Springer, 2010.
7. A. Galvagni and P. Cawley. The reflection of guided waves from simple supports in pipes. *Journal Acoustical Society of America*, 129(4):1869–1880, April 2011.
8. A. Georgiades, K. Challagulla, and A. Kalamkarov. Asymptotic homogenization modeling of smart composite generally orthotropic grid-reinforced shells: Part ii - applications. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 29(4):541–556, July–August 2010.
9. D. Hadjiiozi, A. Georgiades, and A. Kalamkarov. Dynamic modeling and determination of effective properties of smart composite plates with rapidly varying thickness. *International Journal of Engineering Science*, 56:63–85, July 2012.
10. T. Hayashi, W.-J. Song, and J. L. Rose. Guided wave dispersion curves for a bar with an arbitrary cross-section, a rod and rail example. *Ultrasonics*, 41(3):175–183, May 2003.
11. A. L. Kalamkarov, I. V. Andrianov, and V. V. Danishevskiy. Asymptotic homogenization of composite materials and structures. *Applied Mechanics Reviews*, 62:20, May 2009.
12. L. Laguerre and F. Treysse. Non destructive evaluation of seven-wire strands using ultrasonic guided waves. *European Journal of Environmental and Civil Engineering*, 15(4):487–500, October 2011.
13. L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics - Non-relativistic Theory*, volume 3 of *Course of Theoretical Physics*. Pergamon Press, 3rd edition, 1977.
14. M. Mazzotti, A. Marzani, I. Bartoli, and E. Viola. Guided waves dispersion analysis for prestressed viscoelastic waveguides by means of the safe method. *International Journal of Solids and Structures*, 49(18):2359–2372, September 2012.
15. S. Mizuno and N. Nishiguchi. Acoustic phonon modes and dispersion relations of nanowire superlattices. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(195303):11, April 2009.
16. J. Otero, N. Galarza, B. Rubio, and E. Moreno. Semi-analytical finite elements methods for dispersion curves using higher order elements for long range ultrasonic testing. *IEEE International Ultrasonics Symposium Proceedings*, pages 1966–1969, 2009.
17. J. A. Otero, R. Rodríguez-Ramos, J. Bravo-Castillero, R. Guinovart-Díaz, F. J. Sabina, and G. Monsivais. Semi-analytical method for computing effective properties in elastic composite under imperfect contact. *International Journal of Solids and Structures*, 50(3–4):609–622, February 2013.
18. B. Pavlakovic. *Leaky Guided Ultrasonic Waves in NDT*. PhD thesis, Imperial College London, <http://www3.imperial.ac.uk/pls/portallive/docs/1/50549702.PDF>, October 1998.
19. B. Pavlakovic and M. Lowe. *DISPERSE. A system for Generating Dispersion Curves. V. 2.0.16B*. Department of Mechanical Engineering, Imperial College, London, July 2003.

20. R. Rodríguez-Ramos, H. Berger, R. Guinovart-Díaz, J. C. López-Realpozo, M. Würlner, U. Gabbert, and J. Bravo-Castillero. Two approaches for the evaluation of the effective properties of elastic composite with parallelogram periodic cells. *International Journal of Engineering Science*, 58:2–10, September 2010.
21. F. Schöpfer, F. Binder, A. Wöstehoff, and T. Schuster. A mathematical analysis of the strip-element method for the computation of dispersion curves of guided waves in anisotropic layered media. *Mathematical Problems in Engineering*, 2010:17, 2010.
22. S. Sharma and A. Mukherjee. Longitudinal guided waves for monitoring chloride corrosion in reinforcing bars in concrete. *Structural Health Monitoring*, 9(555):555–567, October 2010.
23. R. Weber, S. Mohammad, H. Hosseini, and U. Gabbert. Numerical simulation of the guided lamb wave propagation in particle reinforced composites. *Composite Structures*, 94(10):3064–3071, October 2012.





# Generación de minibandas en el coeficiente de absorción intrabanda en puntos cuánticos esféricos multicapas $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$

Karla Arely Rodríguez-Magdaleno

## Abstract

The study of the intra-band absorption coefficient in multilayer spherical quantum points  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  is performed. The configuration of the quantum dots is proposed by alternating layers of the semiconductor materials  $GaAs$  and  $Al_xGa_{1-x}As$ , having a minimum of two layers and a maximum of four. The size of the internal and external radii, the concentration of Aluminum,  $x$ , as well as the number of layers, are the parameters by which the behavior of the absorption coefficient is studied. Radial envelope wave functions and energy levels are obtained using Bessel and Neumann functions by imposing the boundary and matching conditions at each interface, using the effective mass approximation and the hybrid matrix method (**H**) which efficiently resolves the numerical instabilities that appear in multilayer systems. The calculation of the intra-band absorption coefficient for the main transition (states  $1s$  and  $1p$ ) is calculated by means of Fermi's golden rule under the dipolar approximation. Through the control of the overlap of the absorption coefficients of a distribution of quantum dots with different values of the internal and external radii, as well as the number of layers and the concentration of Aluminum  $x$ , the formation of a miniband of the coefficient of absorption can be achieved. Our results show that when you have a distribution of quantum dots composed of two layers with different values in the internal radius  $r_1$ , you will obtain a better shaped miniband with a greater absorption spectrum.

Se realiza el estudio del coeficiente de absorción intrabanda en puntos cuánticos esféricos multicapas  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ . La configuración de los puntos cuánticos se propone alternando capas de los materiales semiconductores  $GaAs$  y  $Al_xGa_{1-x}As$ ,

---

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa, S/N. C.P. 98060. Zacatecas, Zacatecas, México.  
Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México. e-mail: karelyrod@gmail.com

teniendo un mínimo de dos capas y un máximo de cuatro. El tamaño de los radios internos y externos, la concentración de Aluminio  $x$ , así como el número de capas, son los parámetros mediante los cuales se estudia el comportamiento del coeficiente de absorción. Las funciones de onda envolventes radiales y los niveles de energía son obtenidos usando funciones de Bessel y Neumann imponiendo las condiciones de frontera y empalme en cada interfaz, mediante la aproximación de masa efectiva y usando el método de la matriz híbrida (**H**) que resuelve inestabilidades numéricas que aparecen en los sistemas multicapas. El cálculo del coeficiente de absorción intrabanda entre la transición principal (estado  $1s$  y  $1p$ ) se calcula por medio de la regla de oro de Fermi bajo la aproximación dipolar. A través del traslape de los coeficientes de absorción de una distribución de puntos cuánticos con distintos valores de los radios internos y externos, así como el número de capas y la concentración de Aluminio  $x$ , se propone la formación de una minibanda del coeficiente de absorción. Los resultados muestran que cuando se tiene una distribución de puntos cuánticos compuesto por dos capas con distintos valores en el radio interno  $r_1$ , se tiene una minibanda mejor formada y con un mayor espectro de absorción.

## 1 Introducción

En los últimos años las técnicas experimentales han permitido la propuesta y fabricación de estructuras nanoscópicas prácticamente perfectas. Estas estructuras poseen o producen propiedades diversas e interesantes respecto de las que muestran los materiales masivos, en particular, cuando se fabrican a partir de materiales semiconductores. En estos sistemas semiconductores, en función del tamaño y forma de la nanoestructura, se tiene un mayor o menor confinamiento cuántico. Desde el punto de vista aplicado, la necesidad de buscar aparatos ópticos y electrónicos más confiables y eficientes, motiva el estudio, propuesta y desarrollo de dispositivos semiconductores que involucren confinamiento cuántico. Dentro de estos sistemas se encuentran: los pozos cuánticos, hilos cuánticos y puntos cuánticos [1]. En los puntos cuánticos hay un confinamiento en las tres direcciones.

Es preciso mencionar que existen puntos cuánticos coloidales, los cuales son partículas semiconductoras nanométricas suspendidas en una fase líquida [2] y puntos cuánticos auto ensamblados [3], los cuales se producen mediante crecimiento epitaxial y son los estudiados en este trabajo. El confinamiento en los puntos cuánticos se debe a los potenciales electrostáticos (generados por electrodos externos, dopaje, tensión, impurezas, etc.), así como también a la presencia de una interfaz entre diferentes materiales semiconductores [4].

Los sistemas que contienen puntos cuánticos han sido propuestos como fotodetectores infrarrojos [5], transistores de puntos cuánticos [6], láseres de puntos cuánticos [7] y celdas solares [8].

Los puntos cuánticos multicapas son puntos cuánticos que en su mayoría tienen una simetría esférica. Consisten básicamente en un punto cuántico esférico de algún material semiconductor (que en este caso representa el llamado *core* o núcleo del

punto cuántico) cubierto por otro material semiconductor, siendo éste comúnmente conocido como *shell* (capa, cascarón o coraza). Los semiconductores frecuentemente utilizados en estos puntos son compuestos II-VI, IV-VI y III-V, en donde el primer grupo representa al core y el segundo al shell. La alineación de las bandas de conducción y de valencia dependen de los gaps (brechas energéticas prohibidas) de los materiales semiconductores y dan lugar a dos tipos de puntos cuánticos, llamados tipo *I* y tipo *II*. En la Figura 1 se muestra un punto cuántico compuesto por dos capas; uno tipo *I* (a) y otro tipo *II* (b).

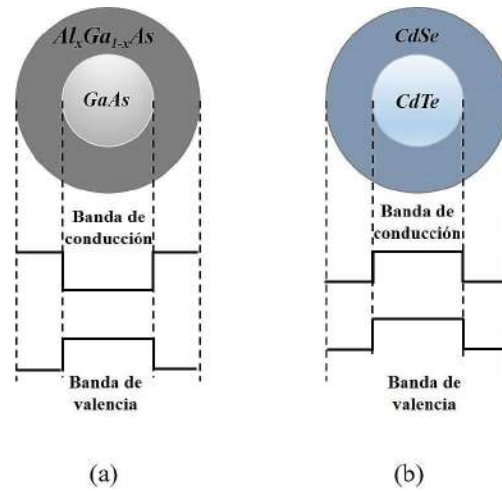


Fig. 1: Punto cuántico core-shell (a) Tipo *I* y (b) Tipo *II*

Actualmente, los puntos cuánticos core-multi-shell son estudiados debido a que muestran propiedades electrónicas y ópticas muy interesantes. El estudio teórico de estos sistemas representa una propuesta interesante para el control de las propiedades ópticas, viéndose modificadas por la incorporación de impurezas donoras, aplicación de campos eléctricos y magnéticos así como diferentes potenciales de confinamiento [1, 9, 10, 11] y así mejorar el funcionamiento de los dispositivos optoelectrónicos.

## 2 Metodología

### 2.1 Aproximación de masa efectiva

Usando la aproximación de masa efectiva y el formalismo de BenDaniel-Duke [12] se tiene que la función de onda envolvente se determina a partir de la ecuación

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left( \frac{1}{m^*(\mathbf{r})} \right) \nabla + V(\mathbf{r}) \right] F_n(\mathbf{r}) = E F_n(\mathbf{r}). \quad (1)$$

En este trabajo se está considerando una simetría esférica, para la cual el operador  $\nabla$  se escribe en coordenadas esféricas. Realizando la separación de variables, para la parte angular se tiene la conocida ecuación diferencial

$$\frac{1}{Y(\theta, \phi)} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial Y(\theta, \phi)}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 Y(\theta, \phi)}{\partial \phi^2} \right\} = -\ell(\ell + 1), \quad (2)$$

cuya solución son los llamados armónicos esféricos  $Y(\theta, \phi) = Y_\ell^m(\theta, \phi)$ .

Para la dirección radial, la ecuación diferencial resultante es

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dr} \left( \frac{1}{m^*(r)} \frac{d}{dr} \right) + \frac{\ell(\ell + 1)\hbar^2}{2m^*(r)r^2} + V(r) \right] R_{n\ell}(r) = E_{n\ell} R_{n\ell}(r), \quad (3)$$

siendo  $\hbar$  la constante de Planck dividida entre  $2\pi$ , en tanto  $m^*(r)$  es la masa efectiva del electrón -dependiente de la posición-,  $E_{n\ell}$  son los niveles de energía electrónicos,  $R_{n\ell}(r)$  representa las funciones de onda radiales. Los subíndices "n" y "ℓ" designan al número cuántico principal y angular, respectivamente. Por otra parte, el potencial de confinamiento  $V(r)$  es

$$V(r) = \begin{cases} V_1, & 0 \leq r \leq r_1 \\ \vdots & \\ V_i & r_{i-1} < r \leq r_i \\ \infty & r > r_{i_{max}}, \end{cases} \quad (4)$$

donde  $i = 2, 3$  y  $4$  y  $r_{i_{max}}$  representa el radio externo del último shell. Para los shells de  $GaAs$ , el valor del potencial de confinamiento es cero, mientras que para los shells de  $Al_xGa_{1-x}As$  éste depende del band offset, el cual es, en este caso,

$$V_i = 0.658[1.155x_i + 0.37x_i^2] \text{ eV}, \quad (5)$$

aquí  $x_i$  representa la concentración de Aluminio en la aleación. La función de onda radial propuesta para cada región está dada entonces por

$$R_{n\ell}(r) = \begin{cases} A_1 j_\ell(k_1 r) & r \leq r_1 \\ \vdots & \\ A_i j_\ell(k_i r) + B_i n_\ell(k_i r) & r_{i-1} < r \leq r_i \\ 0 & r > r_{i_{\max}}, \end{cases} \quad (6)$$

con  $k_i = \sqrt{2m_i^*(E_{n\ell} - V_i)/\hbar^2}$ , lo cual es también válido para el caso  $i=1$ . Aquí,  $j_\ell(k_i r)$  y  $n_\ell(k_i r)$  son las funciones de Bessel y Neumann, respectivamente [13]. Con todo esto, las funciones de frontera y empalme se pueden escribir como

$$R_{n\ell}(r_{i-1}-) = R_{n\ell}(r_{i-1}+), \quad (7)$$

$$\frac{R'_{n\ell}(r_{i-1}-)}{m^*(r_{i-1}-)} = \frac{R'_{n\ell}(r_{i-1}+)}{m^*(r_{i-1}+)}, \quad (8)$$

$$R_{n\ell}(r_{i_{\max}}) = 0 \quad (9)$$

donde  $R'_{n\ell}/m^*(r_{i-1})$  es la derivada radial de la función de onda,  $m^*(r_{i-1}-) = m_{i-1}^*$  and  $m^*(r_{i-1}+) = m_i^*$ . La masa efectiva como función de la composición de Al es [14]

$$m_i^* = 0.067m_0 + (0.083m_0)x_i \quad (10)$$

siendo  $m_0$  la masa del electrón en el vacío.

En los estudios de estos sistemas a capas surgen problemas de inestabilidades numéricas, como el así llamado problema  $\Omega$ d. Para evitar este tipo de situaciones, se recurre al uso de el método de la matriz híbrida ( $\mathbf{H}$ ). La matriz híbrida  $\mathbf{H}(r_i, r_{i-1})$  que relaciona las funciones de onda radiales y su correspondiente forma diferencial en el radio interno y externo de un solo shell puede ser expresada mediante la definición dada en la referencia [15]

$$\begin{vmatrix} R_{n\ell}(r_{i-1}) \\ \frac{R'_{n\ell}(r_i)}{m^*(r_i)} \end{vmatrix} = \mathbf{H}(r_i, r_{i-1}) \cdot \begin{vmatrix} \frac{R'_{n\ell}(r_{i-1})}{m^*(r_{i-1})} \\ R_{n\ell}(r_i) \end{vmatrix}. \quad (11)$$

La matriz  $\mathbf{H}(r_i, r_{i-1})$  puede ser expresada en términos de las soluciones (LI)  $j_\ell(k_i r)$  y  $n_\ell(k_i r)$  considerando que la función de onda radial  $R_{n\ell}$  es expresada como una combinación lineal de estas soluciones linealmente independientes (ver Ec. (6)). Después de un álgebra sencilla los coeficientes  $A_i$  y  $B_i$  se eliminan, de forma tal que la matriz híbrida se puede expresar como

$$\mathbf{H}(r_i, r_{i-1}) = \begin{bmatrix} j_\ell(k_i r_{i-1}) & n_\ell(k_i r_{i-1}) \\ k_i \frac{j'_\ell(k_i r_i)}{m_i^*} & k_i \frac{n'_\ell(k_i r_i)}{m_i^*} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} k_i \frac{j'_\ell(k_i r_{i-1})}{m_i^*} & k_i \frac{n'_\ell(k_i r_{i-1})}{m_i^*} \\ j_\ell(k_i r_i) & n_\ell(k_i r_i) \end{bmatrix}^{-1}. \quad (12)$$

Para un dominio de barrera y energías  $E_{n\ell} < V_i$ , se puede verificar que  $\mathbf{H}(r_i, r_i) = \{\{0, 1\}, \{1, 0\}\}$  (el ancho del shell es  $\Delta r=0$ ) y para  $\Delta r \rightarrow \infty$ ,  $\mathbf{H}(r_i \rightarrow \infty, r_{i-1}) = \{\{\mathbf{H}_{11}, 0\}, \{0, \mathbf{H}_{22}\}\}$ , donde los bloques de matriz  $\mathbf{H}_{11}$  y  $\mathbf{H}_{22}$  representan dos valores finitos. Ambos resultados están en acuerdo con la convergencia de la matriz híbrida estudiada en la Ref. ([15]) para un  $k_i$  complejo.

Aplicando un algoritmo recursivo, la matriz híbrida total de un apilamiento de  $m$  capas,  $\mathbf{H}_{(m,1)} \equiv \mathbf{H}(r_{m+1}, r_1)$ , se define en términos de la matriz híbrida total de las primeras  $m-1$  capas,  $\mathbf{H}_{(m-1,1)} \equiv \mathbf{H}(r_m, r_1)$ , y de la matriz híbrida de las  $m$ -ésima capa,  $\mathbf{H}_{(m)} \equiv \mathbf{H}(r_{m+1}, r_m)$ , como sigue

$$\mathbf{H}_{11(m,1)} = \mathbf{H}_{11(m-1,1)} + \mathbf{H}_{12(m-1,1)} \cdot \mathbf{H}_{11(m)} \cdot \text{Inv} \cdot \mathbf{H}_{21(m-1,1)}; \quad (13)$$

$$\mathbf{H}_{12(m,1)} = \mathbf{H}_{12(m-1,1)} \cdot [1 + \mathbf{H}_{11(m)} \cdot \text{Inv} \cdot \mathbf{H}_{22(m-1,1)}] \cdot \mathbf{H}_{12(m)}; \quad (14)$$

$$\mathbf{H}_{21(m,1)} = \mathbf{H}_{21(m)} \cdot \text{Inv} \cdot \mathbf{H}_{21(m-1,1)}; \quad (15)$$

$$\mathbf{H}_{22(m,1)} = \mathbf{H}_{22(m)} + \mathbf{H}_{21(m)} \cdot \text{Inv} \cdot \mathbf{H}_{22(m-1,1)} \cdot \mathbf{H}_{12(m)}; \quad (16)$$

$$\text{Inv} = [1 - \mathbf{H}_{22(m-1,1)} \cdot \mathbf{H}_{11(m)}]^{-1}. \quad (17)$$

Para una heteroestructura compuesta por  $m$  capas se tiene

$$\begin{bmatrix} R_{n\ell}(r_1) \\ \frac{R'_{n\ell}(r_{m+1})}{m^*(r_{m+1})} \end{bmatrix} = \mathbf{H}(r_{m+1}, r_1) \cdot \begin{bmatrix} \frac{R'_{n\ell}(r_1)}{m^*(r_1)} \\ R_{n\ell}(r_{m+1}) \end{bmatrix} \quad (18)$$

donde la matriz  $\mathbf{H}(r_{m+1}, r_1)$  se determina usando el algoritmo recursivo mencionado anteriormente. Asumiendo  $r_{m+1} = r_{imax}$  y tomando en cuenta la condición de frontera  $R_{n\ell}(r_{imax}) = 0$ , se obtiene la siguiente ecuación secular a partir de (18):

$$\mathbf{H}_{11}(r_{m+1}, r_1) k_1 \frac{j'_\ell(k_1 r_1)}{m_1} - j_\ell(k_1 r_1) = 0. \quad (19)$$

Esta ecuación permite calcular los niveles de energía en el punto cuántico esférico multicapa.

## 2.2 Coeficiente de absorción

El Hamiltoniano que describe la interacción de electrones y fotones está dado por

$$H = \frac{1}{2m}(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + V(r). \quad (20)$$

La absorción se define cualitativamente como

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{R(\hbar\omega)}{N(\hbar\omega)}, \quad (21)$$

donde

$R(\hbar\omega)$  = Número de fotones absorbidos por unidad de volumen y por tiempo.

$N(\hbar\omega)$  = Número de fotones incidentes por unidad de área y por tiempo.

Siendo

$$N(\hbar\omega) = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega A_0^2}{2\hbar\omega} \quad (22)$$

y

$$R(\hbar\omega) = W_{fi} - W_{if}, \quad (23)$$

Usando la regla de oro de Fermi se tiene que

$$W_{fi} = \frac{2}{V} \sum_{k_i} \sum_{k_f} \frac{2\pi}{\hbar} |H_{fi}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) f_i (1 - f_f) \quad (24)$$

y

$$W_{if} = \frac{2}{V} \sum_{k_i} \sum_{k_f} \frac{2\pi}{\hbar} |H_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) f_f (1 - f_i), \quad (25)$$

por lo tanto la tasa de absorción neta será

$$R(\hbar\omega) = W_{fi} - W_{if} = \frac{2}{V} \sum_{k_i} \sum_{k_f} \frac{2\pi}{\hbar} |H_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega) (f_i - f_f) \quad (26)$$

y el coeficiente de absorción

$$\alpha(\hbar\omega) = \left( \frac{\pi e^2}{n_r c \epsilon_0 m^2 \omega} \right) \frac{2}{V} \sum_k |\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{if}|^2 \delta(E_f(k) - E_i(k) - \hbar\omega) (f_i - f_f) l, \quad (27)$$

el cual dependerá de los elementos matriciales inter o intrabanda.



### 2.3 Coeficiente de absorción intrabanda

Suponiendo que se quiere calcular el coeficiente de absorción intrabanda tal que solo se tiene el término

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} | i \rangle = S_{fi} \int dv F_f^*(\mathbf{r}) \mathbf{e} \cdot \mathbf{p} F_i(\mathbf{r}), \quad (28)$$

con  $S_{fi} = \frac{1}{V_0} \int dv u_f^*(\mathbf{r}) u_i(\mathbf{r})$ .

Si  $\mathbf{p}_{fi} = im\omega \mathbf{r}_{fi}$ , por lo tanto para el coeficiente de absorción se tiene

$$\alpha(\hbar\omega) = \left( \frac{\pi e^2}{n_r c \epsilon_0 m^2 \omega} \right) \frac{2}{V} \sum_k |\mathbf{e} \cdot (im\omega) \mathbf{r}_{fi}|^2 \delta(E_f(k) - E_i(k) - \hbar\omega), \quad (29)$$

tal que en términos del momento dipolar está dado por

$$\alpha(\hbar\omega) = \left( \frac{\pi \omega}{n_r c \epsilon_0} \right) \frac{2}{V} \sum_k |\mathbf{e} \cdot \boldsymbol{\mu}_{fi}|^2 \delta(E_f(k) - E_i(k) - \hbar\omega), \quad (30)$$

con  $\boldsymbol{\mu}_{fi} = \langle f | e \mathbf{r} | i \rangle$ . Cuando se considera un tiempo de relajación, la función  $\delta$  puede ser remplazada por una función Lorentziana con un ancho  $\Gamma$

$$\delta(E_f - E_i - \hbar\omega) \rightarrow \frac{\Gamma}{2\pi(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}, \quad (31)$$

por lo tanto la fórmula general para el coeficiente de absorción intrabanda es

$$\alpha(\hbar\omega) = \left( \frac{\pi \omega e^2}{n_r c \epsilon_0} \right) \frac{2}{V} \sum_k |\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}_{fi}|^2 \frac{\Gamma}{2\pi(E_f - E_i - \hbar\omega)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}. \quad (32)$$

#### 2.3.1 Coeficiente de absorción intrabanda en un punto cuántico esférico

Las funciones de onda envolventes para un punto cuántico esférico están dadas por

$$F_f(\mathbf{r}) = F_{n_f, \ell_f, m_f}(\mathbf{r}) = Y_{\ell_f}^{m_f}(\theta, \varphi) R_{n_f \ell_f}(r) \quad (33)$$

$$F_i(\mathbf{r}) = F_{n_i, \ell_i, m_i}(\mathbf{r}) = Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta, \varphi) R_{n_i \ell_i}(r), \quad (34)$$

sustituyendo en  $\langle f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | i \rangle$  se tiene

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | i \rangle = \int Y_{\ell_f}^{m_f*}(\theta, \varphi) R_{n_f \ell_f}^*(r) (\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}) Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta, \varphi) R_{n_i \ell_i}(r) r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (35)$$

Suponiendo una polarización en z, el elemento  $|\mathbf{e} \cdot \mathbf{r}_{fi}|$  será

$$\langle f | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | i \rangle = \int (Y_{\ell_f}^{m_f}(\theta, \varphi) R_{n_f \ell_f}(r))^* r \cos(\theta) Y_{\ell_i}^{m_i}(\theta, \varphi) R_{n_i \ell_i}(r) r^2 \sin(\theta) dr d\theta d\varphi. \tag{36}$$

con las reglas de selección  $\Delta n=0, \Delta \ell=\pm 1$  y  $\Delta m=0, \pm 1$ .

### 3 Resultados

En esta sección se presentan los resultados obtenidos del cálculo del coeficiente de absorción entre los estados  $1s$  y  $1p$  y la generación de una minibanda para un punto cuántico esférico compuesto por dos, tres y cuatro capas de los materiales semiconductores  $GaAs/AlGaAs$  en función del tamaño de los radios internos y externos, así como de la concentración de aluminio, tal y con la configuración que se muestra en la Figura 2. Se considera  $m=0$  y  $\Gamma=5$  meV.

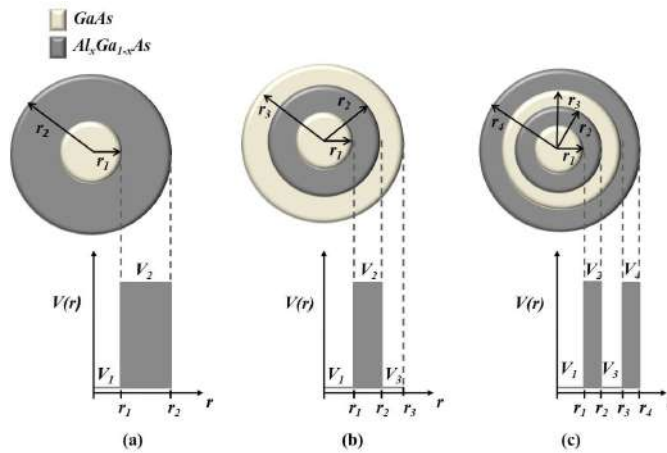


Fig. 2: Representación esquemática de un punto cuántico esférico compuesto por (a) dos capas, (b) tres capas y (c) cuatro capas.

En la Figura 3 se presenta el coeficiente de absorción para un punto cuántico compuesto por dos capas para distintos valores de  $r_1$ , el radio externo se fija en 30 nm y la concentración de Al es  $x = 0.2$ . Los valores de  $r_1$  que se toman en cuenta son de 7 a 25 nm. Se puede observar como es que conforme el  $r_1$  va incrementando, el coeficiente de absorción va experimentando un corrimiento hacia el lado izquierdo, o bien una disminución de la diferencia de energía de la transición  $1s - 1p$ , esto ocurre debido a que la región de la primera capa aumenta y por lo tanto el valor de los niveles de energía disminuye. La línea sólida gris representa la suma de los

coeficientes que corresponden a  $r_1=7\text{nm}-25\text{ nm}$ , esto con la finalidad de generar una minibanda en el coeficiente de absorción, considerando que se tiene una distribución de 18 puntos cuánticos con los valores de  $r_1$  mencionados anteriormente. En este caso se tiene un espectro de absorción con un rango de energía de 3 a 70 meV. La mayor intensidad del espectro de absorción corresponde al rango del radio interno  $r_1=10\text{-}20\text{ nm}$ .

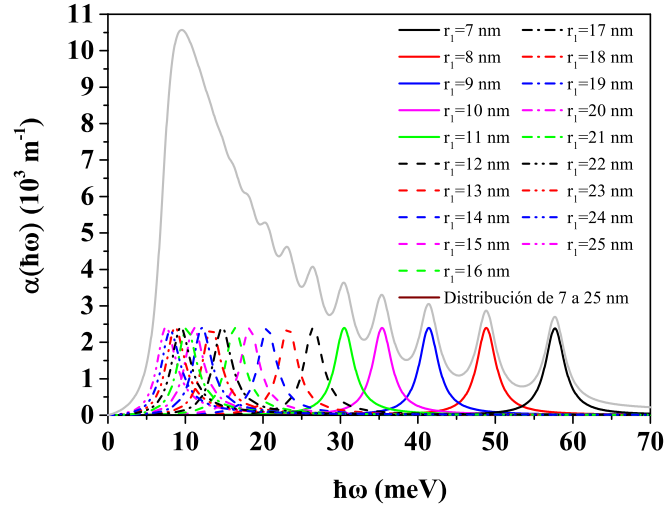


Fig. 3: Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para distintos valores de  $r_1$ , el radio externo  $r_2$  es fijo en 30 nm y la concentración de Al para la capa de  $Al_xGa_{1-x}As$  es  $x = 0.2$ . La línea gris corresponde a la minibanda del coeficiente de absorción considerando una distribución gaussiana de  $r_1$  en 16 nm.

En la Figura 4 se presentan los mismos cálculos del coeficiente de absorción que en la Fig. 3, sin embargo, la línea en color guinda representa la suma de los coeficientes de absorción considerando una distribución gaussiana, tomando como promedio  $r_1=16\text{ nm}$  con una desviación estándar de  $\sigma=5.62731\text{ nm}$ . Se observa como es que esta distribución genera una minibanda mucho mas pequeña que la reportada en la Fig. 3, además de tener menos intensidad. La propuesta de este mecanismo para generar la minibanda es considerar la dispersión del radio interior en el crecimiento experimental del sistema, mientras que en la Fig. 3 los puntos cuánticos esféricos deben ser crecidos con diferentes tamaños del radio interior, de manera tal que la minibanda sea mas ancha.

En la Figura 5 se presenta el coeficiente de absorción y la generación de una minibanda para un punto cuántico esférico core-shell  $GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As$ . El radio interior se fija a  $r_1=10, 15$  y  $20\text{ nm}$  y el radio externo  $r_2$ , se hace cada vez mas an-

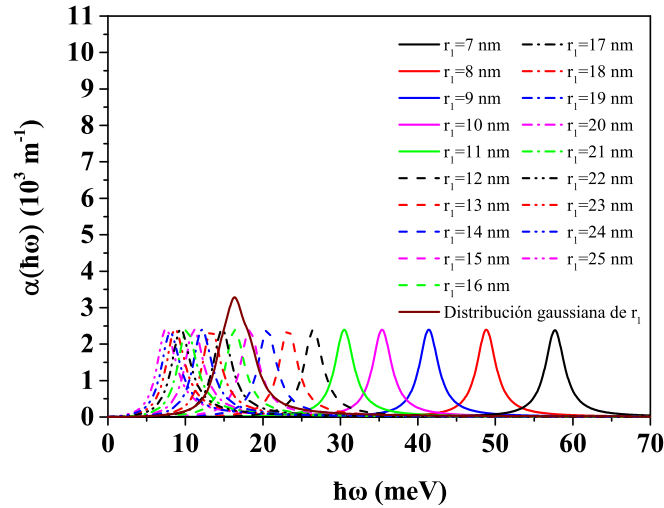


Fig. 4: Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para distintos valores de  $r_1$ , el radio externo  $r_2$  es fijo en 30 nm y la concentración de Al para la capa de  $Al_xGa_{1-x}As$  es  $x = 0.2$ . La línea guinda corresponde a la suma de los coeficientes de absorción considerando una distribución gaussiana de  $r_1$  en 16 nm.

cho. Las líneas sólidas representan el caso de  $r_1 = 10$  nm, las líneas discontinuas son para  $r_1 = 15$  nm y finalmente las líneas punteadas para  $r_1 = 20$  nm. En esta Figura se observa que cuando el radio interno  $r_1$  es fijo y el radio externo  $r_2$  aumenta, la intensidad del pico de resonancia del coeficiente de absorción disminuye, esto ocurre debido a que en la ecuación (32) se tiene el factor  $1/V$  siendo  $V$  el volumen del sistema que depende del radio externo  $r_2$ , entonces si este parámetro aumenta la intensidad del coeficiente de absorción disminuye. A simple vista, la posición del pico resonante no se mueve. Sin embargo, si comparamos el coeficiente de absorción para cada radio interno, el pico de resonancia experimenta un desplazamiento hacia el rojo como se muestra en la Figura 3. La línea gris corresponde a la minibanda del coeficiente de absorción donde se suman los coeficientes de absorción de una distribución de puntos con distinto valor del radio externo  $r_2$ . El espectro de la minibanda se encuentra en el rango de 5-45 meV con una intensidad más alta en la distribución donde los valores del radio interno son de alrededor de 10 nm.

La Figura 6 contiene los cálculos para el coeficiente de absorción de un punto cuántico core/shell  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ , aquí se consideran tres concentraciones de aluminio en la región de  $Al_xGa_{1-x}As$  (0.1, 0.15 y 0.2) y tres valores diferentes del radio interno (10, 15 y 20 nm), el radio externo se fija a 30 nm en todos los casos. La masa del electrón en el core es  $m_{GaAs} = 0.067m_0$  y las masas en el shell para  $x=0.1, 0.15$  y  $0.2$ , son  $0.0753 m_0, 0.0794 m_0, 0.0836 m_0$ , respectivamente. Cuando

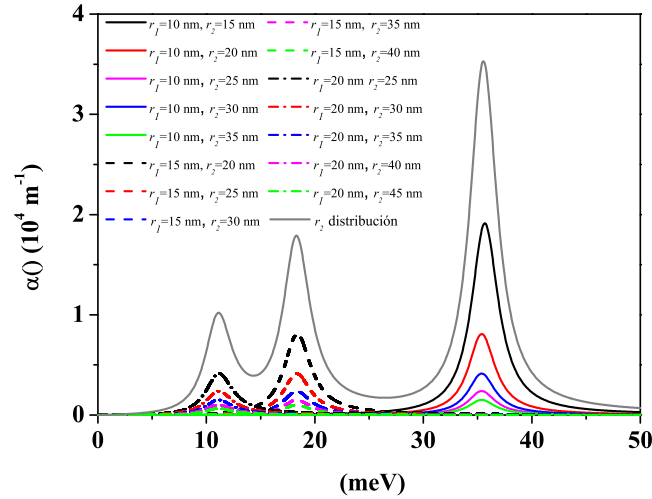


Fig. 5: Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para distintos valores de  $r_2$ , el radio externo  $r_1$  tiene valores de 10, 15 y 20 nm, la concentración de Al para la capa de  $Al_xGa_{1-x}As$  es  $x = 0.2$ . La línea gris representa la minibanda del coeficiente de absorción.

$r_1=10$  nm y el valor de  $x$  aumenta, el pico de resonancia del coeficiente de absorción cambia a energías mayores o bien, experimenta un corrimiento al azul, porque la diferencia de energía de transición aumenta. Para el caso de  $r_1=15$  nm y  $r_1=20$  nm se tiene el mismo comportamiento. Sin embargo, si comparamos el coeficiente de absorción entre los valores del radio interior, se experimenta un corrimiento hacia el rojo al igual que en el caso de la Figura 3.

En la Fig. 7 se presentan los resultados del coeficiente de absorción de un punto cuántico esférico compuesto por tres capas del sistema  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , tal como el de la Fig. 2(b), con distintos valores del radio interno  $r_1$  y de la segunda capa  $r_2 - r_1$ , siendo  $r_3=30$  nm y con una concentración  $x=0.2$ . Se puede ver como es que conforme aumenta el valor de  $r_1$  y  $r_2 - r_1$ , la intensidad del pico de absorción va disminuyendo, esto ocurre debido a que hay un menor solapamiento entre las funciones de onda radiales de los estados  $1s$  y  $1p$ . También se puede observar como es que el pico de resonancia experimenta un corrimiento hacia el azul ya que la diferencia de energía de la transición va aumentando. La Fig. 7(b) representa la minibanda generada por el solapamiento de los coeficientes de absorción intrabanda de la distribución de puntos con las configuraciones presentadas en la 7(a). Esta minibanda presenta un aumento en la intensidad del coeficiente de absorción en comparación del que tiene una mayor intensidad en la Fig. 7, además el espectro de esta minibanda se encuentra en la región de 0 a 30 meV.

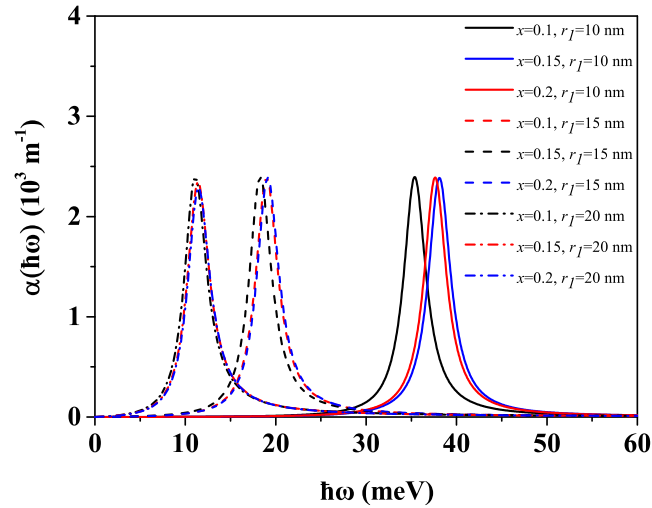


Fig. 6: Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para distintos valores de  $x$ , el radio externo  $r_1$  tiene valores de 10, 15 y 20 nm, y  $r_2=30$  nm.

El cálculo del coeficiente de absorción para un punto cuántico esférico del tipo  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  compuesto por cuatro capas (Fig. 2(c)) con distintos valores de  $r_1$ ,  $r_2 - r_1$  y  $r_3$ , se muestra en la Fig. 8. El radio externo  $r_4$  tiene un valor de 30 nm, mientras que la concentración de  $Al$  es 0.2. Las líneas sólidas negra, azul y roja representan los casos del coeficiente de absorción de un punto cuántico de  $r_1=5$ , 10 y 15 nm, respectivamente, con  $r_2 - r_1=2$  nm y  $r_3 - r_2=5$  nm. Se obtiene que conforme el radio interno  $r_1$  aumenta de 5 nm a 10 nm el pico de resonancia tiene un corrimiento hacia el azul, pero cuando incrementa de 10 a 15 nm ocurre lo contrario, es decir, hay un corrimiento hacia el rojo, esto se debe a que la energía de transición primeramente experimenta un aumento y posteriormente decrece. La intensidad del coeficiente también se ve afectada de la misma manera debido a que primeramente hay una disminución en el traslape de las funciones de onda radiales y posteriormente éste aumenta. Las líneas sólidas verde y rosa y la línea segmentada negra corresponden a  $r_2 - r_1=4$ , 6 y 8 nm, respectivamente, con  $r_1=5$  nm,  $r_3 - r_2=5$  nm. Los picos de resonancia tienen un corrimiento hacia el rojo debido a que la energía de transición disminuye, la intensidad del coeficiente de absorción primeramente aumenta y posteriormente disminuye. Finalmente, se tiene un corrimiento en el pico de resonancia hacia el rojo y un aumento en la intensidad cuando el ancho  $r_3 - r_2$  se modifica (7.5 nm-línea azul segmentada, 10 nm-línea roja segmentada y 15 nm-línea verde segmentada) dejando fijo  $r_1=5$  nm y  $r_2 - r_1=2$  nm. La Fig. 8(b) representa la minibanda del coeficiente de absorción intrabanda como resultado del solapamiento de los coeficientes de absorción de la distribución de pun-

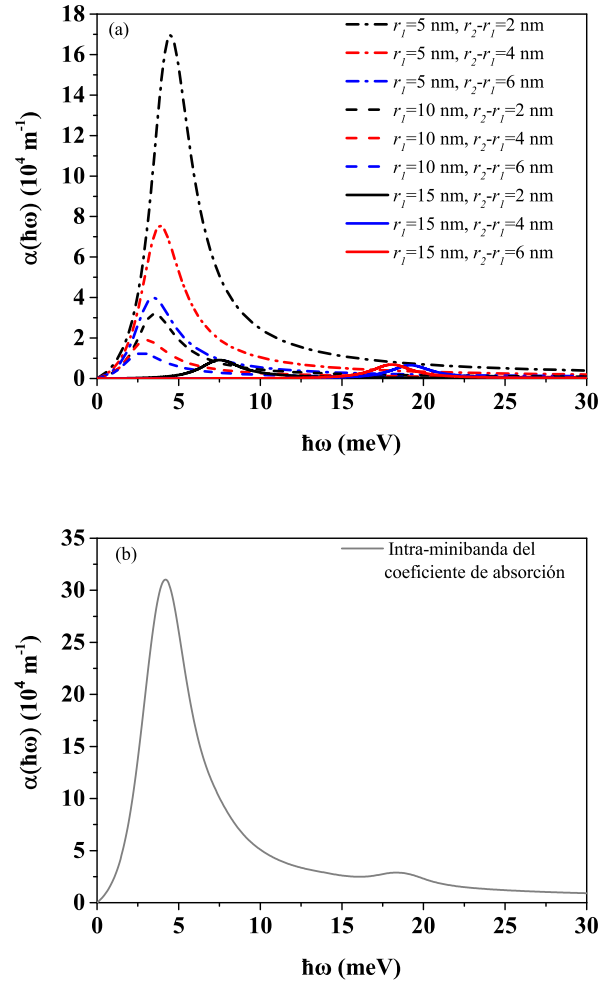


Fig. 7: (a) Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para un punto cuántico compuesto por tres capas  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$  (Fig. 2 (b)) con distintos valores de  $r_1$  y  $r_2 - r_1$  y  $r_3$  fijo en 30 nm, la concentración de Al es  $x = 0.2$ . (b) Minibanda del coeficiente de absorción intrabanda.

tos cuánticos presentados en la Fig. 8, esta minibanda presenta la mayor intensidad del espectro en  $23.78 \times 10^4 \text{ m}^{-1}$  con un rango energético de 2 a 40 meV.

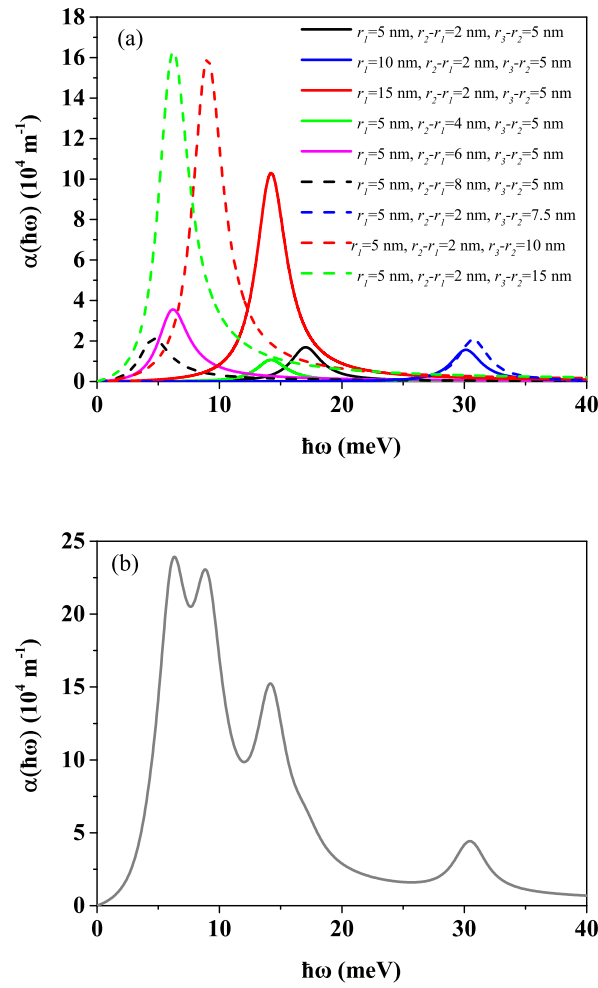


Fig. 8: (a) Coeficiente de absorción como función de  $\hbar\omega$  para un punto cuántico compuesto por cuatro capas  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  (Fig. 2 (c)) con distintos valores de  $r_1$ ,  $r_2 - r_1$  y  $r_3$ , con  $r_4$  fijo en 30 nm, la concentración de  $Al$  es  $x = 0.2$ . (b) Minibanda del coeficiente de absorción intrabanda.

## 4 Conclusiones

Para un punto cuántico esférico compuesto por dos capas se obtuvo que, al variar el ancho de la primera capa  $r_1$  de 7 a 25 nm, la intensidad del coeficiente no se ve afectada significativamente, no así el pico de resonancia, el cual tiene un corrimiento a



energías menores o bien un corrimiento hacia el rojo (lo mismo ocurre al cambiar la concentración de aluminio). La minibanda formada por esta distribución de puntos con los  $r_1$  correspondientes, nos da un espectro en la absorción de 3 a 70 meV, con una mayor intensidad en los puntos cuánticos que tienen un  $r_1$  de 10 a 15 nm. Al considerar una distribución Gaussiana en el tamaño de  $r_1$ , la minibanda generada tiene menor espectro que la anterior. Si el radio externo  $r_2$  es el que se modifica, la intensidad de los coeficientes de absorción experimenta una disminución debido a que el volumen del punto cuántico aumenta, de igual forma la minibanda presenta incrementos y disminuciones en su intensidad.

Para un punto cuántico compuesto por tres capas, con una concentración de Al de 0.2 y aumento en el ancho en la primera ( $r_1$ ) y segunda ( $r_2 - r_1$ ) capa, se obtiene que los picos de resonancia del coeficiente de absorción tienen corrimientos hacia el azul y hacia el rojo, así como disminución y aumento en la intensidad de la absorción. La minibanda obtenida con la distribución de puntos cuánticos aumenta su intensidad respecto de la obtenida en el punto cuántico de dos capas, sin embargo, su espectro de absorción es energéticamente menor.

Al aumentar el número de capas a cuatro y al cambiar los valores de  $r_1$ ,  $r_2 - r_1$  y  $r_3 - r_2$ , los coeficientes de absorción presentan corrimientos hacia el rojo y al azul así como cambio en la intensidad conforme el ancho de las capas incrementa, por lo tanto la minibanda generada por este sistema presenta cambios en la intensidad bastante significativos.

Como conclusión principal de este trabajo, si lo que se quiere es generar minibandas de absorción con mayor rango energético, se debe considerar tener una distribución de puntos cuánticos compuestos por dos capas, en los cuales el radio  $r_1$  se debe modificar.

## Agradecimientos

Agradezco a los Doctores R. Pérez-Álvarez y J. C. Martínez-Orozco por su asesoría en este trabajo. Así mismo, al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) por su apoyo económico a través de su Programa Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) mediante la beca 373838.

## Referencias

1. Paul Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. Wiley, second edition, 2005.
2. Jin Young Kim, Oleksandr Voznyy, David Zhitomirsky, and Edward H. Sargent. 25th Anniversary Article: Colloidal Quantum Dot Materials and Devices: A Quarter-Century of Advances. *Adv. Mater.*, **25**:4986–5010, 2013.
3. D. J. Mowbray and M. S. Skolnick. New physics and devices based on self-assembled semiconductor quantum dots. *J. Phys. D Appl. Phys.*, **38**:2059, 2005.

4. Tapash Chakraborty. *Quantum Dots: a survey of the properties of artificial atoms*. North-Holland.
5. Sourav Adhikary and Subhananda Chakrabarti. Spectral broadening due to post-growth annealing of a long-wave InGaAs/GaAs quantum dot infrared photodetector with a quaternary barrier layer. *Thin Solid Films*, **552**:146 – 149, 2014.
6. A. M. See, O. Klochan, A. P. Micolich, M. Aagesen, P. E. Lindelof, and A. R. Hamilton. A study of transport suppression in an undoped AlGaAs/GaAs quantum dot single-electron transistor. *J. Phys- Condens. Mat.*, **25**:505302, 2013.
7. M. Heidemann, S. Höfling, and M. Kamp. (In,Ga)As/GaP electrical injection quantum dot laser. *Appl. Phys. Lett.*, **104**:011113, 2014.
8. A. J. Nozik. Quantum dot solar cells. *Physica E*, **14**:115, 2002.
9. Hatice TaCs and Mehmet CSahin. The electronic properties of a core/shell/well/shell spherical quantum dot with and without a hydrogenic impurity. *J. Appl. Phys.*, **111**:083702, 2012.
10. Hatice TaCs and Mehmet CSahin. The inter-sublevel optical properties of a spherical quantum dot-quantum well with and without a donor impurity. *J. Appl. Phys.*, **112**:053717, 2012.
11. A. Dehyar, G. Rezaei, and A. Zamani. Electronic structure of a spherical quantum dot: Effects of the Kratzer potential, hydrogenic impurity, external electric and magnetic fields. *Physica E.*, **84**:175, 2016.
12. BenDaniel, D. J. and Duke, C. B. Space-Charge Effects on Electron Tunneling. *Phys. Rev.*, **152**:683, 1966.
13. Milton Abramowitz. *Handbook of Mathematical Functions, With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover Publications, Incorporated, 1974.
14. V. V. Ravi Kishore, B. Partoens, and F. M. Peeters. Electronic structure and optical absorption of GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As and Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As/GaAs core-shell nanowires. *Phys. Rev. B.*, **82**:235425, 2010.
15. R. Pérez-Álvarez, R. Pernas-Salomón, and V. R. Velasco. Relations between transfer matrices and numerical stability analysis to avoid the  $\Omega d$  problem. *SIAM J. Appl. Math.*, **75**:1403, 2015.



# Unitaridad y Simetría de la Matriz de Dispersión Multicomponente

L. Diago-Cisneros<sup>1,2</sup>, J. J. Flores-Godoy<sup>2</sup>, H. Rodríguez-Coppola<sup>1</sup>, G. Fernández-Anaya<sup>3</sup> and A. Mendoza-Álvarez<sup>3</sup>

## Resumen

Este capítulo está dedicado al estudio del problema del transporte cuántico sincrónico de huecos en sistemas físicos  $Q2D$  multibanda-multicanal, en el contexto de la matriz de dispersión (SM), en sistemas descritos por un sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales parciales de segundo orden y lineal. Los cálculos previos, se han basado en el empleo del modelo de Kohn-Luttinger, que considera solamente las dos bandas de valencia más altas energéticamente. En el presente trabajo, extendemos un modelo precedente, generalizándolo al caso de  $(N \times N)$  componentes mezcladas (para  $N \geq 2$ ) y demostramos que se recuperan las propiedades usuales de unitariedad de la SM. Predecimos que nuestro modelo es válido, cualquiera sea el modelo físico que se emplee para describir el sistema de capas en cuestión, en el marco de la aproximación de la función envolvente. Se espera que el nuevo enfoque, sea aplicable tal cual como lo proponemos o con algunas transformaciones ligeras.

*In this chapter we present the development of a theoretical procedure for describing several properties of the synchronous hole tunneling. Today the analysis of the unitarity and the analytic properties of the scattering matrix (SM) in problems well described with a system of second order differential equations with a first derivative term included, have been reviewed. In this work we generalize a prior approach by extending it to the problem of  $(N \times N)$  mixed components (with  $N \geq 2$ ) in the framework of the envelope function approximation, and have demonstrated that standard unitary properties of the SM are recovered when we use a basis of functions orthonormalized in both the configuration (which is the usual one) and the spinorial space. We predict that the present approach is valid for different kind of physical systems within the framework of the envelope function approximation, with small transformations if any.*

---

<sup>1</sup>Facultad de Física, Universidad de La Habana, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup>Departamento de Matemática, Universidad Católica del Uruguay, Montevideo, Uruguay

<sup>3</sup>Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Ciudad de México.  
e-mail: ldiago@fisica.uh.cu

## 1 Introducción

Este capítulo está dedicado al estudio del problema del transporte cuántico de huecos en sistemas físicos cuasi-bi-dimensionales ( $Q2D$ ) multibanda-multicanal. No obstante, los cálculos que se han hecho se han basado en el empleo del modelo de Kohn-Luttinger, que considera solamente las dos bandas de valencia (BV) más altas energéticamente y por ello se hablará de formas particulares de empleo en esta descripción. Es importante decir que muchos momentos del desarrollo de los argumentos del modelo que se describirán en este capítulo, tienen valor general, cualquiera sea el modelo físico que se emplee para describir el sistema de capas mostrado en la Figura 1. En cualquier modelo de la aproximación de la función envolvente (EFA: *Envelope Function Approximation*, en inglés) regido por un sistema de ecuaciones diferenciales como el planteado en (1), se espera que sea aplicable el nuevo enfoque tal cual como lo proponemos o con sólo algunas transformaciones.

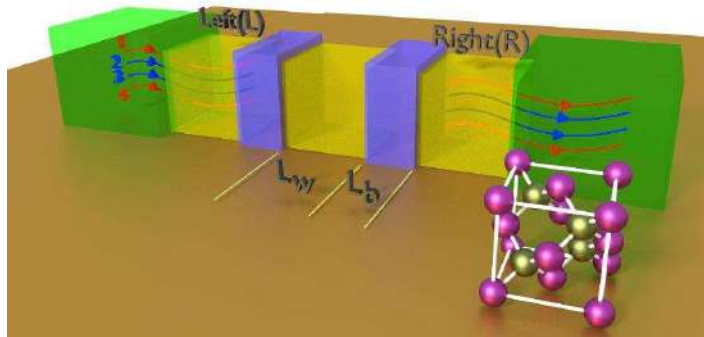


Fig. 1: Esquema en perspectiva-3D, de la heteroestructura a capas con intercaras perfectas, en ausencia de campos externos y tensiones. En los extremos, se representan reservorios infinitos de huecos, que actúan como electrodos fuente-sumidero (cubos verdes). Asumiremos un acoplamiento pseudo-mórfico de los electrodos a las capas dopadas Left(L)-Right(R), basadas en  $GaAs$  (cubos amarillos). Se han colocado capas alternas (cubos azules), que se comportan como dispersores. Debido a su presencia predominante en el presente modelo, hemos dibujado una red cúbica interpenetrada, centrada en las caras, del tipo blanda de zinc. El flujo incidente-emergente de huecos pesados (líneas rojas), viaja de izquierda a derecha, del mismo modo que el flujo de huecos ligeros (líneas azules) a través de la heteroestructura. En la representación  $(4 \times 4)$  del momento angular, consideraremos como simultáneamente accesibles los siguientes canales: *canal 1*:  $hh_{+3/2}$ , *canal 2*:  $lh_{-1/2}$ , *canal 3*:  $lh_{+1/2}$ , y *canal 4*:  $hh_{-3/2}$ .

Los procesos de transporte de electrones y de huecos a través de heteroestructuras semiconductoras son aspectos importantes en la Física del Estado Sólido. En comparación con los electrones, los huecos han sido mucho menos estudiados debido en parte a las complejidades matemáticas de los modelos. Sin embargo, es importante la caracterización completa del movimiento de estas cuasi-partículas a través de heteroestructuras semiconductoras, ya que en los dispositivos opto-electrónicos donde estén involucrados electrones y huecos, el tiempo de respuesta estará determinado por los últimos producto de su mayor masa efectiva. Adicionalmente, ha sido mostrado en experimentos con superredes de  $GaAs - AlAs$  que cuando la  $BV$  está en resonancia y la banda de conducción (BC) no lo está, el tunelaje de huecos ocurre más rápido que el de electrones a pesar de la diferencia entre las masas [1].

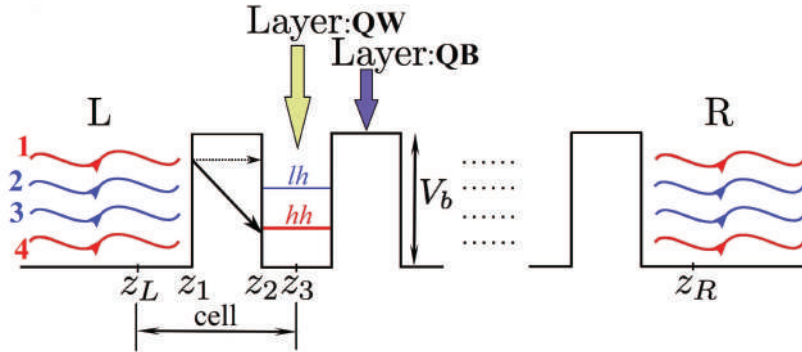


Fig. 2: Representación esquemática del proceso de transporte cuántico de huecos pesados ( $hh$ ) y huecos ligeros ( $lh$ ) a través de una superred de  $GaAs$ -electrodo(L) /  $\{AlAs/GaAs\}^n$  /  $GaAs$ -electrodo(R), en ausencia de campos externos o esfuerzos. La capa de  $GaAs$ , constituye un pozo cuántico (QW) para los huecos, mientras que la capa de  $AlAs$ , se comporta como una barrera cuántica (QB). La flecha horizontal punteada, representa una ruta directa para los huecos a través de QB, mientras que la flecha oblicua continua, simboliza las rutas cruzadas. La referencia estandarizada para los fenómenos de dispersión, es la ampliamente aceptada *celda* (*cell*, en inglés), cuya longitud  $l_c = z_3 - z_L = L_w + L_b$  [vea la Fig. 1], ha sido señalada explícitamente.

Los modelos actuales de flujo uni-componente para la descripción del transporte cuántico en flujos reales mezclados y multi-componentes [2, 3, 4, 6, 7] son insuficientes, producto que en tales tratamientos se pierde parte de la información física del proceso de dispersión. Nosotros hemos propuesto un enfoque alternativo, en el que todos los modos propagantes son tomados en cuenta de modo colectivo y simultáneo<sup>1</sup>, por consiguiente el carácter multi-componente (multi-canal) de la trans-

<sup>1</sup> Aquí y en lo adelante, por simultáneo se entenderá que los  $N$  modos acoplados que se propagan a través del sistema, **coexisten** con valores iniciales no nulos y por consiguiente los  $N$  canales

misión sincrónica de amplitudes se describe de un modo natural. En nuestra aproximación se combinan el formalismo de la matriz de transferencia (TM: *Transfer Matrix*, en inglés) y la matriz de dispersión (SM: *Scattering Matrix*, en inglés) multi-componente ( $N \geq 2$ ). La hemos denominado aproximación dispersiva multi-componente (MSA: *Multicomponent Scattering Approach*, en inglés) multi-componente [8, 9] y la presentamos a continuación. Muchos procesos físicos pueden ser vistos como problemas de dispersión. Uno de los enfoques usuales ha sido estudiar tales problemas y los observables físicos correspondientes en términos de los elementos de la SM, que relaciona la onda entrante con la onda saliente.

Este capítulo, se dedica al estudio de varias propiedades de la SM, como resultado del cual hemos alcanzado contribuciones novedosas a este tópico de la teoría de dispersión, dentro de la aproximación de masa efectiva multi-banda (EFA). Es bien conocido que la SM es unitaria en la teoría del caso electrónico en el marco de la aproximación de masa efectiva a una banda (EMA: *Effective Mass Approximation*, en inglés). Sin embargo, cuando el problema es descrito por un sistema diferencial como (1), entonces el cumplimiento de esta importante propiedad no es una tarea trivial. Como veremos más adelante, las propiedades de la base para la expansión lineal de las soluciones linealmente independientes (LI), juegan un papel decisivo en la obtención de la unitaridad de la SM. En la literatura especializada, la mayoría de los autores de trabajos en diversos problemas físicos para los sistemas multi-bandas [2, 3, 5, 4, 6, 10], se han limitado a exigir que la base de funciones sea ortonormal en el espacio de configuración, complementando en algunos casos con otros recursos numéricos. No obstante los innegables aportes de esos investigadores, tal tratamiento puede resultar insuficiente en ciertos casos de interés, por ejemplo: el transporte cuántico de huecos pesados (*hh*) y huecos ligeros (*lh*) a través de una heteroestructura.

La primera llamada de atención sobre este relevante problema, fue realizada en 1995 por Sánchez y Proetto [7], quienes reconsideraron la forma que tiene la unitaridad de  $S$  para un caso particular del modelo Hohn-Lüttinger (KL) ( $2 \times 2$ ). Este es un tema actual y sutil, cuyo tratamiento ha requerido que superemos notables dificultades con el objetivo de estudiar la unitaridad de la SM en un problema general EFA y en particular en el modelo KL.

Consideremos un problema descrito por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias, lineales, acopladas y de segundo orden con dos o más ecuaciones. La ecuación de autovalores para un sistema multi-componente con simetría traslacional en el plano transversal  $[x, y]$ , se puede escribir en la forma del sistema matricial diferencial siguiente [11]:

$$\frac{d}{dz} \left[ B(z) \cdot \frac{dF(z)}{dz} + P(z) \cdot F(z) \right] + Y(z) \cdot \frac{dF(z)}{dz} + W(z) \cdot F(z) = O_N, \quad (1)$$

---

de la estructura a capas, son físicamente accesibles al **unísono** a todas las energías del flujo de portadores incidentes. El sincronismo en nuestra aproximación no debe confundirse entonces, con simultaneidad temporal ya que tratamos un problema estacionario.

donde  $B(z), P(z), Y(z)$  y  $W(z)$  cumplen con:

$$B(z)^\dagger = B(z) \quad (2)$$

$$Y(z) = -P(z) \quad (3)$$

$$P(z)^\dagger = \pm P(z) \quad (4)$$

$$W(z)^\dagger = W(z) = V(z) - EI_N \quad (5)$$

y además todas las matrices tienen dimensión  $(N \times N)$ . Aquí y en lo adelante  $O_N/I_N$  representa la matriz nula/identidad de orden  $N$ . Representaremos con  $F(z)$ , el *campo* bajo estudio: función de onda envolvente de estados de huecos. Como  $F(z)$  tiene  $N$  componentes nos referiremos a esta magnitud como un *vector*; queda entendido que no es un vector en el sentido que lo es el vector de posición  $\mathbf{r}$ , la velocidad  $\mathbf{v}$ , caracterizados por la manera en que cambian ante una transformación ortogonal de las coordenadas. La denominación de vector aquí se usa en el sentido de que tiene  $N$  componentes y porque la  $F(z)$  es un vector en el espacio vectorial funcional.

Al examinar (1) resalta la forma lineal asociada a este sistema. Nos referimos a [11]

$$A(z) = B(z) \cdot \frac{dF(z)}{dz} + P(z) \cdot F(z). \quad (6)$$

Si  $B(z), P(z), Y(z)$  y  $W(z)$  tienen las propiedades exigidas en (2), el operador *adjoint* (conjugado hermítico), tiene la misma *regla* para operar que el operador original. Su hermiticidad, *formal* o no, dependerá entonces de las condiciones de contorno que cumple el operador y su *adjoint*. Matemáticamente hablando esta forma lineal juega un papel muy relevante; como veremos más adelante en la subsección 4.2 e implica sin más la continuidad de  $A(z)$  para todo  $z$ . Asimismo, también juega un papel central en el esquema conocido como *Surface Green Function Method* [12].

## 2 Tunelaje de flujos

Después del breve recorrido descriptivo por algunas de las propiedades básicas de la SM que se mostró en la Sec.1, pasamos ahora al asunto central: el estudio de la unitaridad de la matriz  $S$  para los sistemas descritos por modelos que involucran varias bandas. Vamos a partir de una expresión conocida para la densidad de corriente del flujo de probabilidades [13, 14] correspondiente a la ecuación de movimiento (1)

$$j(z) = -i [A(z)^\dagger \cdot F(z) - F(z)^\dagger \cdot A(z)], \quad (7)$$

que puede modificarse, usando convenientemente (100). Entonces para cualquier punto  $z$  tendremos



$$j = -i \Omega^\dagger \cdot \mathbf{J} \cdot \Omega, \quad (8)$$

$$\mathbf{J} = \begin{vmatrix} O_N & -I_N \\ I_N & O_N \end{vmatrix}.$$

Es útil enfatizar que en el modelo KL ( $2 \times 2$ ), donde  $P(z)$  es anti-hermítica, la fórmula (7) se reduce a [15]

$$j(z) = 2 \text{Imm} [F(z)^{\dagger} B(z) F(z)] - 2F(z)^{\dagger} P(z)^{\dagger} F(z). \quad (9)$$

mientras que en otro caso interesante como la ecuación de Schrödinger del caso 1-D con  $N = 1$  y para los sistemas 3-D multi-canal [16, 17, 18], se reduce a la conocida expresión

$$j(z) = F(z)^{\dagger} F(z)' - F(z)^{\dagger} F(z).$$

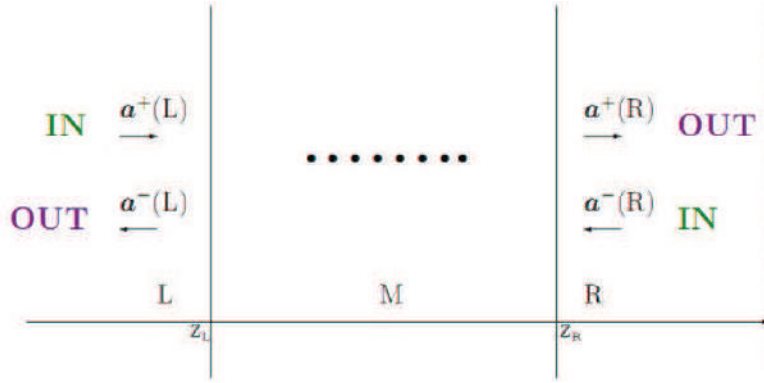


Fig. 3: Esquema general de dispersión del sistema bajo estudio. Entre las capas L y R puede haber una simple intercara –o sea, L y R empalmados directamente–, o cualquier estructura intermedia [11].

Las relaciones (7) y (8) son válidas para sistemas de  $N$  componentes acopladas, descritos por la EFA. A partir de (107) se logra escribir

$$j = -i (\mathcal{Q} \cdot a)^\dagger \cdot \mathbf{J} \cdot (\mathcal{Q} \cdot a)$$

$$= -i a^\dagger \cdot \mathcal{Q}^\dagger \cdot \mathbf{J} \cdot \mathcal{Q} \cdot a.$$

Definimos:  $X = \mathcal{Q}^\dagger \cdot \mathbf{J} \cdot \mathcal{Q} = \begin{vmatrix} X_{++} & X_{+-} \\ X_{-+} & X_{--} \end{vmatrix}$ , entonces,

$$j = -i a^\dagger \cdot X \cdot a. \quad (10)$$

(1×2N)(2N×2N)(2N×1)

Sea:

$\mathbf{a}_+$   $\Rightarrow$  coeficientes de las soluciones LI que se propagan de izquierda a derecha.

$\mathbf{a}_-$   $\Rightarrow$  coeficientes de las soluciones LI que se propagan de derecha a izquierda.

$L$   $\Rightarrow$  región a la izquierda del sistema dispersor (barrera).

$R$   $\Rightarrow$  región a la derecha del sistema dispersor (barrera).

Definimos en las regiones  $L$  y  $R$  [vea la Figura 3]

$$\mathbf{a}^L = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_+^L \\ \mathbf{a}_-^L \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}^R = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_+^R \\ \mathbf{a}_-^R \end{pmatrix}. \quad (2N \times 1) \quad (2N \times 1)$$

Entonces<sup>2</sup>

$$j^n = -i \left\{ (\mathbf{a}_+^n)^\dagger X_{++}^n \mathbf{a}_+^n + (\mathbf{a}_+^n)^\dagger X_{+-}^n \mathbf{a}_-^n + (\mathbf{a}_-^n)^\dagger X_{-+}^n \mathbf{a}_+^n + (\mathbf{a}_-^n)^\dagger X_{--}^n \mathbf{a}_-^n \right\},$$

para  $n = L, R$ . (11)

### Conservación del flujo:

En un experimento de dispersión, sin imponer ninguna condición de frontera y/o restricciones al paquete incidente, la conservación de flujo implica que:

**Definición 2.1** *El número de partículas a ambos lados del obstáculo es constante.*

Por tal razón, es que  $j(z)$  evaluada a la izquierda del sistema dispersor y a la derecha del mismo, son iguales en ausencia de dispersión inelástica.

$$j^L = j^R \quad (12)$$

$\Downarrow$

$$-i(\mathbf{a}^L)^\dagger X^L \mathbf{a}^L = -i(\mathbf{a}^R)^\dagger X^R \mathbf{a}^R. \quad (13)$$

Esta expresión es un escalar real y más adelante se empleará en una representación similar, para extraer ciertas propiedades sobre la SM.

## 3 Pseudo-unitaridad generalizada de $S$

Se inicia el análisis recordando la definición de la SM [11],

<sup>2</sup> En aras de abreviar la notación, en lo adelante se omitirá en algunos casos el símbolo “ $\cdot$ ” en el producto de matrices y vectores

**Definición 3.1**

$$\left\| \begin{array}{c} a^-(L) \\ a^+(R) \end{array} \right\|_{out} = S(output, input) \cdot \left\| \begin{array}{c} a^+(L) \\ a^-(R) \end{array} \right\|_{in}, \quad (14)$$

donde los coeficientes han sido divididos en dos grupos: los de las ondas (soluciones LI) que viajan de izquierda a derecha, y los de ondas que viajan de derecha a izquierda. Los primeros han sido denotados con el supraíndice "+"; a los segundos les corresponde el supraíndice "-". Se procede más adelante a relacionar los coeficientes de la función envolvente -sobre cuyas funciones base no exigimos ahora ninguna condición especial-, en las regiones  $L$  y  $R$  con las amplitudes incidentes y emergentes del sistema dispersor [vea la Figura 3], usando el formalismo multi-componente de la SM. Finalmente se pasa a una representación que contiene la condición buscada de unitariedad de la SM, en general, para los sistemas tipo EFA y en particular en el modelo KL. Definimos

$$\mathcal{I} = \left\| \begin{array}{c} a^+_{+} \\ a^+_{-} \end{array} \right\|_{in}; \quad \mathcal{O} = \left\| \begin{array}{c} a^-_{-} \\ a^-_{+} \end{array} \right\|_{out}, \quad (15)$$

como los vectores de las amplitudes incidentes y emergentes, respectivamente, con dimensiones:  $(2N \times 1)$  y  $(2N \times 1)$ , respectivamente y que guardan con la matriz de dispersión  $S$ , la relación siguiente:

$$\mathcal{O}_{out} = S \mathcal{I}_{in}. \quad (16)$$

Definimos las transformaciones

$$\left. \begin{array}{l} \mathcal{I}_{in} \Rightarrow a^L \\ \mathcal{O}_{out} \Rightarrow a^R \end{array} \right\}, \quad (17)$$

$$\left\| \begin{array}{c} a^L_{1+} \\ a^L_{2+} \\ \vdots \\ a^L_{N+} \\ a^L_{1-} \\ a^L_{2-} \\ \vdots \\ a^L_{N-} \end{array} \right\|_L = \left\| \begin{array}{cccccc} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \frac{a^L_{1-}}{a^R_{1-}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \frac{a^L_{2-}}{a^R_{2-}} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{a^L_{N-}}{a^R_{N-}} \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} a^L_{1+} \\ a^L_{2+} \\ \vdots \\ a^L_{N+} \\ a^R_{1-} \\ a^R_{2-} \\ \vdots \\ a^R_{N-} \end{array} \right\|_{in}, \text{ y finalmente}$$

$$\begin{pmatrix} a_{1+}^R \\ a_{2+}^R \\ \vdots \\ a_{N+}^R \\ a_{1-}^R \\ a_{2-}^R \\ \vdots \\ a_{N-}^R \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \\ \frac{a_{1-}^R}{a_{1-}^L} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{a_{2-}^R}{a_{2-}^L} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{a_{N-}^R}{a_{N-}^L} & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1-}^L \\ a_{2-}^L \\ \vdots \\ a_{N-}^L \\ a_{1+}^R \\ a_{2+}^R \\ \vdots \\ a_{N+}^R \end{pmatrix}_{out}.$$

de dimensiones  $(2N \times 1)$ ,  $(2N \times 2N)$  y  $(2N \times 1)$ , respectivamente. Tomamos

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \frac{a_{1-}^L}{a_{1-}^R} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \frac{a_{2-}^L}{a_{2-}^R} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \frac{a_{N-}^L}{a_{N-}^R} \end{pmatrix}, \text{ de dimensi3n } (N \times N)$$

y podemos escribir

$$\begin{pmatrix} a_{+}^L \\ a_{-}^L \end{pmatrix}_L = \begin{pmatrix} I_N & O_N \\ O_N & \mathbf{C} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{+}^L \\ a_{-}^L \end{pmatrix}_{in} \quad (18)$$

$$\begin{pmatrix} a_{+}^R \\ a_{-}^R \end{pmatrix}_R = \begin{pmatrix} O_N & I_N \\ \mathbf{C}^{-1} & O_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{-}^L \\ a_{+}^L \end{pmatrix}_{out}. \quad (19)$$

Si definimos

$$\Pi = \begin{pmatrix} I_N & O_N \\ O_N & \mathbf{C} \end{pmatrix},$$

entonces es sencillo expresar

$$\Pi^{-1} J_x = \begin{pmatrix} O_N & I_N \\ \mathbf{C}^{-1} & O_N \end{pmatrix},$$

siendo

$$J_x = \begin{pmatrix} O_N & I_N \\ I_N & O_N \end{pmatrix},$$

y entonces reescribir (18) y (19) en la forma

$$\left. \begin{aligned} a^L &= \Pi I_{in} \\ a^R &= \Pi^{-1} J_x \mathcal{O}_{out} \end{aligned} \right\}. \quad (20)$$

N3tese que se cumple

$$J_x = -\mathbf{J} \Sigma_z,$$

donde  $\Sigma_z$  es la matriz generalizada  $\sigma_z$  de Pauli de orden  $(2N \times 2N)$ .

### 3.1 Caso EFA general: $N \geq 2$

El problema físico bajo estudio queda descrito por un sistema de  $N$  ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas de la forma (1). Para ello se estudia un sistema físico formado por tres regiones:  $L, M, R$ , tal como se observa en la Figura 3. Las regiones extremas  $L$  y  $R$ , se supone que tienen parámetros constantes y en estas capas los estados del sistema tienen autovalores (energía, *momentum*) constantes, en la región  $M$ , el sistema tiene, en principio, una estructura de capas de diferentes materiales o capas de diferentes composiciones [vea la Figura 3], que corresponden a una cierta estructura. En la Figura 2 se muestra la situación de interés.

Regresando a la condición de conservación de flujo (12), es sencillo obtener

$$\begin{aligned} \left( \Pi \mathcal{I}_{in} \right)^\dagger X^L \Pi \mathcal{I}_{in} &= \left( \Pi^{-1} J_x \mathcal{O}_{out} \right)^\dagger X^R \Pi^{-1} J_x \mathcal{O}_{out}, \\ \mathcal{I}_{in}^\dagger \Pi^\dagger X^L \Pi \mathcal{I}_{in} &= \mathcal{O}_{out}^\dagger J_x^\dagger \left( \Pi^{-1} \right)^\dagger X^R \Pi^{-1} J_x \mathcal{O}_{out}. \end{aligned} \quad (21)$$

A partir de (16) es fácil expresar

$$\mathcal{O}_{out}^\dagger = \mathcal{I}_{in}^\dagger S^\dagger,$$

por lo que

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{in}^\dagger \Pi^\dagger X^L \Pi \mathcal{I}_{in} &= \mathcal{I}_{in}^\dagger S^\dagger J_x^\dagger \left( \Pi^{-1} \right)^\dagger X^R \Pi^{-1} J_x S \mathcal{I}_{in}, \\ \Downarrow \\ \Pi^\dagger X^L \Pi &= S^\dagger J_x^\dagger \left( \Pi^{-1} \right)^\dagger X^R \Pi^{-1} J_x S. \end{aligned} \quad (22)$$

Sea:

$$\begin{aligned} \Pi_L &= \Pi^\dagger X^L \Pi \\ \Pi_R &= \left( \Pi^{-1} J_x \right)^\dagger X^R \left( \Pi^{-1} J_x \right) = J_x \left( \Pi^{-1} \right)^\dagger X^R \Pi^{-1} J_x. \end{aligned}$$

**Proposición 3.1** *Entonces, la condición de pseudo-unitaridad (unitaridad estructurada) sobre la SM  $S$ , para flujos no unitarios de partículas en sistemas de  $N$  componentes acopladas -inclusive alejados del potencial dispersor-, se satisface según*

$$S^\dagger \Pi_R S = \Pi_L. \quad (23)$$

Esta es una propiedad general que debe cumplir la SM bajo la única condición de la igualdad de los flujos (procesos elásticos). Sin embargo no se puede perder de

vista que estamos suponiendo que tenemos una base de funciones LI no completamente ortonormales.

**Definición 3.2** *Consideraremos que una base de funciones linealmente independientes, está completamente ortonormalizada, cuando esta sea ortonormal estrictamente en los espacios de configuración y espinorial simultáneamente. En caso contrario, la base funciones linealmente independientes se denominará arbitraria.*

Aquí se ha utilizado la denominación de pseudo-unitaria (unitaridad estructurada) para  $S$ , siguiendo la clasificación de las matrices estructuradas que se presenta por: D. Steven MacKey, N. MacKey y Françoise Tisseur [19]. El sentido físico de las matrices  $\Pi_{R,L}$  está contenido básicamente en  $X^{R,L}$ . Sus elementos diagonales responden, en general, a la transmisión -sin acoplamiento en las regiones asintóticas- a través de los canales permitidos del sistema. Lo anterior no excluye la interferencia producto del efecto del potencial dispersor. Los elementos fuera de la diagonal en dicha matriz responden, en general, al acoplamiento entre los modos incidentes (emergentes) en las regiones asintóticas, lejos de la zona donde se encuentra el obstáculo dispersivo y contienen además información de la mezcla que este produce. Más adelante, se verán detalles al respecto.

### 3.2 Caso EFA particular: $N = 4$

En el artículo [7]: A. D. Sánchez and C. R. Proetto presentan un análisis de las propiedades de la simetría de la SM para el problema de la dispersión de huecos pesados (H) y huecos ligeros (L) sin componentes del momento angular total<sup>3</sup>, tratados dentro de un esquema de estados incidentes de H y L puros. Lo que se expone a continuación es un ejemplo concreto de lo expuesto en la sección 3.1. El potencial dispersor a considerar, es de barrera o pozo simples rectangulares. Parten de una relación del tipo (16), y expresan la condición de conservación de flujo. Definen

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} j_H & 0 & 0 & 0 \\ 0 & j_L & 0 & 0 \\ 0 & 0 & j_H & 0 \\ 0 & 0 & 0 & j_L \end{pmatrix}, \quad \mathbf{O} = \begin{pmatrix} b \\ d \\ e \\ g \end{pmatrix}, \quad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} a \\ c \\ f \\ h \end{pmatrix}.$$

El requerimiento de conservación lo escriben en forma matricial

$$\mathbf{O}^\dagger \mathbf{J} \mathbf{O} = \mathbf{I}^\dagger \mathbf{J} \mathbf{I}. \quad (24)$$

Tienen en cuenta la relación (16) y su transconjugada, las cuales sustituyen en (24) y llegan a que

$$\mathcal{S}^\dagger \mathbf{J} \mathcal{S} = \mathbf{J}, \quad (25)$$

<sup>3</sup> En este epígrafe y en otros, donde se trabaje con los resultados del mencionado artículo Ref.[7], se utilizará la misma nomenclatura del trabajo citado. Esto permitirá fácilmente diferenciar los resultados originales nuestros.

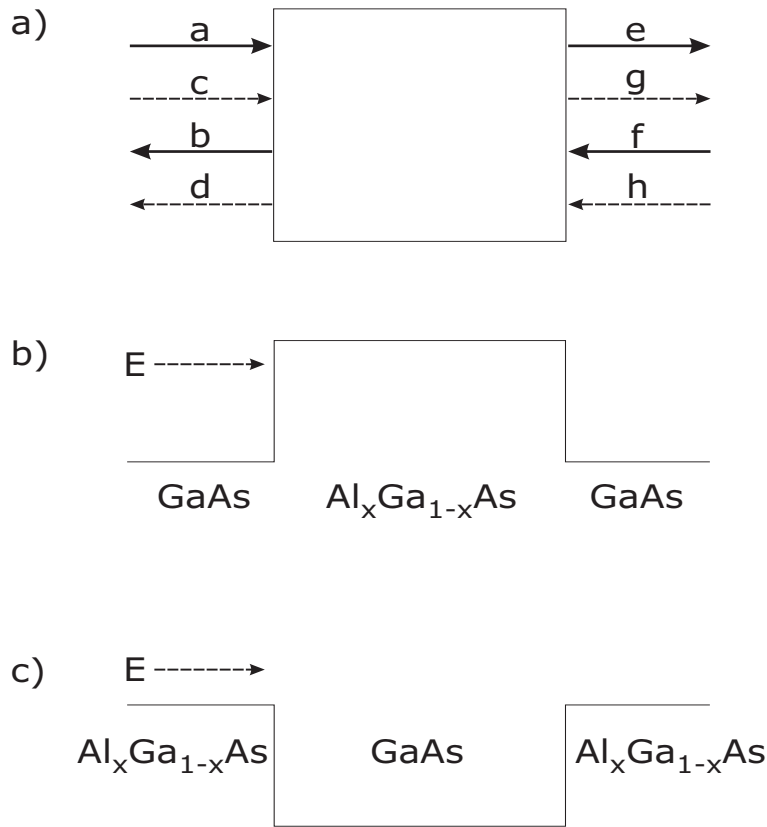


Fig. 4: (a) Representación esquemática del problema del transporte cuántico desde el punto de vista de la SM. Las flechas entrantes/salientes, representan las amplitudes de probabilidad. (b) Dispersión desde una barrera de potencial. (c) Dispersión desde un pozo de potencial [7].

que es lo que denominan pseudo-unitaridad, y lo consideran una generalización de la condición de unitaridad  $S^\dagger = S^{-1}$ , que se obtiene para la conservación de corriente de electrones, descritos en la EMA.

### 3.3 Reducción del caso general al particular

Hasta aquí se ha obtenido, por un lado, una condición de pseudo-unitaridad generalizada de la SM para los modelos EFA en general, sin imponer exigencias

adicionales sobre la base de funciones LI y por otro, otros autores han obtenido una propiedad de pseudo-unitaridad sobre la SM, bajo ciertas simplificaciones de un modelo EFA particular: el KL. Ambas relaciones se reducen a la usual bajo las condiciones apropiadas (por ejemplo: en el límite de modos desacoplados), como se verá en varias secciones posteriores. ¿Bajo qué condiciones podemos pasar del planteamiento general a uno particular? -y por tanto transformar (23) en (25)-, es la interrogante que se estará analizando a continuación.

La idea entonces, es encontrar en cuáles circunstancias se satisface que

$$\left. \begin{array}{l} \Pi_R = \mathbf{J} \\ \Pi_L = \mathbf{J} \end{array} \right\}, \quad (26)$$

y por tanto

$$\Pi_R = \Pi_L. \quad (27)$$

La relación (26) es la condición *necesaria* y *suficiente* para que

$$S^\dagger \Pi_R S = \Pi_L \quad \implies \quad S^\dagger \mathbf{J} S = \mathbf{J},$$

mientras que (27), es sólo la condición *necesaria* y es la que pasaremos a discutir a continuación.

Por un lado consideramos la estructura de  $\Pi_R$ ,  $\Pi_L$ , y además la forma diagonal de  $\mathbf{C}$ . Por el otro lado, tuvimos en cuenta el carácter diagonal de  $\mathbf{J}$ . Entonces las igualdades importantes que derivan de lo anterior, son

$$\begin{aligned} (\mathbf{C}^*)^{-1} X_{--}^R \mathbf{C}^{-1} &= X_{++}^L, \\ \mathbf{C}^* X_{--}^L \mathbf{C} &= X_{++}^R, \end{aligned} \quad (28)$$

que de satisfacerse, conducirían al cumplimiento de (27). Es posible avanzar otro tanto, si se considera la situación particular, en que los parámetros que definen la ecuación (1) sean constantes. En tal caso, si se siguen las definiciones correspondientes (10) para la matriz  $X$ , es posible asumir la validez de la igualdad entre sus bloques

$$X_j^R = X_j^L, \quad \text{donde } j = ++, +-, -+, --,$$

de donde es fácil deducir que debe cumplirse que  $\mathbf{C}^{-1} = \mathbf{C}$  siendo  $\mathbf{C} = I_N$ , una alternativa de esta situación particular, que llevaría finalmente a que se cumpla la condición *necesaria* (27).

Las condiciones bajo las cuales, la matriz  $\mathbf{C}$  pasaría a ser la matriz identidad, no están esclarecidas aún. Junto a esto, el estudio detallado de las condiciones *necesarias* y *suficientes* (26) es un tema pendiente sobre el que se continúa trabajando. No obstante lo interesante que resulta el vínculo entre lo general y lo particular, lo esencial va quedando evidente y es que la Matriz de Dispersión en los problemas tipo EFA con funciones base arbitrarias, **no es unitaria**.



## 4 Reducción a la unitaridad de $S$

En este epígrafe se presentará un análisis con toda generalidad, a través del cual es posible pasar de una representación del flujo en la EFA a otra en la EMA. El punto de partida es el caso, adoptado en el epígrafe 2, donde se trabajó con  $N$  modos acoplados -esto es así por la presencia de términos lineales en la primera derivada-; imponiendo en ese problema las condiciones adecuadas, podremos transferir el estudio a la representación de un sistema descrito por  $N$  modos independientes, que provienen de un sistema de ecuaciones diferenciales de  $N$  componentes desacopladas. De esta forma se pretende demostrar la complementariedad de ambos casos.

Subrayamos que lo verdaderamente trascendental en la convergencia de estas dos formas de representar el flujo radica en la posibilidad de obtener la unitaridad de  $S$  a través de dos vías, a saber: (1) Partir del caso de estados incidentes/emergentes acoplados (marco de la EFA) y pasar al límite de estados incidentes/emergentes desacoplados (marco de la EMA). (2) Partir del caso de estados incidentes/emergentes acoplados y exigir condiciones de ortonormalidad adecuadas al caso EFA. la base de funciones LI está completamente ortonormalizada. La base de funciones LI es arbitraria.

### 4.1 Límite de $N$ componentes desacoplados

En este límite son posibles tres alternativas de reducción a la condición de unitaridad de  $S$ . Primeramente veremos que es posible hacer converger la expresión para el flujo en la EFA a la representación de esta magnitud en la EMA. Una vez logrado esto, es relativamente sencillo demostrar la unitaridad buscada. Otra de las vías consiste en partir de la condición de la pseudo-unitaridad generalizada (23) y llegar a la propiedad mencionada de  $S$ . Como tercera y última variante, iniciaremos el análisis desde la pseudo-unitaridad particular en una forma del modelo KL (25) y llegar a la condición de unitaridad de la SM. Veamos ahora estos desarrollos en detalle.

#### 4.1.1 Convergencia de flujos

Estudiaremos en este sub-epígrafe la primera alternativa, o sea, partiremos de estados incidentes/emergentes acoplados, descritos en el marco de la EFA y pasaremos al límite de estados incidentes/emergentes desacoplados, descritos en el marco de la EMA. No se imponen explícitamente, requerimientos específicos sobre la base de funciones LI.

Consideraremos que el flujo  $j_{\text{EFA}} = -i \left( a \right)^\dagger X a$ , responde al caso EFA general, como ya se mostró en el epígrafe 2. Se puede demostrar que:

**Teorema 4.1**

$$\lim_{\text{modos}(a) \rightarrow \text{modos}(d)} \mathbf{j}_{EFA} \equiv \mathbf{j}_{EMA} \quad \Delta \quad (29)$$

$$\quad \quad \quad (30)$$

por  $\text{modos}(a, d)$  se entiende  $\text{modos}(\text{acoplados}, \text{desacoplados})$ .

En el artículo [17]: P. A. Mello, P. Pereyra y N. Kumar demuestran que para un sistema físico descrito por  $N$  ecuaciones diferenciales no acopladas - el cual responde al caso EMA general-, se halla una densidad de corriente de probabilidad dada por:

$$\mathbf{j}_{EMA} = \mathbf{a}^\dagger \Sigma_z \mathbf{a}, \quad (31)$$

donde

$$\Sigma_z = \left\| \begin{array}{cc} I_N & O_N \\ O_N & -I_N \end{array} \right\|$$

es la matriz  $\sigma_z$  generalizada de Pauli y  $\mathbf{a}$  contiene los coeficientes de la combinación lineal de las soluciones tomadas como ondas planas. El estudio se hace como si fuera una dispersión desde cierta región  $L$ , en la que no está conectada la interacción entre los modos, hasta otra región  $R$ , en que tampoco esté conectada esta interacción.

Considerar que en los electrodos  $L$  y  $R$ , los modos son independientes implica que

$$X = Q^\dagger J Q = \left\| \begin{array}{cc} X_{++} & X_{+-} \\ X_{-+} & X_{--} \end{array} \right\| =$$

$$= \left\| \begin{array}{cc} Q_{22}Q_{11} - Q_{12}Q_{21} & O_N \\ O_N & -[Q_{22}Q_{11} - Q_{12}Q_{21}] \end{array} \right\|.$$

Nótese que los bloques cruzados  $X_{+-} = X_{-+} = O_N$  al haberse desconectado la interacción en los electrodos de la estructura; por tanto los modos propagantes en una dirección y la opuesta son independientes. En general, los vectores  $\mathbf{a}$  y  $\mathbf{a}$  son diferentes, aunque en este análisis se ha adoptado que satisfagan:  $\mathbf{a}_j = \alpha_j \mathbf{a}_j$ , siendo  $\alpha_j$ , cierto coeficiente de proporcionalidad. Si se toma la normalización de las funciones linealmente independientes de forma tal que:

$$2\alpha_j k_j |b_j|^2 = 1 \implies |b_j|^2 = \frac{1}{2\alpha_j k_j}; \forall j = 1, \dots, N.$$

Entonces es posible obtener que

$$Q_{22}Q_{11} - Q_{12}Q_{21} = -iI_N, \quad (32)$$

por lo tanto:

$$\mathbf{j}_{EFA} \Big|_{(d)} = -\mathbf{a}^\dagger \left\{ -(i)^2 \left\| \begin{array}{cc} I_N & O_N \\ O_N & -I_N \end{array} \right\| \right\} \mathbf{a} = -\mathbf{a}^\dagger \Sigma_z \mathbf{a}. \quad (33)$$

Finalmente se llega a que, hasta la exactitud de una fase,

$$j_{\text{EFA}} \Big|_{(d)} \equiv j_{\text{EMA}}, \quad \blacktriangle \quad (34)$$

cuando en el término de la izquierda se considera que los modos están desacoplados en las regiones asintóticas, que es lo que se quería demostrar. Una vez lograda la demostración de (4.1) es útil realizar el ejercicio de verificar una de sus consecuencias más importantes. A partir de (33), es sencillo recuperar las propiedades tradicionales de la unitariedad de la SM. Para ello, tomemos por simplicidad  $N = 1$  y asumamos los convenios adoptados en el epígrafe 2. Entonces la conservación del flujo (12)-(13) en las regiones asintóticas  $L, R$  se expresa como

$$\begin{aligned} \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^L \\ \mathbf{a}_-^L \end{array} \right\|^\dagger \left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^L \\ \mathbf{a}_-^L \end{array} \right\| &= \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^R \\ \mathbf{a}_-^R \end{array} \right\|^\dagger \left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array} \right\| \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^R \\ \mathbf{a}_-^R \end{array} \right\| \quad (35) \\ \left\| (\mathbf{a}_+^L)^* \quad (-\mathbf{a}_-^L)^* \right\| \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^L \\ \mathbf{a}_-^L \end{array} \right\| &= \left\| (\mathbf{a}_+^R)^* \quad (-\mathbf{a}_-^R)^* \right\| \left\| \begin{array}{c} \mathbf{a}_+^R \\ \mathbf{a}_-^R \end{array} \right\|, \end{aligned}$$

↓

$$|\mathbf{a}_+^L|^2 - |\mathbf{a}_-^L|^2 = |\mathbf{a}_+^R|^2 - |\mathbf{a}_-^R|^2,$$

al reagrupar los términos se obtiene

$$|\mathbf{a}_+^L|^2 + |\mathbf{a}_-^R|^2 = |\mathbf{a}_-^L|^2 + |\mathbf{a}_+^R|^2.$$

Usando las definiciones (15), es posible reescribir la expresión anterior y obtenerla entonces en forma matricial

$$(\mathcal{I}_{in})^\dagger \mathcal{I}_{in} = (\mathcal{O}_{out})^\dagger \mathcal{O}_{out}, \quad (36)$$

si ahora se hace uso del formalismo de la SM, expresado en (16) y de su transconjugada, se puede transformar el miembro derecho de la identidad anterior, esto es

$$(\mathcal{I}_{in})^\dagger \mathcal{I}_{in} = (\mathcal{I}_{in})^\dagger S^\dagger S \mathcal{I}_{in}.$$

Se extraen entonces, las propiedades de unitariedad buscadas

$$SS^\dagger = S^\dagger S = I_{2N}. \quad (37)$$

De (37) se escribe que

$$S^\dagger = S^{-1},$$

sea que el sistema dispersor satisface la simetría de reversión temporal, entonces es sencillo demostrar que se satisface:  $S^* = S^{-1}$ . Por consiguiente

$$S^\dagger = S^*,$$

y al hallar la conjugada compleja se llega a la otra propiedad de interés: la SM es simétrica:

$$S^T = S. \quad (38)$$

De lo mostrado arriba se deriva que la condición de pseudo-unitaridad (23) para el modelo EFA (modos acoplados), converge adecuadamente -a través de la convergencia de los flujos correspondientes- a las propiedades usuales de unitaridad y simetría, válidas para el modelo de la EMA (modos desacoplados).

#### 4.1.2 Reducción de pseudo-unitaridad generalizada: $N \geq 2$

En este epígrafe se presentará un análisis con toda generalidad, donde se muestra cómo pasar directamente de la condición (23) de la pseudo-unitaridad generalizada -correspondiente a un caso EFA de  $N$  componentes-, a la propiedad usual de unitaridad (37). A continuación se muestra la forma de convergencia directa entre la pseudo-unitaridad (25) del modelo Kohn-Luttinger -correspondiente a un caso EFA de 4 componentes-, a la propiedad usual de unitaridad de  $S$  (37). Es útil no perder de vista, que el análisis dentro del modelo KL, está hecho para un esquema de estados de  $hh$  y  $lh$  puros.

Aquí, es necesario hacer un par de maniobras algebraicas. Estas consisten, por un lado, en tomar una determinada normalización de los coeficientes involucrados, mientras que por otro, se introducen modificaciones en las matrices  $\Pi_R$  y  $\Pi_L$ , que ahora tendrán la forma

$$\begin{aligned} \Pi_L &= \mathbf{e}_L \Pi^\dagger X \Pi \\ \Pi_R &= \mathbf{e}_R J_x \left( \Pi^{-1} \right)^\dagger X \Pi^{-1} J_x \end{aligned}$$

donde

$$\mathbf{e}_L = \left\| \begin{array}{cc} I_N & O_N \\ O_N & \mathbf{e}^{i\theta} I_N \end{array} \right\| \quad y \quad \mathbf{e}_R = \left\| \begin{array}{cc} \mathbf{e}^{i\theta} I_N & O_N \\ O_N & I_N \end{array} \right\|.$$

El factor de fase cumple

$$\theta = \begin{cases} 0; & \text{para los modos acoplados} \\ \pi; & \text{para los modos desacoplados} \end{cases} \quad (39)$$

Al desacoplar los modos en las regiones  $L$  y  $R$  (Figura 3) se demostró, en el subepígrafe 4.1, que  $X = -i\Sigma_z$ . Se considerará que los coeficientes de las soluciones linealmente independientes que se propagan en un sentido y en el contrario en las zonas asintóticas mencionadas son complejos. Si los coeficientes de  $\mathbf{C}$  se escogen como:

$$\frac{|a_{j-}^L|^2}{|a_{j-}^R|^2} = 1; \quad \forall j = 1, \dots, N \implies |a_{j-}^L|^2 = |a_{j-}^R|^2,$$

entonces es posible escribir

$$\Pi_L \Big|_{(d)} = \Pi_R \Big|_{(d)} = -i \left\| \begin{array}{c} I_N \ O_N \\ O_N \ I_N \end{array} \right\| = -i I_{2N},$$

por tanto

$$S^\dagger \Pi_R \Big|_{(d)} S = \Pi_L \Big|_{(d)} = -i S^\dagger I_{2N} S = -i I_{2N},$$

lo que conduce a la propiedad de unitaridad tradicional (23), para el caso en cuestión

$$S^\dagger S = I_{2N}.$$

Como se observa, la condición generalizada de unitaridad sobre la SM en los modelos EFA, pasa a la unitaridad usual en la teoría de la EMA, si se exige que los modos se desacoplen.

#### 4.1.3 Reducción de la pseudo-unitaridad particular: $N = 4$

En este sub-epígrafe se referirá fundamentalmente al resultado (25) obtenido por Sánchez y Proetto en 1995 [7]. En el artículo citado, los autores no estudian cómo pasar de la expresión antes mencionada, a la condición de unitaridad (37) del problema electrónico. El análisis a continuación está dedicado a demostrar dicha transición, cuando se imponen las condiciones apropiadas. En este momento, en aras de enfocar a lo esencial, se asumirá estrictamente  $k_x = k_y = 0$ . Bajo tales condiciones, los estados de H y L, descritos por las 4 ecuaciones diferenciales ordinarias de segundo orden de (1), se desacoplan. El hamiltoniano resultante se diagonaliza en términos con energía cinética como la del electrón, pero ahora con masas efectivas:  $m_H = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma_2)$  y  $m_L = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma_2)$ . Esta situación de modos H y L segregados en dos sistemas independientes, con  $N = 1$  cada uno, armoniza con la que se describe en la EMA y se empleará como plataforma para la demostración planteada. El potencial donde se dispersan los H y L libres es de barrera o pozo simples, y se representa esquemáticamente en la Fig.4(b) o 4(c), respectivamente.

El requerimiento de conservación del flujo se descompone entonces en dos identidades independientes

$$\left. \begin{array}{l} |a|^2 j_H + |f|^2 j_H = |b|^2 j_H + |e|^2 j_H \\ |c|^2 j_L + |h|^2 j_L = |d|^2 j_L + |g|^2 j_L \end{array} \right\}. \quad (40)$$

Bajo las condiciones impuestas al sistema de huecos pesados y ligeros, la SM se reduce, debido a que las amplitudes de probabilidades de reflexión y transmisión cruzadas satisfacen:  $r_{HL} = r_{LH} = r'_{HL} = r'_{LH} = t_{HL} = t_{LH} = t'_{HL} = t'_{LH} = 0$ . Entonces esto nos conduce, después de algunas transformaciones a

$$\left. \begin{array}{l} j_H S_H^\dagger I_{2N} S_H = j_H I_{2N} \\ j_L S_L^\dagger I_{2N} S_L = j_L I_{2N} \end{array} \right\},$$

y por consiguiente:

$$\left. \begin{aligned} S_H^\dagger S_H &= I_{2N} \\ S_L^\dagger S_L &= I_{2N} \end{aligned} \right\}, \quad (41)$$

que es lo se quería demostrar.

Es posible alcanzar nuevamente la condición (37) desde una vía alternativa, aunque particular, tomando como punto de partida el modelo KL en la forma adoptada por Sánchez y Proetto. Resulta interesante que si se considera específicamente, la dispersión desde un pozo de potencial de un material  $A_3B_5$  (Figura 4 (c)), emparedado en capas semi-infinitas de un ternario -cuya composición molar es variable-, es posible plantearse la tarea de la búsqueda de valores de la concentración, para los cuales y bajo incidencia de modos de H y L independientes, podamos llegar a la unitaridad (37) de la SM. Por lo que se verá más abajo, es evidente que no es posible resolver un problema isomorfo, donde los H y L colisionen una barrera de un ternario embebida en las capas semi-infinitas de un material  $A_3B_5$  (Figura 4 (b)).

Los parámetros semi-empíricos de Lüttinger, en función de la concentración  $x$ , siguen una aproximación cuya recurrencia lineal es

$$\gamma_i(x) = (1-x)\gamma_{ie} + x\gamma_{iw}, \quad \text{con } i = 1, 2, 3,$$

$e/w$  representan *electrodo/pozo*. Si ahora se expresan  $\gamma_1(x)$  y  $\gamma_2(x)$  a partir de lo anterior, después se sustituye en la condición de conservación de flujo correspondiente, y en los electrodos se resuelve

$$j_H(x) \Big|_{k_x=k_y=0} = j_L(x) \Big|_{k_x=k_y=0}, \quad (42)$$

para la variable  $x$ , entonces se obtiene que

$$x = \frac{2\gamma_{2e}\widetilde{\Delta k} - \gamma_{1e}\Delta k}{2\widetilde{\Delta k}(2\gamma_{2e} - \gamma_{2w}) + \Delta k(\gamma_{1w} - \gamma_{1e})}, \quad \text{con } \Delta k = k_H - k_L; \quad \widetilde{\Delta k} = k_H + k_L. \quad (43)$$

Al escoger concentraciones a partir de (43), se satisface (42) y entonces es posible escribir

$$j(x)_H \left( S^\dagger I_{2N} S \right) \Big|_{k_x=k_y=0} = j(x)_H I_{2N} \Big|_{k_x=k_y=0},$$

y llegar entonces a la unitaridad tradicional de la SM

$$S^\dagger S = I_{2N}.$$

Se puede apreciar fácilmente, que una igualdad como (42), carece de sentido si se toma como sistema dispersor, una barrera de un ternario embebida en las capas semi-infinitas de un material  $A_3B_5$ , ya que en estas capas no hay compuestos de concentración variable.

## 4.2 Base ortonormalizada completamente

En este sub-epígrafe se presentará un estudio de la segunda alternativa, esto significa que partiremos del caso de estados incidentes/emergentes acoplados descritos en el marco de la EFA y exigiremos explícitamente requerimientos específicos de ortonormalidad, adecuados al caso EFA, sobre la base de funciones LI. Lo anterior implica que consideraremos esa base ortonormalizada completamente. Las soluciones LI las consideramos, a priori, ortonormalizadas a la  $\delta$  de Dirac en el espacio real de coordenadas. A diferencia de la vía anterior, el sistema está bien descrito en todo momento en el marco de la EFA.

Comencemos por determinar ciertas condiciones de ortonormalidad en el espacio spinorial de funciones -que como se verá más adelante no son las únicas posibles-.

Si denominamos  $f_j(z)$  a los vectores  $(N \times 1)$  L.I. que forman una base ortonormal para representar un estado del sistema (1), podemos escribir:

$$F(z) = \sum_{j=1}^{2N} a_j f_j(z). \quad (44)$$

En particular, en las regiones  $L$  y  $R$  (ver Figura 3) de parámetros constantes las  $f_j(z)$  pueden tomarse como:

$$f_j(z) = \Gamma_j e^{iq_j z} \quad (45)$$

donde los vectores  $\Gamma_j$  son spinores de dimensión  $(N \times 1)$  y no dependen de las coordenadas espaciales y los  $q_j$  son los  $2N$  autovalores que les corresponden como solución de un QEP [9, 22]. Sólo para sistemas con lajas de parámetros constantes, es que valen los cálculos que estamos haciendo. Si sustituimos (45) en (1) se tiene:

$$-q_j^2 B \cdot \Gamma_j + iq_j (P + Y) \cdot \Gamma_j + W \cdot \Gamma_j = O_N. \quad (46)$$

que constituye un Problema Cuadrático de Autovalores (QEP: *Quadratic eigenvalue Problem*, en inglés) [20, 21, 22]. Si  $\mathbf{P}$  es hermítica no existe término de acople de los estados en la primera derivada del campo, no así si esa matriz es anti-hermítica ( $P = -P^\dagger$ ). Entonces ese es el caso que nos interesa porque mantiene el acoplamiento entre modos a partir de la existencia del término lineal en  $q_j$ , tal situación ocurre en sistemas como el Kohn-Luttinger, el de Kane y otros. Si usamos además la propiedad  $Y = -P^\dagger$ , entonces tenemos

$$-q_j^2 B \cdot \Gamma_j + 2iq_j P \cdot \Gamma_j + W \cdot \Gamma_j = O_N. \quad (47)$$

Si a (47) le aplicamos la operación de transconjugación y usamos las propiedades (2), tenemos

$$\Gamma_j^\dagger \cdot [-(q_j^2)^* B + 2i(q_j)^* P + W] = O_N. \quad (48)$$

A continuación multiplicamos a (47) por la izquierda por  $\Gamma_k^\dagger$  y se obtiene

$$-q_j^2 \Gamma_k^\dagger \cdot B \cdot \Gamma_j + 2iq_j \Gamma_k^\dagger \cdot P \cdot \Gamma_j + \Gamma_k^\dagger \cdot W \cdot \Gamma_j = O_N. \quad (49)$$

Ahora escribimos (48) para  $\Gamma_k$  y multiplicamos por  $\Gamma_j$  por la derecha y obtenemos

$$-(q_k^2)^* \Gamma_k^\dagger \cdot B \cdot \Gamma_j + 2i q_k^* \Gamma_k^\dagger \cdot P \cdot \Gamma_j + \Gamma_k^\dagger \cdot W \cdot \Gamma_j = O_N, \quad (50)$$

restando (49) y (50) el resultado es

$$\begin{aligned} (-q_j^2 + (q_k^2)^*) \Gamma_k^\dagger \cdot B \cdot \Gamma_j + i2(q_j - q_k^*) \Gamma_k^\dagger \cdot P \cdot \Gamma_j + \Gamma_k^\dagger \cdot W \cdot \Gamma_j &= O_N, \\ \Gamma_k^\dagger \cdot \left[ \{(q_k^2)^* - q_j^2\} B - 2i(q_k^* - q_j) P \right] \cdot \Gamma_j &= O_N. \end{aligned} \quad (51)$$

Si ahora factorizamos esta expresión, entonces se obtiene

$$\Gamma_k^\dagger \cdot \left[ \{q_k^* + q_j\} B - 2iP \right] \cdot \Gamma_j = O_N. \quad (52)$$

Si en (52) consideramos a  $q_i$ , con  $i = k, j$  como real y suponiendo ( $q_k \neq q_j$ ), entonces se obtiene la siguiente expresión

$$\Gamma_k^\dagger \cdot \left[ \{q_k + q_j\} B - 2iP \right] \cdot \Gamma_j = O_N. \quad (53)$$

Las condiciones de ortogonalidad (52) y (53), sugieren que se empleen las siguientes condiciones de normalización:

$$\Gamma_k^\dagger \cdot \left[ (q_k^* + q_j) B - 2iP \right] \cdot \Gamma_j = \delta_{kj}, \quad (54)$$

$$\Gamma_k^\dagger \cdot \left[ \{q_k + q_j\} B - 2iP \right] \cdot \Gamma_j = \delta_{kj}, \quad (55)$$

para  $q_i$ , con  $i = k, j$  complejo y real, respectivamente.

Siguiendo la Ref.[20], linealizamos el QEP en sus formas (46) ó (62) y se llega finalmente a un problema de autovalores estándar asociado (SEP: *standard eigenvalue problem*, en inglés), con los mismos auto-valores que el QEP. En ese proceso de linealización, logramos derivar las condiciones a exigir a los auto-vectores de (46), para construir una base completamente ortonormalizada, o sea:

#### Definición 4.1

$$\Gamma_k^\dagger [q_j I_N - q_k^* \mathbb{K} + q_k^* q_j \mathbb{C}] \Gamma_j = \Gamma_k^\dagger L^{kj} \Gamma_j = q_k \delta_{kj}. \quad (56a)$$

$$\Gamma_k^\dagger [I_N + q_k^* q_j \mathbb{M}] \Gamma_j = \Gamma_k^\dagger D^{kj} \Gamma_j = \delta_{kj}. \quad (56b)$$

Una vez obtenidas una de las posibles condiciones de ortonormalización en el espacio espinorial, continuaremos en el proceso de obtención de la propiedad de unitaridad de la SM. En el caso de que la región de interés -que consideramos con parámetros y coeficientes constantes-, tenga posibilidades de ser descrita por  $2N$  ondas planas con energía  $E$ , entonces  $N$  de ellas viajan hacia la izquierda y otras  $N$  lo hacen hacia la derecha. Tomaremos las expresiones (44) y (6) para la función de onda envolvente, y la forma lineal asociada al operador en (1), respectivamente, y las sustituiremos en (7). Pero antes, es útil escribir explícitamente



$$A = iB \cdot \sum_{k=1}^{2N} a_k q_k f_k + P \cdot \sum_{k=1}^{2N} a_k f_k, \quad (57)$$

$$A^\dagger = -i \sum_{k=1}^{2N} a_k^* q_k^* f_k^\dagger \cdot B - \sum_{k=1}^{2N} a_k^* f_k^\dagger \cdot P, \quad (58)$$

que son la forma lineal  $A$  y su transconjugada, en términos de (44). Aquí se han tenido en cuenta las propiedades (2) y se ha tomado  $P$  anti-hermítica por las razones expuestas anteriormente.

Si sustituimos (44), (57) y (58) en (7), tenemos

$$\begin{aligned} j = -i & \left[ -i \sum_{k=1}^{2N} a_k^* f_k^\dagger q_k^* B - \sum_{k=1}^{2N} a_k^* f_k^\dagger P \right] F + \\ & + i F^\dagger \left[ iB \sum_{k=1}^{2N} a_k q_k f_k + P \sum_{k,j=1}^{2N} a_k f_k \right], \\ j = - & \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger q_k^* B f_j + i \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger P f_j - \sum_{k,j=1}^{2N} a_j^* a_k f_j^\dagger B q_k f_k + \\ & + i \sum_{k,j=1}^{2N} a_j^* a_k f_j^\dagger P f_k, \end{aligned} \quad (59)$$

cambiando convenientemente el orden de los sub-índices y agrupando se obtiene

$$j = - \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger (q_k^* + q_j) B f_j + 2i \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger P f_j,$$

cuando conformamos el correspondiente producto contraído, entonces la expresión anterior queda en la forma

$$j = - \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger [(q_k^* + q_j) B - 2iP] f_j. \quad (60)$$

Si ahora tomamos la condición (54) ó (55), según sea el caso, entonces podemos escribir para la densidad de corriente de probabilidades la siguiente expresión

$$j = - \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j \delta_{kj}. \quad (61)$$

Aquí haremos una breve digresión con el propósito de analizar algunas implicaciones sobre el sistema diferencial de partida (1). Al sustituir (44) en (1), se tiene un QEP [21, 22], análogo a (46), que tiene la forma:

$$\sum_{j=1}^{2N} a_j [-q_j^2 B + 2\iota q_j P + W] f_j = O_N, \quad (62)$$

si a continuación realizamos un proceso similar al comprendido entre (47) y (51), entonces es sencillo obtener que

$$\sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j f_k^\dagger [\{(q_k^2)^* - q_j^2\} B - 2\iota(q_k^* - q_j) P] f_j = O_N,$$

y después de factorizar llegamos a

$$\sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j (q_k^* - q_j) f_k^\dagger [\{q_k^* + q_j\} B - 2\iota P] f_j = O_N,$$

de donde, al usar (54), se tiene

$$\sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_j (q_k^* - q_j) \delta_{kj} = O_N. \quad (63)$$

Veamos las implicaciones en (63) según los autovalores  $q_i$ , con  $i = k, j$

**Casos 4.2** Implicaciones en (63) según los autovalores  $q_i$ , con  $i = k, j$

- Para  $k \neq j \implies \delta_{kj} = 0 \implies$  la ecuación se satisface siempre.
- Para  $k = j$ 
  - Si  $q_i \in \text{Reales} \implies (q_k - q_k) = 0 \implies$  la ecuación se satisface siempre.
  - Si  $q_i \in \text{Complejos}$ , los autovalores aparecen en pares conjugados  $(q_i^*, q_i)$ . Como  $(q_i^* - q_i) = -2i \text{Im}[q_i]$ , entonces en la suma (63) aparecerán pares tales que:

$$-2\iota |a_n|^2 \text{Im}[q_n] - 2\iota |a_m|^2 \text{Im}[q_m] = 0,$$

que es igual a decir:

$$\begin{aligned} -2\iota |a_n|^2 \text{Im}[q_n] + 2\iota |a_m|^2 \text{Im}[q_n] &= 0 \\ 2\iota \text{Im}[q_n] \{|a_m|^2 - |a_n|^2\} &= 0. \\ \Downarrow & \end{aligned}$$

Para que se satisfaga esta expresión basta con exigir que los coeficientes de los autovalores conjugados por pares sean  $a_m \equiv a_n$ .

Después de este necesario paréntesis, regresamos a la fórmula (61), que reescribimos ahora para  $k = j$ , pues son los términos no nulos

$$\begin{aligned} j &= - \sum_{k,j=1}^{2N} a_k^* a_k \delta_{kj} \\ &= -\mathbf{a}^\dagger \cdot \mathbf{a}. \end{aligned}$$

Si consideramos la forma de escoger los coeficientes (como se mostró anteriormente), es posible transformar la expresión anterior a la representación de modos propagantes

$$j = -(\mathbf{a}_1^\dagger \ \mathbf{a}_2^\dagger) \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ -\mathbf{a}_2 \end{pmatrix},$$

cuya forma usual está dada por [17]

$$j = \mathbf{a}^\dagger \cdot \Sigma_z \cdot \mathbf{a}.$$

Si nos remitimos a lo demostrado en el sub-epígrafe 4.1.1, resulta evidente que de la expresión anterior se llega directamente a (37) y (38), o sea:

$$\begin{aligned} S^\dagger &= S^{-1}, \\ S^T &= S, \end{aligned}$$

que son las propiedades de unitaridad y carácter simétrico, respectivamente, a las que queríamos llegar.

## 5 Relaciones de Simetría

En este epígrafe, el propósito es llegar a las correspondientes relaciones de simetría respecto de los bloques de la matriz  $S$ , que como es usual en la literatura, pueden derivarse directamente de condiciones del tipo (23) o de los requerimientos que imponen la simetría de Reversión Temporal e Inversión Espacial sobre  $S$  [18]. El análisis de las simetrías discretas no se ha considerado. Por consiguiente, lo que aparece a continuación es el análisis directo de las consecuencias de (23) y (25) sobre las matrices de coeficientes de transmisión y reflexión.

Mediante las relaciones halladas, en principio, debe ser factible calcular una cualquiera de las magnitudes relevantes de la transmisión a través de las otras. La siguiente utilidad de tales expresiones -y quizás la más importante- es que se pueda extraer algún contenido físico de ellas, con el cual se pueda interpretar resultados de los observables de un problema físico concreto.

Se resuelve directamente (23), o sea

$$\begin{aligned} \left\| \begin{matrix} r & t' \\ t & r' \end{matrix} \right\|^\dagger \left\| \begin{matrix} \Pi_R^{11} & \Pi_R^{12} \\ \Pi_R^{21} & \Pi_R^{22} \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} r & t' \\ t & r' \end{matrix} \right\| &= \left\| \begin{matrix} \Pi_L^{11} & \Pi_L^{12} \\ \Pi_L^{21} & \Pi_L^{22} \end{matrix} \right\|, \\ \left\| \begin{matrix} r^\dagger & t^\dagger \\ (t')^\dagger & (r')^\dagger \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} (\mathbf{C}^*)^{-1} X_{--} & \mathbf{C}^{-1} & (\mathbf{C}^*)^{-1} X_{-+} \\ X_{+-} & \mathbf{C}^{-1} & X_{++} \end{matrix} \right\| \left\| \begin{matrix} r & t' \\ t & r' \end{matrix} \right\| &= \\ &= \left\| \begin{matrix} X_{++} & X_{+-} \mathbf{C} \\ \mathbf{C}^* X_{-+} & \mathbf{C}^* X_{--} \mathbf{C} \end{matrix} \right\|, \end{aligned}$$

y se llega al siguiente conjunto de relaciones no triviales

$$r^\dagger \Pi_R^{11} r + t^\dagger \Pi_R^{21} r + r^\dagger \Pi_R^{12} t + t^\dagger \Pi_R^{22} t = \Pi_L^{11} \quad (64a)$$

$$r^\dagger \Pi_R^{11} t' + t^\dagger \Pi_R^{21} t' + r^\dagger \Pi_R^{12} r' + t^\dagger \Pi_R^{22} r' = \Pi_L^{12} \quad (64b)$$

$$(t')^\dagger \Pi_R^{11} r + (r')^\dagger \Pi_R^{21} r + (t')^\dagger \Pi_R^{12} t + (r')^\dagger \Pi_R^{22} t = \Pi_L^{21} \quad (64c)$$

$$(t')^\dagger \Pi_R^{11} t' + (r')^\dagger \Pi_R^{21} t' + (t')^\dagger \Pi_R^{12} r' + (r')^\dagger \Pi_R^{22} r' = \Pi_L^{22}. \quad (64d)$$

Sólo si las variables  $t, r, t'$  y  $r'$  fuesen hermíticas este sistema estaría bien definido matemáticamente y podrían obtenerse expresiones para cada una en función de las otras. Aún así, no es evidente que dichas expresiones sean útiles, como ocurre al desarrollar (25). En ese caso se obtienen relaciones sencillas, cuyo contenido físico es manejable, lo cual es debido a la forma diagonal de  $\mathbf{J}$ .

Si por ejemplo, en (64a), exigimos como condición de frontera, incidencia sólo por la izquierda del sistema dispersor (o sea, desde  $-\infty$ ), que implica hacer  $\mathcal{A}_{j-}^R = 0; \forall j = 1, \dots, N$ , entonces  $\Pi_R^{11} = \Pi_R^{12} = \Pi_R^{21} = 0$ , y en (64aa) tenemos que  $t^\dagger \Pi_R^{22} t = \Pi_L^{11}$ , que más explícitamente significa que

$$t^\dagger X_{++} t = X_{++}. \quad (65)$$

Lamentablemente, en (64a (b)-(d)), bajo las condiciones impuestas, aparece en el miembro derecho, una indeterminación de división por cero. Más adelante regresaremos sobre las ecuaciones (64a).

## 6 Tunelaje de Amplitudes

Anteriormente comentamos que la MSA multi-componente, sintetiza dos enfoques del formalismo de la TM sobre una base común, potenciando las ventajas de cada una de las técnicas. Como la teoría de dispersión es piedra angular en nuestra aproximación, iniciamos su estudio y constatamos que en la literatura existen diferentes enfoques de la SM. En aras de ambientar esta diversidad es que decidimos insertar convenientemente una breve digresión en esta sección, la cual pretende unificar criterios en relación con las expresiones para las matrices de transmisión y reflexión, para diferentes formas de definir la Matriz de Dispersión.

No siempre que se dice: Matriz de Dispersión, se tiene en mente exactamente lo mismo, aunque se esté hablando de cosas parecidas. El objetivo que tiene esta parte, radica precisamente en conocer las relaciones existentes entre los diferentes objetos que se conectan con la SM y revelar las similitudes y diferencias posibles. En la literatura, la SM ha sido definida para conectar distintos objetos asociados al flujo incidente de partículas (o cuasi-partículas), con sus similares del flujo emergente después de la "colisión" con el sistema dispersor. Para abarcar esta diversidad, se escribirá una generalización de (15)

$$\mathcal{S} = \left\| \begin{array}{c} \mathcal{A}_+^L \\ \mathcal{A}_-^R \end{array} \right\|_{in}^{(2N \times 1)} ; \quad \mathcal{O} = \left\| \begin{array}{c} \mathcal{A}_-^L \\ \mathcal{A}_+^R \end{array} \right\|_{out}^{(2N \times 1)}, \quad (66)$$

y según sea el caso, los elementos de  $\mathcal{A}$ , representarán uno de los objetos de la Tabla 1.

Table 1: Distintos enfoques de la SM en la literatura.

Caso	Objeto que conecta	Símbolo	Referencia básica
(i)	Coefficientes (de las ondas viajeras)	$\mathbf{a}_j$	Mello, P. Pereyra y N. Kumar [17] A. D. Sánchez y C. R. Proetto [7]
(ii)	Vectores de onda (ondas propagantes)	$\mathbf{a}_j f_j(z)$	P. Pereyra [18]
(iii)	Vectores de estado (parte-z de $f_j(z)$ )	$\mathbf{a}_j \varphi_j(z)$	L. Diago, P. Pereyra, H. Coppola, R. Pérez [8]
(iv)	Funciones de onda (dependientes del tiempo)	$F_j(t = \pm\infty)$	A. S. Davydov [23]

Los casos que se unificarán son el (i) y el (iii), porque son los que están directamente relacionados con nuestro enfoque de la MSA. Sin embargo, puede notarse la proximidad entre (ii) y (iii): En el modelo KL, por ejemplo, la diferencia entre estos últimos, consiste en que  $\varphi_j$  excluye los espinores ( $4 \times 1$ ), cuya ortonormalización deriva de un QEP. La razón de unificar los casos (i) y (iii), se debe a la relación directa que estos enfoques guardan con nuestra aproximación MSA.

Inicialmente expresamos las matrices de las amplitudes de transmisión y reflexión en cada uno de los dos casos mencionados. Después de las correspondientes transformaciones, agrupamos lo obtenido y llegamos a los siguientes productos contraídos para las magnitudes de interés

$$\left. \begin{array}{l} t = (\varphi_+^R)^{-1} \left\{ \alpha - \beta \delta^{-1} \gamma \right\} \varphi_+^L \\ r = -(\varphi_-^L)^{-1} \left\{ \delta^{-1} \gamma \right\} \varphi_+^L \\ t' = (\varphi_-^L)^{-1} \left\{ \delta^{-1} \right\} \varphi_-^R \\ r' = (\varphi_+^R)^{-1} \left\{ \beta \delta^{-1} \right\} \varphi_-^R \end{array} \right\}. \quad (67)$$

Este desarrollo es independiente del tipo de condición de unitariedad que satisfaga la SM. Este sistema aparece expresado en términos de los bloques  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  de la matriz  $M_{SV}(z_R, z_L)$ . La diferencia entre los casos (i) y (iii), es de factores de fase que no contribuyen a los valores esperados de los coeficientes de transmisión y reflexión, lo cual es independiente del hecho de que los medios de los electrodos sean iguales o diferentes. El ejemplo que se resuelve a continuación permite ilustrar estos razonamientos. Las relaciones de (67) serán evaluadas para el modelo KL ( $4 \times 4$ ).

Consideremos el problema de la dispersión simultánea de H y L en una barrera simple, emparedada en capas de materiales idénticos sin campo externo aplicado. Las exponenciales, que se ordenan según:  $H_{+3/2}$ ,  $L_{-1/2}$ ,  $L_{+1/2}$ ,  $H_{3/2}$  [5, 8], estarán expresadas en términos de magnitudes adimensionalizadas, que se representan ahora como  $q = k_z a_0$  y  $\xi = z/a_0$ , donde  $a_0$  es el radio de Bohr. Entonces

$$\varphi_+^L = \left\| \begin{array}{cccc} e^{iq_H \xi} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{iq_L \xi} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e^{iq_L \xi} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{iq_H \xi} \end{array} \right\|, \quad (\varphi_+^R)^{-1} = (\varphi_+^L)^*, \quad \text{y} \quad (\varphi_-^L)^{-1} = \varphi_+^L.$$

Representamos

$$\alpha - \beta \delta^{-1} \gamma = \left\| \begin{array}{cccc} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} & \lambda_{14} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} & \lambda_{24} \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} & \lambda_{34} \\ \lambda_{41} & \lambda_{42} & \lambda_{43} & \lambda_{44} \end{array} \right\|, \quad -\delta^{-1} \gamma = \left\| \begin{array}{cccc} \rho_{11} & \rho_{12} & \rho_{13} & \rho_{14} \\ \rho_{21} & \rho_{22} & \rho_{23} & \rho_{24} \\ \rho_{31} & \rho_{32} & \rho_{33} & \rho_{34} \\ \rho_{41} & \rho_{42} & \rho_{43} & \rho_{44} \end{array} \right\|.$$

Si desarrollamos  $t$  de (67) y  $r$ , definida en (67), se obtiene como consecuencia que  $T_{ji}$  y  $R_{ji}$  de los casos (i) y (iii) son iguales, esto es:

$$\left. \begin{array}{l} \text{Caso(i)} \\ |\lambda_{ji}|^2 \\ \forall i, j \end{array} \right\} = T_{ji} = \left\{ \begin{array}{ll} |\lambda_{ji}|^2; & \forall i = j \text{ or } i + j = 5 \\ |e^{i(q_n - q_m)\xi}|^2 |\lambda_{ji}|^2; & \text{else} \end{array} \right. = \left. \begin{array}{l} \text{Caso(iii)} \\ |\lambda_{ji}|^2 \\ \forall i, j \end{array} \right\} \quad (68)$$

y además

$$\left. \begin{array}{l} \text{Caso(i)} \\ |\rho_{ji}|^2 \\ \forall i, j \end{array} \right\} = R_{ji} = \left\{ \begin{array}{ll} |e^{i2(q_n)\xi}|^2 |\rho_{ji}|^2; & \forall i = j \text{ or } i + j = 5 \\ |e^{i(q_n + q_m)\xi}|^2 |\lambda_{ji}|^2; & \text{else} \end{array} \right. = \left. \begin{array}{l} \text{Caso(iii)} \\ |\rho_{ji}|^2 \\ \forall i, j \end{array} \right\} \quad (69)$$

El ejemplo resuelto muestra claramente, que las matrices de amplitudes de transmisión y reflexión de los casos (iii) y (i) son iguales hasta la exactitud de factores de fase que no aportan a los coeficientes correspondientes, tal como se aprecia directamente en (68) y (69). Sin embargo, las diferencias entre estos casos si se deben reflejar en la comprobación de la Ley de Conservación del Flujo en su forma matricial, debido a que esa expresión contiene directamente a las matrices  $t$  y  $r$ .

### 6.1 Conservación del Flujo de Probabilidades

Anteriormente analizamos que escoger la base de funciones LI arbitraria conduce a la denominada pseudo-unitaridad. En esta sección el interés es analizar cualitativamente las restricciones que impone la pseudo-unitaridad del operador de dispersión sobre los elementos de su forma matricial, en el marco del modelo de KL.

La condición de unitaridad  $SS^\dagger = S^\dagger S = I_{2N}$ , aplicable a un conjunto importante de problemas, implica en detalle que

$$\left. \begin{array}{l} \text{(a)} \quad \left. \begin{array}{l} R \leq 1 \\ T \leq 1 \end{array} \right\} \\ \text{(b)} \quad R \text{ y } T \text{ son anti-resonantes} \end{array} \right\}. \quad (70)$$

Al enfrentar el problema de la dispersión de huecos, intuitivamente, uno se siente motivado a la conjetura de que la continuidad de la densidad de corriente de probabilidades por el canal  $k$ -ésimo, satisface

$$\sum_i^N T_{ki} + \sum_i^N R_{ki} = 1, \quad (71)$$

sin embargo, al analizar cuidadosamente el problema nos encontramos que esta igualdad no siempre es verdadera. Tomaremos el escenario propuesto en [7], para iniciar el análisis. Se considerará incidencia sólo por la izquierda, lo cual significa que  $f = h = 0$  en la Fig.4(a). De (25) se puede obtener directamente

$$j_H |t_{HH}|^2 + j_L |t_{LH}|^2 + j_H |r_{HH}|^2 + j_L |r_{LH}|^2 = j_H \quad (72)$$

$$j_L |t_{LL}|^2 + j_H |t_{HL}|^2 + j_L |r_{LL}|^2 + j_H |r_{HL}|^2 = j_L. \quad (73)$$

El problema de una cuasi-partícula incidente:

Si se considera sólo un hueco pesado propagándose desde  $-\infty$ , entonces se debe emplear (72), que al dividirla por  $j_H$ , conduce a que  $T_{kH} \leq 1$ ,  $R_{kH} \leq 1$  y el carácter anti-resonante de ambas magnitudes. La evidencia indica que se satisface (70), por lo que un problema como el planteado, reproduce las condiciones de partícula incidente-emergente sin mezcla. Como se observa -bajo las suposiciones impuestas, la conductancia por un canal se reduce a su coeficiente de transmisión, por consiguiente dicha magnitud es

$$G_k^{(1)} = T_{ki} \Big|_{i=k} \leq 1. \quad (74)$$

El problema de dos cuasi-partículas incidentes:

Consideremos ahora, que inciden sincronizadamente desde  $-\infty$ , un hueco pesado y un hueco ligero y para simplificar tomaremos los huecos interactuando débilmente

-suponemos valores pequeños de  $k_x$  y  $k_y$  en las regiones  $R$  y  $L$ -, tal consideración es suficiente para el propósito enunciado y entonces para tener un problema matemáticamente bien definido hay que tomar (72) y (73), y después de algunas transformaciones obtenemos

$$T_{HH} + T_{LH} + T_{LL} + T_{HL} + R_{HH} + R_{LH} + R_{LL} + R_{HL} = 1 + \frac{j_L}{j_H}. \quad (75)$$

Si uno quiere tener otra vez una relación del tipo (71), entonces es necesario normalizar (75) convenientemente. Para ello multiplicamos ambos miembros por  $\eta = \frac{j_H}{j_L + j_H}$ , entonces tenemos

$$\eta \left\{ \sum_k^{L,H} T_{kH} + \sum_k^{L,H} T_{kL} + \sum_k^{L,H} R_{kH} + \sum_k^{L,H} R_{kL} \right\} = 1. \quad (76)$$

En tal sentido, subrayamos la concordancia entre  $\eta$  y lo que aparece en el reporte de Wessel y col [2], donde los autores presentan que el coeficiente de transmisión a través del canal  $n$ -ésimo, es

$$D_n = \frac{\langle f_n^{(t)} | j_z | f_n^{(t)} \rangle}{\langle f_1^{(i)} | j_z | f_1^{(i)} \rangle} = N |t_n|^2,$$

siendo  $N$  una constante de normalización, sin definición explícita en [2]. Una idea homóloga fue sostenida por los autores de la Ref. [26], los cuales parten de una relación del tipo (75) y llegan a otra del tipo (76), habiendo redefinido antes los coeficientes de transmisión y de reflexión de forma tal, que su suma quedará normalizada a la unidad.

De (75) se puede llegar a evaluar la *conductancia por un canal*. Este término puede ser más apropiado que el de *Probabilidad Total de Transmisión por un canal* (TTP), usado habitualmente en la literatura [7, 25], ya que refleja mejor la información que brinda esta magnitud en los problemas de varias partículas incidentes mezcladas, por otro lado evita confusiones a la hora de su evaluación numérica, como se verá más adelante. La conductancia  $G_k$  por el  $k$ -ésimo canal se define por [27]

$$G_k = \sum_i^N T_{ki}, \quad (77)$$

y se analizará, digamos, para el canal de salida H, bajo H y L incidentes, esto es

$$G_H = T_{HH} + T_{HL} = 1 + \frac{j_L}{j_H} - \{T_{LL} + T_{LH} + R_{HH} + R_{LH} + R_{LL} + R_{HL}\}. \quad (78)$$

Si se toma una base de funciones LI arbitraria, se puede demostrar que: Es posible encontrar valores de  $G_H$  tales que  $G_H > 1$ , para todo el rango de interés de la energía incidente ( $E_i$ ). Para que ocurra lo contrario, la diferencia entre el segundo y tercer término del miembro derecho de (78) debería ser cero. Para que esto sea



cierto debería cumplirse que  $t_{LL} = r_{HH} = r_{HL} = 0$ , lo cual implicaría que el canal de transmisión de hueco ligero a el mismo y el canal de reflexión de hueco pesado, están cerrados  $\forall E_i$ . Por tanto el sistema dispersor sería opaco para la onda que va al canal L desde un canal de hueco ligero y es transparente para la onda que se transmite al canal H desde cualquier canal. Esto no es aceptable, es suficiente mencionar que en una barrera de  $10 \text{ \AA}$  de *AlAs*, para  $E_i < 200 \text{ meV}$ ,  $R_{HH} \simeq 1$  [7]. Por tanto la suposición inicial es verdadera  $\forall E_i$  de los huecos. Nótese, que lo anterior no excluye que, eventualmente,  $G_H \leq 1$  en ciertos valores de energía.

### 6.1.1 Estimación de la Conductancia:

Se puede lograr una estimación de la cota máxima de  $G_k$ . La idea que subyace, es tener en cuenta la contribución complementaria de las rutas cruzadas al flujo de una transición directa, al ir incorporando partículas, bajo mezcla no nula. El aporte de cada canal es independiente del resto, por lo que este asunto es un reflejo del Principio de Superposición. Lo que viene a continuación no pretende ser una demostración rigurosa, sino un criterio para el trabajo de evaluación de los resultados y es válido para los problemas con potencial seccionalmente constante, cuya base de funciones LI es arbitraria.

Téngase presente que operaremos con *límites superiores* o *valores máximos*, y no con la gradación numérica posible de las magnitudes físicas. Supóngase, que inicialmente tenemos el problema de una **partícula incidente**, en tal caso la **cota superior** de la conductancia por un canal es 1, tal como reza en (74). Agregamos a continuación un nuevo portador, por lo que se ha pasado al problema de **dos partículas incidentes** con acoplamiento, en esta situación la **cota superior** de la conductancia por un canal -que anteriormente era 1-, tiene ahora una fracción añadida y que se observa directamente en (78). Pensemos en términos del Principio de Superposición de ondas, lo máximo que puede transferir un canal a sí mismo es toda la energía incidente -eso significaría probabilidad 1 de ocurrencia del evento. El paso siguiente sería incorporar la fracción que representa el aporte de la transición cruzada. El portador adicionado, lo máximo que puede transferir al canal bajo observación, es  $\frac{1}{2}$ , ya que el  $\frac{1}{2}$  "restante" sería lo máximo que puede transferirse a sí mismo. Esta equipartición en la transferencia de energía, puede interpretarse como manifestación de fenómeno de interferencia por superposición constructiva, y es la clave de lo que pretendemos describir. Enfoquemos el problema de **N partículas incidentes** con acoplamiento, bajo el presupuesto que estamos añadiendo cada vez una fracción de flujo cuando estamos incluyendo nuevos portadores en el análisis. Haciendo el análisis progresivamente por inducción se llega a:

$$\begin{aligned} G_k \Big|_N &\approx 1 + \frac{1}{N} + \frac{1}{N} + \dots + \frac{1}{N} \approx 1 + (N-1) \frac{1}{N} \approx \\ &\approx \frac{2N-1}{N} < \limsup = 2; \quad \forall N \geq 2. \end{aligned} \quad (79)$$

Lo anterior conduce a concluir, que la conductancia  $G_k$  por el  $k$ -ésimo canal es estrictamente **menor que 2** y es independiente del número de partículas del flujo incidente.

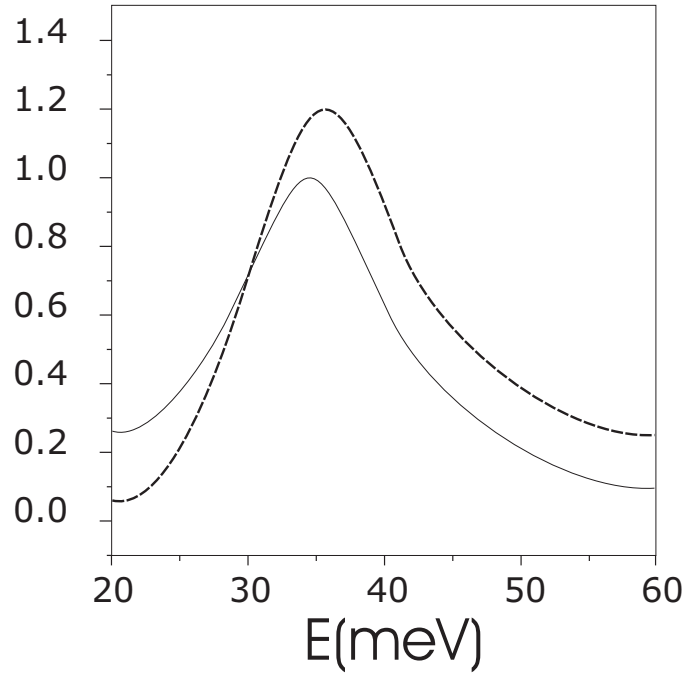
Para la conductancia  $G$  del sistema [24, 22]

**Definición 6.1**

$$G = Tr(tt^\dagger) = \sum_k^N G_k, \quad (80)$$

el razonamiento es similar. Al agregar un nuevo portador, la conductancia del sistema tiene ahora fracciones añadidas y que se derivan indirectamente si en (6.1) introducimos la “suma” de las cotas superiores de la conductancia de cada canal. Consideramos que el portador adicionado, lo máximo que puede transferir al canal inicial es  $\frac{1}{2}$ , mientras que el  $\frac{1}{2}$  “restante” sería lo máximo que puede transferirse a sí mismo, todo junto constituye su aporte a la conductancia del sistema. Suponemos ausencia de fuentes o sumideros de portadores. En un análisis por inducción hemos obtenido que para  $N$  partículas tendremos

$$\begin{aligned} G|_N &\approx 1 + \frac{N-1}{N} + \dots + \frac{N-1}{N} \approx 1 + N \left( \frac{N-1}{N} \right) = \\ &= 1 + (N-1) \leq \text{sup} = N; \quad \forall N \geq 1 \end{aligned} \quad (81)$$



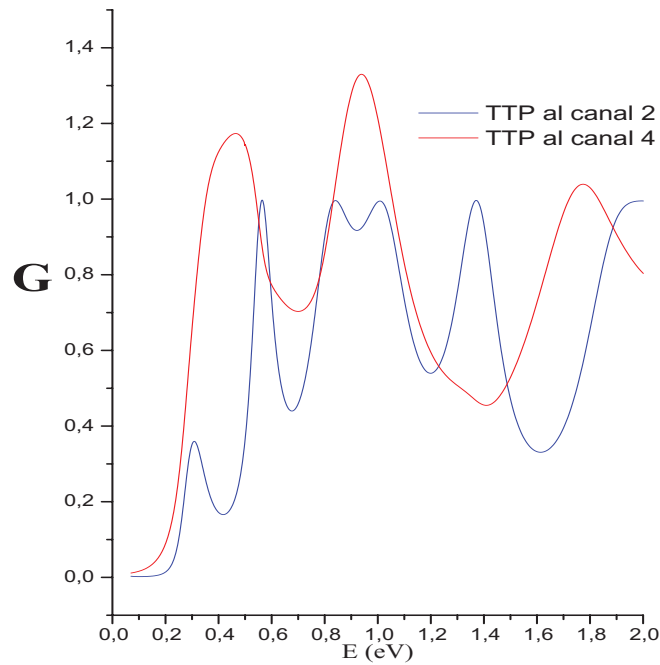


Fig. 6: Conductancia de  $hh$  y  $lh$  por canales (TTP: *Total Transmission Probability*, en inglés). Las curvas de TTP corresponden a (77, como función de la energía de los  $hh_{\pm 3/2}$  y  $lh_{\pm 3/2}$  incidentes simultáneamente sobre una barrera dispersora de AlAs de  $10 \text{ \AA}$ , embebida en capas de GaAs. De los 4 canales accesibles se muestran: el canal 4, correspondiente a  $hh_{-3/2}$  (línea roja) y el canal 2, correspondiente a  $lh_{-1/2}$  (línea azul).

Fig. 5: Conductancia y reflectividad de H por canales como función de la energía de un H incidente para un QW de  $50 \text{ \AA}$ , como centro dispersor [7]. La conductancia de la transición LH es mostrada con la curva de trazos discontinuos. La línea continua representa la reflectividad desde el canal HH.

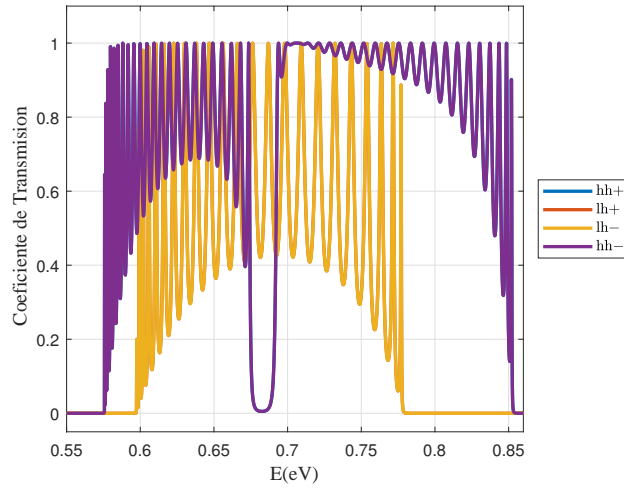
Este análisis conduce a concluir, que la conductancia  $G$  del sistema se mantiene siendo **menor o igual** que  $N$ , como en los problemas tipo EMA, y es interesante que esta conclusión lógica no entra en conflicto con los posibles valores que puede alcanzar  $G_k$ , que como se vió anteriormente pueden ser mayores que 1, aunque están acotados, por encima, a 2. Probablemente, el límite superior al que tiende  $G_k$  junto al carácter anti-resonante que le acompaña, sean los que aseguran que la  $G$  de Landauer del sistema, sea menor o igual al número de partículas involucradas en los procesos de dispersión con los que estamos tratando.

Obsérvese que para  $N = 1$ , (79) y (81) satisfacen que

$$G \Big|_{N=1} = G_k \Big|_{N=1} = G_k^{(1)} = T_{ki} \Big|_{i=k} \leq \sup = 1, \quad (82)$$

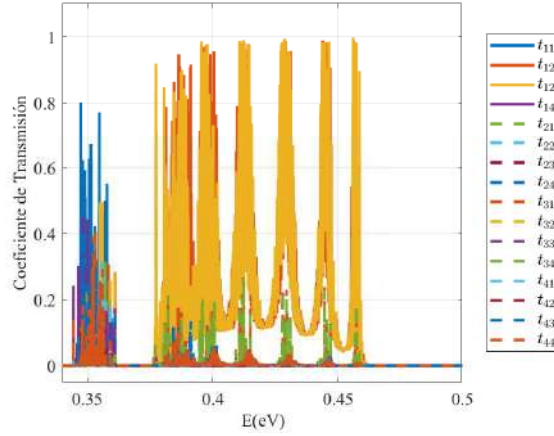
como se debe esperar.

En la Figura 5 se muestra que para un pozo de potencial de *GaAs* con ancho igual a  $50 \text{ \AA}$  embebido en  $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$  [ver Fig.4(b)], la conductancia por el canal de salida L, es  $G_L \approx 1.2$  para  $E = 35 \text{ meV}$ , no satisface el principio de conservación (71). En este caso la cuasi-partícula incidente es un H (la amplitud incidente del L es estrictamente igual a 0)<sup>4</sup>. Tanto este resultado, como el nuestro [vea la Fig.6], son para  $n = 1$  celda [vea Fig.2]. Las curvas TTP de la Fig.6, corresponden a (77), como función de la energía de los  $hh_{\pm 3/2}$  y  $lh_{\pm 3/2}$ , incidentes simultáneamente sobre una barrera dispersora ( $n = 1$ )



(a) Superred de  $\{GaAs/AlAs/GaAs\}^n$ ; con celda de dimensiones  $25 - 20 - 25 \text{ \AA}$ ,  $n = 24$  celdas,  $k_x = 0$  y  $k_y = 0$

<sup>4</sup> El símbolo de la derecha es el canal de entrada, el otro es el de salida



(b) Superred de  $\{GaAs/AlAs/GaAs\}^n$ ; con celda de dimensiones  $20-20-20 \text{ \AA}$ ,  $n = 8$  celdas,  $k_x = 0.01 \text{ \AA}^{-1}$  y  $k_y = 0$

Fig. 7: Probabilidad de Transmisión de  $hh$  y  $lh$  por canales, como función de la energía de los  $hh_{\pm 3/2}$  y  $lh_{\pm 1/2}$ , incidentes simultáneamente sobre una heteroestructura a capas con barreras dispersoras de  $AlAs$  de espesor  $20 \text{ \AA}$ , embebidas en capas de  $GaAs$  de ancho  $25(20) \text{ \AA}$ . La superred  $\{GaAs/AlAs/GaAs\}^n$  tiene  $n = 24(8)$  celdas [Paneles (a)/(b)]. Hemos tomado  $V_b = 0.498 \text{ eV}$ .

de  $AlAs$  de  $10 \text{ \AA}$ , embebida en capas de  $GaAs$ . Para el canal 4 correspondiente a  $hh_{-3/2}$  (línea en rojo), en el que  $G_{hh_{-3/2}} \approx 1.2$  para  $E = 0.4 \text{ eV}$  y  $G_{hh_{-3/2}} \approx 1.34$  para  $E = 0.9 \text{ eV}$ , se ajustan correctamente al estimado (79), pero superan visiblemente el valor esperado por la propiedad de unitariedad del flujo (37) para huecos, y correspondientemente no satisfacen la regla estadística (71)<sup>5</sup>. Es necesario subrayar que esto es así ya que ambos resultados se han realizado con una base de funciones LI arbitraria, que no corresponde a la definición (4.1).

En la Figura 7 se muestra una situación análoga a la de la Fig.6. En este caso, una diferencia con el sistema físico de la Fig.6, es que se ha considerado una superred de  $\{GaAs/AlAs/GaAs\}^n$ , que tiene  $n = 24(8)$  celdas [Paneles (a)/(b)]. Hemos tomado  $k_x = 0(0.01) \text{ \AA}^{-1}$ ,  $k_y = 0$  y  $V_b = 0.498 \text{ eV}$  [Paneles (a)/(b)]. En el panel (a) se puede observar, que las rutas de  $hh_{\pm 3/2}$  se superponen, así como también las de  $lh_{\pm 1/2}$ . En el panel (b) se puede observar que las rutas directas [vea la Fig.2] son las dominantes, pero hay presencia no despreciable de las rutas cruzadas. En la región de  $E \in [0.39, 0.46] \text{ eV}$ , las rutas dominantes son las de  $lh_{\pm 1/2}$ , mientras que en la región de  $E \in [0.34, 0.38] \text{ eV}$ , las rutas dominantes son las de  $hh_{\pm 3/2}$ . Un aspecto relevante, es que la base seleccionada, ha sido ortonormalizada completamente, siguiendo el criterio de (4.1). Nótese que para todo el rango seleccionado, a pesar que el valor de la mezcla es alto [Panel (b)], se preserva adecuadamente la unitariedad del flujo según

<sup>5</sup> Téngase presente que  $hh$  y  $lh$  representan hueco pesado y hueco ligero, respectivamente

(37) y se satisface correctamente el principio de conservación del flujo (71). En adición a esto, es útil destacar una diferencia sustancial: El cálculo de la Figura 7 ha sido realizado en el marco de un novedoso enfoque de transmisión simultánea de  $hh$  y  $lh$  a través de una barrera [8], y ha sido extendido exitosamente a la doble barrera resonante y la superred [9, 27].

### 6.1.2 Forma matricial de la Ley de Conservación del Flujo (EFA):

La relación (12) tiene su similar en forma matricial, cuyo sentido físico es la Ley de Conservación del flujo de densidad de corriente, y que se expresa como

$$\mathcal{I}_{\text{FLUX}} + \mathcal{R}_{\text{FLUX}} = \mathcal{T}_{\text{FLUX}}, \quad (83)$$

donde

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{\text{FLUX}} &= -i X_{++}^L & (a) \\ \mathcal{R}_{\text{FLUX}} &= -i r^\dagger X_{--}^L r & (b) \\ \mathcal{T}_{\text{FLUX}} &= -i t^\dagger X_{++}^R t, & (c) \end{aligned} \quad (84)$$

donde  $\mathcal{I}_{\text{FLUX}}$ ,  $\mathcal{R}_{\text{FLUX}}$  y  $\mathcal{T}_{\text{FLUX}}$  son las densidades de probabilidad de flujo incidente, reflejado y transmitido, respectivamente [11]. En el tipo de procesos de dispersión que estamos tratando en los sistemas que se describen en la EFA, ¿qué habría que comprobar si se desea evaluar el cumplimiento de las propiedades conservativas del sistema, sobre los elementos de la matriz  $S$ ? La respuesta en ese caso, es verificar las ecuaciones (64a) y/o (83). Esta última se considerará en el límite de modos desacoplados, empleando los resultados obtenidos en el epígrafe 4.1, esto es que  $X_{++}^{R,L} = -iI_N$  y  $X_{--}^{L,R} = iI_N$

$$\begin{aligned} \left( \mathcal{I}_{\text{flux}} + \mathcal{R}_{\text{flux}} \right) \Big|_{(d)} &= \left( \mathcal{T}_{\text{flux}} \right) \Big|_{(d)} \\ -i(-iI_N) - i r^\dagger (iI_N) r &= -i t^\dagger (-iI_N) t \\ -I_N + r^\dagger r &= -t^\dagger t \\ t^\dagger t + r^\dagger r &= I_N. \end{aligned} \quad (85)$$

De esta forma se ha obtenido que la ley (83) se transforma en la propiedad conservativa usual  $R + T = 1$ , al imponer condiciones de modos desacoplados. Con las ecuaciones (64aa) y (64ad) es posible arribar a un resultado convergente similar

$$\begin{aligned} r^\dagger \Pi_R^{11} r + t^\dagger \Pi_R^{21} r + r^\dagger \Pi_R^{12} t + t^\dagger \Pi_R^{22} t &= \Pi_L^{11} & (a) \\ (t')^\dagger \Pi_R^{11} t' + (r')^\dagger \Pi_R^{21} t' + (t')^\dagger \Pi_R^{12} r' + (r')^\dagger \Pi_R^{22} r' &= \Pi_L^{22}. & (d) \end{aligned}$$

Cuando exigimos condiciones de modos desacoplados en las regiones  $R$  y  $L$ , ya fue mostrado en el epígrafe 4.1.2 que,  $\Pi_{R,L}^{12} = \Pi_{R,L}^{21} = 0$  y  $\Pi_{L,R}^{11} = \Pi_{L,R}^{22} = -iI_N$ , por tanto de (a) y (d) se obtiene

$$\begin{aligned} -ir^\dagger I_N r - it^\dagger I_N t &= -iI_N \\ -i(r')^\dagger I_N r' - i(t')^\dagger I_N t' &= -iI_N, \end{aligned} \quad (86)$$

respectivamente, de donde es evidente que

$$\left. \begin{aligned} t^\dagger t + r^\dagger r &= I_N \\ (t')^\dagger t' + (r')^\dagger r' &= I_N \end{aligned} \right\}. \quad (87)$$

Es bien conocido que la matriz de dispersión  $S$ , cuyos elementos obedecen (87), es unitaria y simétrica [17, 18], y es lo que queríamos mostrar.

## Apéndices

### 7 Parámetros del modelo Kohn-Luttinger

Los parámetros a continuación, corresponden al Hamiltoniano de KL [5, 9]

$$\begin{aligned} P &= \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_1 (\kappa_T^2 + k_z^2); \quad Q = \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_2 (\kappa_T^2 - 2k_z^2) \\ R &= \frac{\hbar^2 \sqrt{3}}{2m_0} (\mu k_+^2 - \gamma k_-^2); \quad S = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \gamma_3 k_- k_z \\ T &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \beta k_-; \quad T' = -\frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar^2}{2m_0} \beta k_z \\ k_\pm &= k_x \pm ik_y; \quad \kappa_T^2 = k_x^2 + k_y^2 \\ \gamma &= \frac{1}{2} (\gamma_2 + \gamma_3); \quad \mu = \frac{1}{2} (\gamma_3 - \gamma_2) \\ A_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 + \gamma_2); \quad A_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0} (\gamma_1 - \gamma_2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_1 &= \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2) ; B_2 = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2) \\
C_{xy} &= \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{2m_0} \sqrt{\gamma_2^2(k_x^2 - k_y^2)^2 + 4\gamma_3^2 k_x^2 k_y^2} ; D_{xy} = \sqrt{3} \frac{\hbar^2}{m_0} \gamma_3 \kappa_{\tau} \\
\mathcal{A}_1 &= \gamma_1 + \gamma_2 ; \mathcal{A}_2 = \gamma_1 - \gamma_2 \\
\mathcal{B}_1 &= \gamma_1 + 2\gamma_2 ; \mathcal{B}_2 = \gamma_1 - 2\gamma_2 \\
q_i &= k_i a_0 \quad ; \quad i = x, y, z \\
q_{\tau}^2 &= q_x^2 + q_y^2 ; q = \lambda a_0 \\
t_{xy} &= \frac{C_{xy}}{R_y} ; S_{xy} = \frac{D_{xy}}{R_y} \\
\mathcal{E} &= V(z) - E, \quad \tilde{\mathcal{E}} = \frac{\mathcal{E}}{R_y} ; V_0 = 0 \\
\beta_{\tau} &= \frac{1}{2} [(\mathcal{A}_1 \mathcal{B}_1 + \mathcal{A}_2 \mathcal{B}_2) q_{\tau}^2 + (\mathcal{B}_1 + \mathcal{B}_2) \tilde{\mathcal{E}} - S_{xy}^2] ; \alpha_{\tau} = \mathcal{B}_1 \mathcal{B}_2 \\
\delta_{\tau} &= \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 q_{\tau}^4 + (\mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2) \tilde{\mathcal{E}} q_{\tau}^2 + \tilde{\mathcal{E}}^2 - t_{xy}^2
\end{aligned}$$

## 8 Parámetros de los hamiltonianos $\hat{\mathcal{H}}_u$ y $\hat{\mathcal{H}}_l$

$$\left. \begin{aligned}
g_{11} &= \mathcal{A}_2 q_{\tau}^2 + \mathcal{B}_1 q_1^2 + \tilde{\mathcal{E}} \\
g_{13} &= \mathcal{A}_2 q_{\tau}^2 + \mathcal{B}_1 q_3^2 + \tilde{\mathcal{E}} \\
g_{22} &= -(t_{xy} + i S_{xy} q_2) \\
g_{24} &= -(t_{xy} + i S_{xy} q_4) \\
g_{31} &= \mathcal{A}_1 q_{\tau}^2 + \mathcal{B}_2 q_1^2 + \tilde{\mathcal{E}} \\
g_{33} &= \mathcal{A}_1 q_{\tau}^2 + \mathcal{B}_2 q_3^2 + \tilde{\mathcal{E}} \\
g_{42} &= -(t_{xy} + i S_{xy} q_2) \\
g_{44} &= -(t_{xy} + i S_{xy} q_4)
\end{aligned} \right\}, \quad (88)$$

por las peculiaridades de los hamiltonianos se deduce

$$\left. \begin{aligned}
q_2 &= -q_1 \\
q_4 &= -q_3 \\
g_{11} &= g_{12} \\
g_{13} &= g_{14} \\
g_{22} &= g_{21}^* \\
g_{24} &= g_{23}^* \\
g_{31} &= g_{32} \\
g_{33} &= g_{34} \\
g_{42} &= g_{41}^* \\
g_{44} &= g_{43}^*
\end{aligned} \right\}, \quad (89)$$



siendo

$$\left. \begin{array}{l} g_{1j}, g_{3j} \text{ real} \\ g_{2j}, g_{4j} \text{ complejo} \end{array} \right\}.$$

Los parámetros de Lüttinger:  $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$  tipifican cada capa de la heteroestructura.

## 9 Elementos matriciales de la FTM $M_u(z, z_0)$

Esta matriz pertenece al sistema de ecuaciones diferenciales del sub-espacio *up* [9], descrito por el hamiltoniano de este subespacio y sus elementos matriciales están dados por

$$(M_u(\xi, \xi_0))_{ij} = \frac{1}{\Delta_T} \left[ \ell_{ij}^{(1)} \cos(\tilde{q}_m) + \ell_{ij}^{(2)} \cos(\tilde{q}_{hh}) \ell_{ij}^{(3)} \sin(\tilde{q}_m) + \ell_{ij}^{(4)} \sin(\tilde{q}_{hh}) \right],$$

Table 2: Elementos matriciales de la matriz  $M_u(z, z_0)$  correspondientes al subespacio *up* de KL. Esta matriz pertenece al sistema de ecuaciones diferenciales del sub-espacio  $(2 \times 2)$  [9]

Coefficientes de los elem. mat.	$\ell_{ij}^{(1)}$	$\ell_{ij}^{(2)}$	$\ell_{ij}^{(3)}$	$\ell_{ij}^{(4)}$
$M_{11}$	$\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \Omega_3$	$-\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_2 \Omega_1$	$\alpha_1 \alpha_2 t_{xy} S_{xy}$	$-\alpha_1 \alpha_2 \frac{q_1}{q_3} t_{xy} S_{xy}$
$M_{12}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$-S_{xy} \Theta_2$	$-\frac{q_1}{q_3} S_{xy} \Theta_2$
$M_{13}$	0	0	$\alpha_1 \Theta_1$	$-\frac{q_1}{q_3} \alpha_2 \Theta_1$
$M_{14}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy}$	$\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy}$	$-\mathcal{B}_2 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$\frac{q_1}{q_3} b_2 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$
$M_{21}$	$q_1 t_{xy} \Theta_3$	$-q_1 t_{xy} \Theta_1$	$S_{xy} \Theta_4$	$-\frac{q_1}{q_3} S_{xy} \Theta_4$
$M_{22}$	$-\alpha_2 q_1 \Theta_1$	$\alpha_1 q_1 \Theta_1$	$-S_{xy} t_{xy} \alpha_1 \alpha_2$	$\frac{q_1}{q_3} S_{xy} t_{xy} \alpha_1 \alpha_2$
$M_{23}$	$-q_1 S_{xy} \Theta_1$	$q_1 S_{xy} \Theta_1$	$t_{xy} \Theta_1$	$-\frac{q_1}{q_3} t_{xy} \Theta_1$
$M_{24}$	0	0	$-\mathcal{B}_2 \alpha_2 \Omega_1$	$\mathcal{B}_2 \alpha_1 \Omega_3 \frac{q_1}{q_3}$
$M_{31}$	$q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} t_{xy}$	$-q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} t_{xy}$	$-\mathcal{B}_2 q_1^2 \alpha_1 \Omega_3$	$\mathcal{B}_2 q_1 q_3 \alpha_2 \Omega_1$
$M_{32}$	$-q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} \Theta_2$	$q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} \Theta_2$	$\mathcal{B}_2 q_1^2 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 q_3 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$
$M_{33}$	$\alpha_1 q_1 \Theta_1$	$-\alpha_2 q_1 \Theta_1$	0	0
$M_{34}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \alpha_2 t_{xy}$	$\mathcal{B}_2 q_1^2 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 q_3 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy}$
$M_{41}$	$q_1 S_{xy} \Theta_4$	$-q_1 S_{xy} \Theta_4$	$-q_1^2 t_{xy} \Theta_3$	$q_1 q_3 t_{xy} \Theta_1$
$M_{42}$	$-q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} t_{xy}$	$q_1 \alpha_1 \alpha_2 S_{xy} t_{xy}$	$\alpha_1 q_1^2 \Theta_1$	$-q_1 q_3 \alpha_1 \Theta_1$
$M_{43}$	$q_1 t_{xy} \Theta_1$	$-q_1 t_{xy} \Theta_1$	$\alpha_2 q_1^2 \Theta_1$	$-\alpha_1 q_1 q_3 \Theta_1$
$M_{44}$	$-\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_2 \Omega_1$	$\mathcal{B}_2 q_1 \alpha_1 \Omega_3$	0	0

Algunos de los parámetros usados en la tabla que aparece arriba son:

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= \mathcal{B}_2 q_1^2 + \Theta_2 ; \quad \alpha_2 = \mathcal{B}_2 q_3^2 + \Theta_2 \\
\Delta_T &= \mathcal{B}_2 q_1 (q_1^2 - q_3^2) \Theta_1 \\
\Theta_1 &= \mathcal{B}_2 t_{xy}^2 - \Theta_2 S_{xy}^2 ; \quad \Theta_2 = \mathcal{A}_1 q_T^2 + \tilde{\mathcal{E}} \\
\Theta_3 &= \mathcal{B}_2 \Omega_3 - \alpha_2 S_{xy}^2 ; \quad \Theta_4 = \mathcal{B}_2 q_1^2 \Omega_3 + \alpha_2 t_{xy}^2 \\
\Omega_1 &= t_{xy}^2 + q_1^2 S_{xy}^2 ; \quad \Omega_3 = t_{xy}^2 + q_3^2 S_{xy}^2
\end{aligned}$$

Límites de aplicabilidad del modelo MSA multi-componente

Entre las limitaciones del modelo se encuentran: (i) El sistema estudiado debe ser considerado en el marco de la aproximación de banda plana (parámetros semi-empíricos de banda seccionalmente constantes). En el caso de un campo eléctrico externo, los electrodos deberán mantenerse modelados como bandas planas. (ii) Las que derivan de las acotaciones de los hamiltonianos  $k \cdot p$  de partida a la vecindad de ciertos puntos de alta simetría de la Zona de Brillouin. Esta ligadura acota la energía del flujo incidente a algunos electrón-voltios y los valores de  $\kappa_T$  a una fracción de la Zona de Brillouin (aproximadamente el 25 porciento). (iii) Y las que provienen de las conocidas inestabilidades numéricas de la FTM para espesores de algunas decenas de Å. Sin embargo, esta última desventaja parece ser salvable bajo determinadas condiciones, de lo cual se comenta más adelante.

Si tenemos en consideración que una de las limitaciones esenciales de nuestro modelo, se asocia a las restricciones del análisis en la vecindad de ciertos puntos de alta simetría de la Zona de Brillouin, valdría la pena intentar el ejercicio de superarla extendiendo nuestro enfoque STA a regiones más alejadas de los puntos de alta simetría de la Zona de Brillouin. Una de las vías podría ser el cambio del hamiltoniano de partida por otro que considere explícitamente un número mayor de bandas. Otra alternativa complementaria sería seguir el criterio de que en la medida que aumentamos el número de celdas y se alcanzan condiciones de resonancia coherente en que los estados de la superred están deslocalizados, las magnitudes de interés deben depender cada vez menos de los hamiltonianos de partida y más del perfil del potencial de la heteroestructura [9, 27].

## 10 Inestabilidades numéricas de la Matriz de Transferencia

Para eludir las inestabilidades numéricas del formalismo de la TM, encontrado en estructuras de espesores superiores a algunas decenas de Å [2, 26] se han sugerido varios algoritmos [28, 29]. En nuestro procedimiento lo que hemos hecho es tomar una laja de la superred y dividirla en subregiones en las cuales la matriz  $M_{fd}(z, z_0)$  satisface sus propiedades generales [11] y entonces es posible desarrollar el cálculo exitosamente. Por ejemplo, vamos a suponer una capa  $A$  cuyo ancho es  $z_2 - z_1$ . Podemos dividir esta dimensión en  $m$  partes, cada una de espesor  $\Delta_z$  en la cual la matriz satisface:

$$M_{fd}(z_2, z_1) = M_{fd}(z_2, z'_{m-1}) \cdots M_{fd}(z'_1, z_1) = [M_{fd}(z_1 + \Delta_z, z_1)]^m, \quad (90)$$

donde  $m = (z_2 - z_1)/\Delta_z$ . Lo que sigue es el procedimiento habitual de empalme de las correspondientes matrices, y entonces para una celda simple obtenemos

$$M_{fd}(z_3, z_L) = M_3(z_3, z_2)C_2M_2(z_2, z_1)C_1M_1(z_1, z_L), \quad (91)$$

mientras que para una heteroestructura periódica de  $n$ -celdas tenemos

$$M_{fd}(z_R, z_L) = \{M_{fd}(z_3, z_L)\}^n. \quad (92)$$

Las matrices  $M_{1,2,3}$  corresponden a la *Capa L/Capa A/Capa R*, respectivamente [vea las Fig.1 y la Fig.2]. Observe que para  $n = 1$ , las capas *R* y *B* coinciden. Las matrices  $C_{1,2}$ , son las matrices de continuidad en los puntos donde el potencial y los parámetros de banda saltan de un conjunto de valores en una capa, a otro en la capa yuxtapuesta. Se ha verificado este procedimiento en una superred de  $(GaAs/AlAs)^n$  con  $n = 11$  (esto equivale a un espesor de 660 Å) y se observa que, para un rango amplio de la energía y  $\kappa_r$ , se satisfacen las exigencias de simetría siguientes

$$\begin{aligned} \text{Re}\{\det\{M_{fd}(z_3, z_L)\}^n\} &= 1, \\ \text{Im}\{\det\{M_{fd}(z_3, z_L)\}^n\} &= 0, \end{aligned} \quad (93)$$

$$\begin{aligned} \text{Re}\{M_{sv}(z_R, z_L)^\dagger \Sigma_z M_{sv}(z_R, z_L) - \Sigma_z\} &= O_8, \\ \text{Im}\{M_{sv}(z_R, z_L)^\dagger \Sigma_z M_{sv}(z_R, z_L) - \Sigma_z\} &= O_8, \end{aligned} \quad (94)$$

correspondientes a la unitariedad del determinante y la conservación del flujo, respectivamente. En estas expresiones  $O_8$  es la matriz nula ( $8 \times 8$ ). Para una base ortonormal de soluciones linealmente independientes, conformada con los autovectores del hamiltoniano,  $\Sigma_z$  es la matriz ampliada  $\sigma_z$  ( $8 \times 8$ ) de Pauli. La forma específica en otra base se encuentra en el apéndice (11). Puede ser conveniente, para evitar la dispersión de los errores por truncamiento en la simulación numérica y para optimizar el trabajo computacional, que se realice la diagonalización

$$M_{fd}(z_R, z_L) = \{M_{fd}(z_3, z_L)\}^n = T^{-1}J_{or}^n T,$$

aunque esto no siempre es aconsejable, ya que se pueden deteriorar las potencialidades del formalismo de la TM [11, 29]. La matriz diagonal  $J_{or}$  es la matriz de Jordan de  $M_{fd}(z_R, z_L)$ .

Reconstrucción del espacio ( $4 \times 4$ ) del modelo KL

Para lograr la matriz  $M_{fd}(z, z_0)$  en cada capa, esto es,  $M_{1,2,3,\dots,n}$  y las correspondientes matrices de continuidad  $C_{1,2,\dots,n-1}$  -las cuales ejecutan el empalme en los puntos donde el potencial y los parámetros de banda saltan de un conjunto de valores en una capa, a otro en la capa yuxtapuesta-, lo primero que hacemos es buscar, dentro del modelo KL ( $4 \times 4$ ), las correspondientes matrices de los subespacios ( $2 \times 2$ ) *up* (*u*) y *low* (*l*). Es conveniente construir la TM de primer tipo del subespacio *up* y generar la del otro, aplicando la relación

$$M_{u,l}(z, z_0) = \Gamma_x M_{l,u}^*(z, z_0) \Gamma_x, \quad (95)$$

donde  $\Gamma_x = I_2 \otimes \sigma_x$ . Para obtener la FTM en el espacio original del modelo KL ( $4 \times 4$ ) a esto, se realiza la siguiente transformación:

$$M_{fd}(z, z_0) = \mathcal{U}^\dagger Z \begin{bmatrix} M_u(z, z_0) & O_4 \\ O_4 & M_l(z, z_0) \end{bmatrix} Z \mathcal{U}. \quad (96)$$

La transformación ortogonal  $Z$  proporciona el orden apropiado en los vectores ( $8 \times 1$ ), formados por las funciones de onda  $F_{u,l}(z)$  y sus derivadas y tiene la forma

$$Z = \begin{bmatrix} I_2 & O_2 & O_2 & O_2 \\ O_2 & O_2 & I_2 & O_2 \\ O_2 & I_2 & O_2 & O_2 \\ O_2 & O_2 & O_2 & I_2 \end{bmatrix}.$$

Aquí se ha usado  $\mathcal{U}$ , para representar una generalización de transformación unitaria  $U_b$  de Broido y Sham [5] y se escribe como:

$$\mathcal{U} = \begin{bmatrix} U_b & O_4 \\ O_4 & U_b \end{bmatrix}.$$

## 11 La Matriz de Continuidad

Las matrices de continuidad en los sub-espacios están dadas por

$$C_{u,l}(z) = \begin{bmatrix} I_2 & O_2 \\ -\frac{i}{2} (A_+^{u,l})^{-1} [B_+^{u,l} - B_-^{u,l}] & (A_+^{u,l}) (A_-^{u,l}) \end{bmatrix}. \quad (97)$$

Los signos  $+/-$  significan que los parámetros de banda se evalúan a *derecha/izquierda* del punto de empalme. Aquí  $A^{u,l}$  y  $B^{u,l}$  son las matrices que aparecen como coeficientes en la ecuación de movimiento perteneciente a la dimensión reducida ( $2 \times 2$ ) del espacio de KL, para una capa homogénea. Para obtener la Matriz de Continuidad correspondiente al espacio ( $4 \times 4$ ) del modelo KL, realizamos la transformación unitaria inversa a la de Broido y Sham

$$C(z) = \mathcal{U}^\dagger Z \begin{bmatrix} C_u(z) & O_4 \\ O_4 & C_l(z) \end{bmatrix} Z \mathcal{U}. \quad (98)$$

En el modelo KL y probablemente en otros de similar tipo, es usual trabajar en espacios reducidos para estudiar determinadas propiedades espectrales y de transporte que no varían con la reducción del espacio original. En nuestro caso, para estudiar el espectro y los fenómenos de transporte de huecos con campo eléctrico aplicado, partimos de los espacios reducidos y pasamos después al espacio mayor. Aunque no

lo mostraremos aquí en aras de la brevedad, hemos demostrado que la forma de la Matriz de Continuidad  $C(z)$  ( $4 \times 4$ ) es invariante ante el orden en que se realicen las operaciones de empalme y reconstrucción del espacio original de soluciones.

En el estudio de la transmisión de huecos sin campo eléctrico, resulta útil expresar la Matriz de Continuidad en términos de las matrices del QEP asociado a la ecuación (1), de modo que:

$$C(z) = \begin{pmatrix} -I_4 & O_4 \\ \frac{1}{2}(C)_+ & (M)_+ \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} I_4 & O_4 \\ \frac{1}{2}(C)_- & (M)_- \end{pmatrix}, \quad (99)$$

donde

$$M = \begin{pmatrix} B_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & B_2 \end{pmatrix} \quad \text{y} \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \tilde{H}_{13} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\tilde{H}_{13} \\ \tilde{H}_{13}^* & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\tilde{H}_{13}^* & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

siendo  $\tilde{H}_{13}$  básicamente el mismo  $H_{13}$  que hemos definido en el apéndice 7, pero eliminando  $\hat{k}_z$  ya que el autovalor  $q_j$  del QEP aparece directamente en (46) y (62). En aras de la completitud agregamos

$$K = \begin{pmatrix} A_1 \kappa_r^2 + V(z) - E & H_{12} & 0 & 0 \\ H_{12}^* & A_2 \kappa_r^2 + V(z) - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_2 \kappa_r^2 + V(z) - E & H_{12} \\ 0 & 0 & H_{12}^* & A_1 \kappa_r^2 + V(z) - E \end{pmatrix}.$$

Estas expresiones son válidas para una capa modelada como banda plana.

Matrices auxiliares

## Formalismos Matriciales

Considerando la situación en que la región de interés es una sola y por lo tanto no añadimos ningún símbolo a las magnitudes para señalar el dominio a que se refieren [11]. Definimos

$$\Omega(z) = \left\| \begin{pmatrix} F(z) \\ P(z) \cdot F(z) + B(z) \cdot F'(z) \end{pmatrix} \right\|, \quad (100)$$

$$\Omega_j(z) = \left\| \begin{pmatrix} F_j(z) \\ P(z) \cdot F_j(z) + B(z) \cdot F_j'(z) \end{pmatrix} \right\|, \quad (101)$$

$$Q(z) = \left\| \Omega_1(z) \Omega_2(z) \cdots \Omega_{2N}(z) \right\|, \quad (102)$$

$$R(z) = \left\| \begin{pmatrix} I_N & O_N \\ P(z) & B(z) \end{pmatrix} \right\|. \quad (103)$$

Entonces se cumplen las siguientes relaciones

$$\Omega(z) = R(z) \cdot \Psi(z), \quad (104)$$

$$\Omega_j(z) = R(z) \cdot \Psi_j(z), \quad (105)$$

$$Q(z) = R(z) \cdot N(z). \quad (106)$$

Supongamos que toda la información de la región intermedia M [vea la Fig.3] está dada y contenida TM  $T(z, z_0)$  (o en la  $M_{fd}(z, z_0)$ ) que está definida y es conocida al menos  $\forall z, z_0 \in M$ . Entonces

$$\Omega(z) = \begin{cases} Q(L:z) \cdot a(L) & z \leq z_L \\ T(z, z_L) \cdot \Omega(z_L) & z_L \leq z \leq z_R \\ Q(R:z) \cdot a(R) & z \geq z_R \end{cases} \quad (107)$$

Estamos suponiendo también, que  $\Omega$  es continua en  $z_L$  y  $z_R$ .

## 12 Matrices para definir la Ley de Conservación de la Carga

La matriz ( $8 \times 8$ )  $X$ :

$$X = -iQ^\dagger \Sigma_y Q = \begin{bmatrix} X_{11} & X_{11} \\ X_{21} & X_{22} \end{bmatrix}, \quad (108)$$

donde

$$\Sigma_y = \begin{bmatrix} O_4 & -iI_4 \\ iI_4 & O_4 \end{bmatrix},$$

es la matriz generalizada  $\sigma_y$  de Pauli. La matriz  $Q(z)$  satisface

$$Q(z) = R(z)N(z). \quad (109)$$

La matriz  $N(z)$  se define de forma usual a partir de las soluciones linealmente independientes y sus derivadas [11], mientras que la matriz  $Q(z)$  tiene componentes de segundo orden formados como una combinación lineal de las funciones de onda  $F(z)$  y sus derivadas. En el espacio ( $4 \times 4$ ) de KL, la matriz  $R(z)$  se define como:

$$R(z) = \left| \begin{array}{cc} I_4 & O_4 \\ 2U^\dagger \begin{bmatrix} B^u & O_2 \\ O_2 & B^l \end{bmatrix} U & U^\dagger \begin{bmatrix} A^u & O_2 \\ O_2 & A^l \end{bmatrix} U \end{array} \right|. \quad (110)$$

### 13 Matrices de transformaciones: Simetrías Discretas

Dada la transformación entre las matrices  $M_{fd}(z, z_0)$  y  $M_{sv}(z, z_0)$ , es sencillo ver que el requerimiento de conservación de flujo sobre  $M_{fd}(z, z_0)$  [15] implica, para una base arbitraria, que

$$\Sigma_z = (\mathcal{N}^\dagger)^{-1} J_{fd} \mathcal{N}. \quad (111)$$

Sin embargo, vale destacar que, si se escoge una base de soluciones linealmente independiente que no es ortogonal, tal es el caso usado en ocasiones en el modelo KL, entonces tendremos

$$J_{fd} = \begin{bmatrix} B^\dagger(z) - B(z) & A(z) \\ A(z) & O_4 \end{bmatrix}.$$

Para los requerimientos de invarianza ante la reversión temporal e inversión espacial sobre la TM  $M_{sv}(z, z_0)$  [15], se han usado las matrices  $\Sigma_x$  y  $S_{sv}$ , respectivamente, las cuales se escriben así

$$\Sigma_x = \mathcal{N}^{-1} \Sigma^{-1} \mathcal{N}^* \quad (112)$$

$$S_{sv} = \mathcal{N} S \mathcal{N}^{-1}. \quad (113)$$

### 14 Matriz de transformación: Ecuaciones Diferenciales

Para el sub-espacio  $up$  del modelo KL ( $2 \times 2$ ), se obtiene (en unidades atómicas) que:

$$\mathcal{P}_\psi(\xi) = A_D^{-1} \mathcal{P}_\psi(z) A_D = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ w_{31}(\xi) & w_{32} & 0 & w_{34} \\ w_{41} & w_{42}(\xi) & w_{43} & 0 \end{bmatrix},$$

con

$$A_D = \begin{bmatrix} a_o^{-1/2} I_2 & 0_2 \\ 0_2 & a_o^{-3/2} I_2 \end{bmatrix}.$$

Hemos definido

$$w_{31}(\xi) = \frac{(\gamma_1 + \gamma_2)q_T^2 + \mathcal{V}_E(\xi)}{2\gamma_2 - \gamma_1}, \quad w_{32} = -\frac{t_{xy}}{2\gamma_2 - \gamma_1}, \quad w_{34} = -\frac{\sqrt{3}\gamma_3 q_T}{2\gamma_2 - \gamma_1},$$

$$w_{41} = -\frac{t_{xy}}{2\gamma_2 + \gamma_1}, \quad w_{42}(\xi) = -\frac{(\gamma_1 - \gamma_2)q_T^2 + \mathcal{V}_E(\xi)}{2\gamma_2 + \gamma_1}, \quad w_{43} = \frac{\sqrt{3}\gamma_3 q_T}{2\gamma_2 + \gamma_1};$$

y se ha tomado el potencial adimensional como  $\mathcal{V}_E(\xi) = \frac{V(\xi)}{R_Y} - \frac{E}{R_Y}$ .

## Referencias

1. H. Schneider, H. T. Granh, K. v. Klitzing and K. Ploog, *Phys. Rev. B* (b) **40**, 10040 (1985).
2. R. Wessel and M. Altarelli, *Phys. Rev. B* **74**, 045308 (2006).
3. M. U. Erdoğan, K. W. Kim, M. A. Stroschio, *App. Phys. Lett.* **62**, 1423 (1993).
4. D. A. Broido and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **58**, 167 (1985).
5. D. A. Broido and L. J. Sham, *Phys. Rev. B* **58**, 167 (1985).
6. M. Morifuji and C. Hamaguchi, *Phys. Rev. B* **52**, 14131 (1995).
7. A. D. Sánchez and C. R. Proetto, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 2059 (1995).
8. L. Diago-Cisneros, P. Pereyra, R. Pérez-Álvarez, and H. Rodríguez-Coppola, *Phys. Stat. Sol.* (b) **232**, 125 (2002).
9. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez and P. Pereyra, *Phys. Rev. B* **39**, 12802 (1989).
10. G. Klimeck, R. C. Bowen, and T. B. Boykin, *Supperlatt. Mic.* **29**, 188 (2001).
11. Rolando Pérez-Álvarez and Federico García-Moliner, "Transfer Matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures" (Universitat Jaume I, Castellón de la Plana, España, 2004).
12. F. García-Moliner and V. R. Velasco, *Theory of Single and Multiple Interfaces* (World Scientific, Singapore, 1992).
13. A. M. Malik, M. J. Godfrey, and P. Dawson, *Phys. Rev. B* **59**, 2861 (1999).
14. R. Pérez-Álvarez, C. Trallero-Herrero, and F. García-Moliner, *Eur. J. Phys.* **22**, 275 (2001).
15. L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez and P. Pereyra, *Phys. Scr.* (b) **71**, 582 (2005).
16. R. E. Borland, and , *Proc. Roy. Soc. (London)*. (b) **84**, 926 (1961).
17. P. A. Mello, P. Pereyra and N. Kumar, *Ann. Phys.*. (b) **181**, 290 (1988).
18. P. Pereyra, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31**, 4521 (1998).
19. D. S. MacKey, N. MacKey, and F. Tisseur, *Structured Tools for Structured Matrices*, Numerical Analysis Report No. 419 (Manchester Centre for Computational Mathematics, England, 2003).
20. F. Tisseur and K. Meerbergen, *SIAM Review* **43**, 235 (2001).
21. A. Mendoza-Álvarez, J. J. Flores-Godoy, G. Fernández-Anaya and L. Diago-Cisneros, *Phys. Scr.* **84**, 055702 (2011).
22. E. Nieva-Pérez, E. A. Mendoza-Álvarez, L. Diago-Cisneros, C. A. Duque, J. J. Flores-Godoy and G. Fernández-Anaya, *Phys. Scr.* **94**, 035205 (2019).
23. A. S. Davydov, *Quantum Mechanics* (Instituto del Libro, La Habana, 1965).
24. R. Landauer and Th. Martin, *textitRev. Mod. Phys.* **66**, 217 (1994).
25. P. Pereyra, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 1772 (2000).
26. C. Y. Chao and S. L. Chuang, *Phys. Rev. B* **43**, 7027 (1991).
27. Sara Zapata Marín, J. A. Reyes-Retana, G. Fernández-Anaya, A. Mendoza-Álvarez, J. J. Flores-Godoy and L. Diago-Cisneros, *J. App. Phys.* **122**, 184301 (2017).
28. S. I. Rokhlin and L. Wang, *J. Acoustic. Soc. Am* **12**, 822 (2002).
29. R. Pérez-Álvarez, R. Pernas-Salomón and V. R. Velasco, *SIAM J. Appl. Math.* **75**, 1403 (2015).





# Index

- aproximación de la función envolvente, 140
- aproximación de masa efectiva, 142
- asymptotic homogenization method, 100
- auxiliary differential equation, 39
  
- banda de conducción, 123
- banda de valencia, 123
- Bell basis, 4
- Bell states, 9
- Bloch theorem, 41
- boundary conditions, 102
- Bragg diffraction, 36
- Brillouin zone, 41
  
- coeficiente de absorción, 127
- composite material, 100
- computación cuántica, 73
- condición de unitariedad, 150
- corrientes de espín, 73
  
- deformation vector, 107
- delta type pulse, 44
- dielectric function, 46
- discretization, 38, 100
- dispersion curve, 99
- dispersion relation, 39
- displacement vector, 102
  
- efecto de campo de espín, 70
- efecto Rashba, 70
- efecto túnel, 72
- elastic tensor, 102
- elementary cell, 39
- entanglement, 26
- espintrónica, 70
- evolution loops, 2
- evolution operator, 5
  
- exchange operations, 2
- external traction, 107
  
- finite difference method, 38
- finite element method, 100
- flexural oscillation mode, 104
- flujo multi-componente, 141
- flujo uni-componente, 141
- Fourier transform, 39
- funciones de Bessel, 125
  
- gates, 20
- group theory, 101
  
- Heisenberg-Ising model, 2
- heteroestructura semiconductor, 70
- hilo cuántico, 122
- hilos cuánticos, 70
- huecos ligeros, 142
- huecos pesados, 142
  
- interacción espín-órbita, 70
  
- longitudinal oscillation mode, 104
  
- masa efectiva, 70, 124
- materiales semiconductores, 122
- matriz de dispersión, 142
- matriz de transferencia, 142
- matriz híbrida, 125
- model, 3
- modelo de Kohn-Luttinger, 140
- modulated Gaussian excitation, 45
  
- operations, 1, 11
- optical phonon, 38, 47
  
- Pauli matrices, 25

- periodic boundary conditions, 39
- phonon frequency, 46
- photonic crystal, 36
- photonic gap, 36
- Poisson's ratio, 101
- polaritonic material, 38
- pozo cuántico, 122
- projection operator, 104
- proximación dispersiva multicomponente, 142
- punto cuántico, 122
  
- quantum computation, 2
- quantum computer, 2
- quantum control, 2
- quantum cryptography, 2
- quantum dot, 2
- quantum entanglement, 1
- quantum gate, 21
- quantum teleportation, 11
- qubit, 2
  
- Rabi frequency, 18
  
- Schmidt coefficients, 9
- sistema matricial diferencial, 142
- sistemas cuasi-bi-dimensionales, 140
- sistemas nanométricos, 73
- space, 8
- stress tensor, 102
  
- torsional oscillation mode, 104
- traction vector, 106
- transporte bidimensional, 70
- transporte cuántico, 140
- transverse electric modes, 41
- transverse magnetic modes, 41
  
- ultrasonic waveguide, 99
- uniaxial crystal, 47
  
- Young modulus, 101