

Estudio teórico del gas de electrones cuasi-bidimensional con interacción spin-órbita

Juan Ignacio Aranzadi

Tesis de Licenciatura en Ciencias Físicas

Director: Pablo Ignacio Tamborenea



Facultad de Ciencias Exactas y Naturales

Universidad de Buenos Aires

Septiembre 2023

TEMA: Estudio teórico del gas de electrones cuasi-bidimensional con interacción spin-órbita

ALUMNO: Juan Ignacio Aranzadi LU N° 503/18

LUGAR DE TRABAJO: Departamento de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Buenos Aires

DIRECTOR DEL TRABAJO: Dr. Pablo Ignacio Tamborenea

FECHA DE INICIACIÓN: Septiembre 2022

FECHA DE FINALIZACIÓN: Septiembre 2023

FECHA DE EXAMEN:

INFORME FINAL APROBADO POR:

Autor:

Jurado:

Director:

Jurado:

Profesor de Tesis de Licenciatura:

Jurado:

A mi abuelo Enrique

Resumen

El gas bidimensional de electrones (2DEG) con interacción spin-órbita (ISO) de Rashba, que se produce de forma altamente controlable en algunas heteroestructuras, es de interés teórico debido a su capacidad para explorar regímenes en los cuales los electrones tienen una gran movilidad, así como de interés práctico en el área de la spintrónica. En la presente tesis, investigamos las correlaciones y propiedades del 2DEG con ISO de Rashba. Para esto, calculamos la corrección a primer orden en la energía debido a la ISO de Rashba y obtuvimos el propagador libre del sistema. También calculamos la matriz de densidad de dos electrones y a partir de esta derivamos la función de correlación de pares, una medida clásica de la física de muchos cuerpos que describe la probabilidad de encontrar un electrón en una posición y spin determinados, dado que hay otro con diferente posición y spin, ya sea igual o opuesto.

Para dos electrones con la misma proyección de spin, observamos la correlación conocida como el hueco de intercambio, que también aparece en el 2DEG sin ISO de Rashba, aunque con ISO esta correlación se ve atenuada. Más sorprendente es el caso de los electrones con spin opuestos, donde encontramos una correlación no trivial que no se observa en el 2DEG sin ISO de Rashba. Estos resultados podrían ser medidos experimentalmente mediante el factor de estructura estático resuelto en spin.

Adicionalmente, utilizando herramientas de información cuántica, analizamos el entrelazamiento y el quantum discord de dos electrones en el sistema con y sin ISO de Rashba. Calculamos el entrelazamiento del sistema y encontramos una distancia dentro de la cual los electrones están entrelazados en spin. Además, cuantificamos el grado de entrelazamiento en función de la separación de los electrones utilizando la concurrencia y el entrelazamiento de formación. Finalmente, calculamos el quantum discord, que permite medir correlaciones

cuánticas más allá del paradigma de estado entrelazado versus separable. Encontramos correlaciones cualitativamente similares al caso sin ISO de Rashba, aunque cuantitativamente diferentes.

Índice general

1	Introducción	1
1.1.	Heteroestructuras	1
1.2.	Interacción spin-órbita	4
1.3.	Spintronica	6
1.4.	Correlaciones Clásicas	7
1.5.	Entrelazamiento	10
1.6.	Quantum Discord	13
2	Formulación del 2DEG con ISO en Segunda Cuantización	17
2.1.	Gas de electrones con interacción de Rashba	19
2.1.1.	Hamiltoniano en segunda cuantización	19
2.1.2.	Estado Fundamental	20
2.2.	Interacción de Coulomb	22
2.3.	Cálculo del Corrimiento de Energía a Primer Orden	25
2.4.	Cálculo del Propagador Libre	28
2.4.1.	Régimen de Baja Densidad	29
2.4.2.	Régimen de Alta Densidad	31
3	Correlaciones	33
3.1.	Matriz densidad de dos partículas	35
3.2.	Función de Correlación de Pares	38
3.2.1.	Justificación de la Función de Correlación de Pares	40
3.2.2.	Medición experimental	43

<i>ÍNDICE GENERAL</i>	1
3.3. Medidas de Correlaciones Cuánticas	44
3.3.1. Entrelazamiento	44
3.3.2. Quantum discord	47
4 Conclusiones	53
Agradecimientos	57
Bibliografía	59

Capítulo 1

Introducción

1.1. Heteroestructuras

Las heteroestructuras han emergido como una clase fascinante de materiales compuestos que presentan propiedades únicas y altamente controlables. Estas permitieron el desarrollo de una variedad de dispositivos ópticos y electrónicos de alto rendimiento [1]. Además, son de interés fundamental ya que permiten observar efectos cuánticos que requieren una gran movilidad de los portadores de carga, como es el efecto Hall cuántico [2].

Estas estructuras se componen de capas individuales de diferentes materiales, en general semiconductores, que se construyen de manera ordenada formando interfaces precisas entre ellos. La región activa de las heteroestructuras usualmente se encuentra en la interfaz o cerca. Una buena unión entre las capas de los distintos compuestos es esencial para reducir el scattering de los portadores de carga con los defectos de la red. Para generar una buena unión entre las capas es necesario que los compuestos tengan la misma estructura cristalina. Además, las constantes de red deben ser similares para evitar la tensión en la estructura final.

Para alcanzar esta precisión en la interfaz de las heteroestructuras, se utilizan técnicas sofisticadas que permiten crecer la estructura capa por capa, pudiendo alternar la composición de cada una. Una de las técnicas más usadas es molecular beam epitaxy (MBE) [3]. El principio básico de funcionamiento es la sublimación de los materiales deseados en una cámara de vacío ($\sim 10^{-10}$ mbar) donde los átomos del material en estado gaseoso viajan

libremente hacia el substrato donde se hace crecer la estructura deseada capa por capa.

Una propiedad interesante de las heteroestructuras es la posibilidad de realizar experimentalmente un gas bidimensional de electrones (2DEG), es decir confinar los electrones de forma que su dinámica se limite a un plano. Vamos a ver como se da este 2DEG en el caso mas sencillo de una heterojuntura entre dos semiconductores.

Consideremos la heteroestructura $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$, en la cual el primer componente corresponde a una aleación de arseniuro de galio y arseniuro de aluminio, denominada $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, que se encuentra dopada con cargas negativas. Aquí, $x \in [0, 1]$ representa la fracción de arseniuro de aluminio en la aleación. El segundo componente de la heteroestructura es arseniuro de galio no dopado, conocido como GaAs.

Es relevante destacar que $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ comparte la misma estructura cristalina tipo zinc blende con GaAs y posee una constante de red muy similar. Sin embargo, $n\text{-Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ tiene un gap de energía mayor entre la banda de conducción y valencia que el GaAs.

Las bandas lejos de la juntura se observan en la Figura 1.1(a), donde se esquematiza el mínimo de las bandas de conducción para ambos materiales. Como el AlGaAs tiene un gap mas grande que el GaAs se produce una discontinuidad entre las bandas de conducción de los materiales, con una diferencia de energía ΔE_c . La energía de Fermi del $n\text{-AlGaAs}$ E_F^A se encuentra cerca de la banda de conducción por el dopaje tipo n, y es mayor que la del GaAs, este desequilibrio provoca un transporte de electrones hacia el GaAs. Cuando los electrones se mueven al GaAs pierden energía debido a la discontinuidad en las bandas de conducción ΔE_c . Este movimiento separa los electrones de sus donores con carga positiva generando un potencial electrostático atractivo. Los electrones que pasaron al GaAs tienen la energía cinética dada por su banda de conducción mas la energía producida por el potencial electrostático $(-e\phi(z))$ de las cargas positivas en el AlGaAs. Este potencial produce que se curven las bandas y que los electrones quieran regresar hacia el AlGaAs. Sin embargo, debido a la discontinuidad entre las bandas estos quedan confinados en la juntura, en un potencial que se puede aproximar como un pozo triangular. Esta situación de equilibrio se muestra en la Figura 1.1(b). Finalmente dentro del pozo triangular se produce el 2DEG, ya que en la dirección del crecimiento de la heteroestructura los niveles de energía se discretizan y usualmente se ocupa el estado de menor energía. Sin embargo en el plano perpendicular

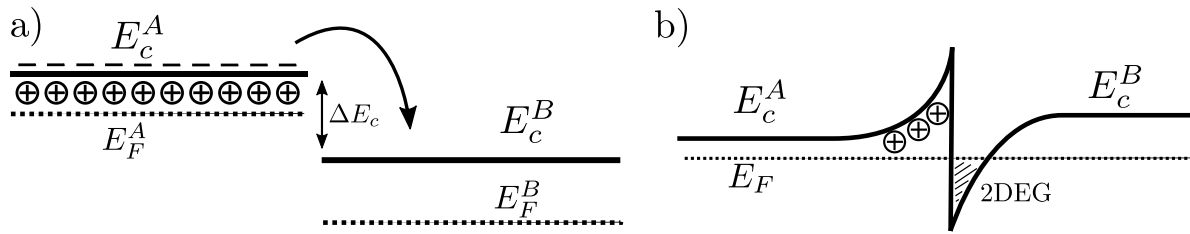


Figura 1.1: a) Representación de las bandas de conducción n-AlGaAs/GaAs, n-AlGaAs del lado izquierdo del diagrama GaAs del lado derecho. La diferencia en el nivel de Fermi en los materiales produce un transporte de electrones desde el n-AlGaAs hacia el GaAs. Se observa una discontinuidad (ΔE_c) entre los niveles de la banda de conducción. Las bandas se alinean colocando la energía de un electrón libre a igual valor para ambos materiales. b) Estado de equilibrio en la banda de conducción de la heterojuntura de n-AlGaAs/GaAs, los electrones en el GaAs sienten un potencial atractivo, por las cargas positivas que quedaron en el n-AlGaAs, que curva la banda de conducción. Los electrones que se movieron hacia el GaAs no tienen la energía suficiente para volver a el n-AlGaAs y quedan confinados en el pozo triangular formando un gas de electrones bidimensional (2DEG).

los electrones se mueven libremente. Se puede mostrar fácilmente, a partir de la ecuación de Schrodinger, que para un potencial que solo depende de la dirección de crecimiento de la heteroestructura (\hat{z}) se obtienen las siguientes autofunciones y autoenergías

$$\Phi_{k_x k_y n}(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_y y)} u_n(z) \quad (1.1)$$

$$E_n(k_x, k_y) = \epsilon_n + \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}. \quad (1.2)$$

Para un valor fijo de n esto es esencialmente un gas de electrones bidimensional con la energía desplazada en ϵ_n .

Otra heteroestructura en la que se realiza el 2DEG es el quantum well [4]. Se puede construir utilizando dos heterojunturas. Por ejemplo un arreglo utilizado experimentalmente es n-AlGaAs/GaAs/n-AlGaAs, este se observa en la Figura 1.2. Aquí el potencial que confina a los electrones se puede aproximar con un pozo finito, que a diferencia del caso anterior es simétrico en la dirección de crecimiento de la heteroestructura.

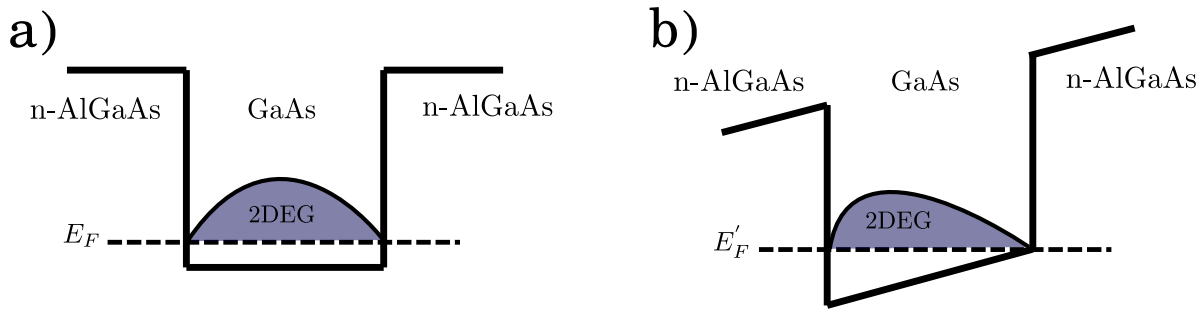


Figura 1.2: a) Representación simplificada de un quantum well formado por dos heterojunturas del tipo n-AlGaAs/GaAs/n-AlGaAs. Este se modela efectivamente como un pozo finito donde en el centro se forma un gas bidimensional de electrones (2DEG). b) Quantum well del mismo tipo pero con un campo eléctrico externo. Notar que el campo eléctrico rompe la simetría de inversión; en consecuencia, el 2DEG que se forma sentirá una interacción spin-órbita.

1.2. Interacción spin-órbita

La interacción spin-órbita (ISO) es una interacción relativista que emerge entre el spin de una partícula y su momento. Esta interacción surge cuando una partícula con spin se desplaza dentro de un potencial. En nuestro caso de interés, consideramos un electrón en movimiento inmerso en un campo eléctrico. En esta situación, la partícula experimenta un campo magnético efectivo en su propio marco de referencia, aun en ausencia de un campo magnético externo. Este campo magnético efectivo, proporcional a su momento y al campo eléctrico externo, se acopla al momento magnético asociado a su spin.

La interacción spin-órbita desempeña un papel crucial en Física Atómica. En los átomos, los electrones perciben el campo eléctrico generado por el núcleo como un campo magnético que interactúa con el momento magnético del electrón. Esto conlleva a cambios en la energía del electrón. Este efecto, junto con otras correcciones relativistas, contribuye a la formación de la estructura fina, una característica de gran importancia en el análisis de las líneas espectrales.

La ISO también juega un papel fundamental en la Física de los Sólidos. Esto se observa en cristales donde existe una ruptura de simetría de inversión, ya sea debido a efectos internos en la red cristalina, a la estructura del material o a la aplicación de un campo eléctrico externo. En tales situaciones, los electrones, que están débilmente enlazados a los átomos del material, perciben un campo magnético efectivo proporcional al campo eléctrico del cristal

y a su momento cristalino $\hbar\mathbf{k}$.

En los cristales, se presentan dos contribuciones a la ISO: la contribución de Dresselhaus [5], que surge debido a una falta de simetría de inversión cristalográfica en el volumen del material; y la contribución de Rashba [6], que ocurre en sistemas con asimetría de inversión estructural.

La ISO de Dresselhaus ocurre en el volumen de cristales no centro simétricos. Fue derivado originalmente para una red del tipo zinc blende, su Hamiltoniano es

$$H_D^{(3D)} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)], \quad (1.3)$$

donde γ es una constante que depende del material. Cuando consideramos un sistema 2D, el Hamiltoniano de Dresselhaus se reduce a

$$H_D^{(2D)} = \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y), \quad (1.4)$$

donde $\beta = \gamma\langle k_z^2 \rangle$.

Por otro lado, la ISO de Rashba es una interacción lineal en el momento presente en cristales con asimetría en la inversión estructural como ocurre en algunas interfaces de heteroestructuras. En el caso de una heterojuntura como la Figura 1.1, el 2DEG que se produce en la interfase siente una ISO de Rashba. En cambio, en un quantum well el 2DEG que se forma posee simetría de inversión, lo que implica que se requiere aplicar un campo eléctrico externo para inducir la ISO (ver Figura 1.2b). Dado que la intensidad de la interacción spin-órbita está directamente relacionada con el campo eléctrico, variar este campo permite controlar el acoplamiento. Esta característica hace que los quantum wells sean sistemas altamente útiles para investigar los efectos de la ISO. Ambas interacciones producen una separación de las bandas de energía, rompiendo la degeneración de spin. El Hamiltoniano de Rashba está dado

$$H_R = \alpha(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x), \quad (1.5)$$

donde α es una constante que dependen del material, la forma del pozo que confina el 2DEG y el campo eléctrico en el cristal. Finalmente el Hamiltoniano de spin-orbita completo para

un sistema bidimensional es

$$H_{ISO} = H_R + H_D = \alpha(\sigma_x k_y + \sigma_y k_x) + \beta(\sigma_x k_x - \sigma_y k_y). \quad (1.6)$$

Vale la pena aclarar que no en todos los sistemas las distintas interacciones son igual de relevantes.

1.3. Spintronica

La spintrónica [7], es un campo multidisciplinario que se enfoca en la manipulación y control del grado de libertad de spin para su aplicación en el procesamiento de información. El propósito fundamental de la spintrónica es comprender la evolución del spin de las electrones en sólidos con el fin de desarrollar dispositivos de utilidad. Las interacciones de Rashba y Dresselhaus ocupan un rol central en esta área ya que permite controlar el spin de los electrones mediante campos eléctricos.

Para ejemplificar los mecanismos empleados en la spintrónica, tomaremos como caso de estudio un dispositivo innovador en este campo, conocido como el transistor Datta-Das [8]. Este dispositivo aprovecha las propiedades de las heteroestructuras y la ISO para manipular el spin de los electrones en lugar de su carga eléctrica. En la Figura 1.3 se muestra un esquema de este transistor. El dispositivo consta de una fuente y un sumidero, ambos ferromagnéticos. Cuando se aplica un voltaje entre ellos, se genera una corriente de electrones con su spin alineado en la dirección de propagación \hat{x} . Cuando el potencial en la compuerta es cero, no hay campo eléctrico perpendicular al 2DEG, por lo tanto, no hay ISO y los electrones viajan con su spin inalterado hasta llegar al sumidero, completando así el circuito. En este estado, el transistor se encuentra en su modo activo.

Cuando se aplica un campo eléctrico en la compuerta, perpendicular a la interfaz, el 2DEG experimenta una ISO de Rashba. Como hemos visto, la intensidad de esta ISO está ponderada por el factor $\alpha(E)$, que depende del campo eléctrico aplicado en la compuerta. El efecto de la ISO de Rashba es hacer preceder el spin, por lo tanto ajustando el valor del campo eléctrico aplicado es posible lograr que los spins lleguen con su spin invertido. Estos electrones no pasan a través del sumidero porque su orientación es antiparalela a la

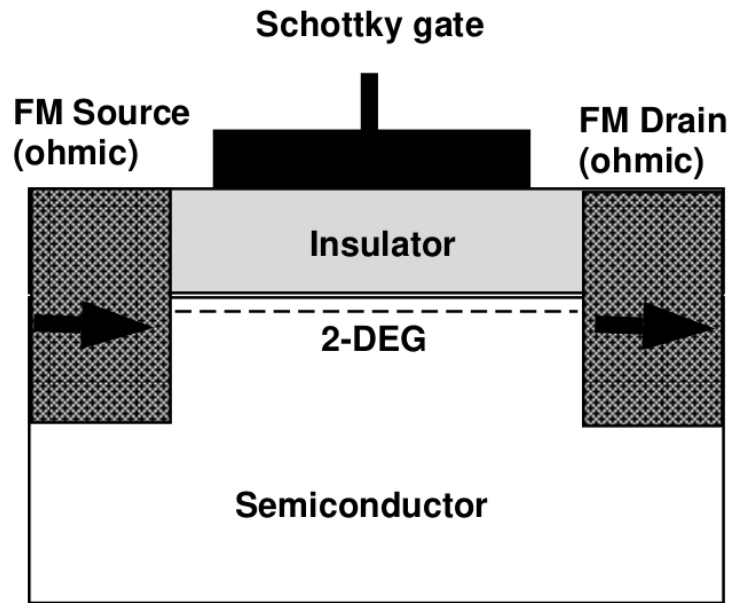


Figura 1.3: Representación esquemática del transistor Datta-Das. Las flechas indican la dirección de magnetización de la fuente y el sumidero. Figura extraída de [9].

magnetización de este. En este estado, el transistor se encuentra en modo corte. Para campos eléctricos intermedios en la compuerta, se obtiene un flujo parcial de corriente y el transistor se encuentra en modo de amplificación.

La spintrónica ha demostrado aplicaciones prometedoras en campos como la computación cuántica, la memoria de estado sólido y los sensores. Aunque son necesarios avances en la comprensión fundamental de los fenómenos de transporte de spin y en la fabricación de materiales para continuar impulsando su desarrollo y adopción a gran escala.

1.4. Correlaciones Clásicas

La correlación es un concepto de teoría de la información que cuantifica la relación entre dos variables aleatorias X e Y , cuyos posibles resultados son $\{x_i\}$ y $\{y_j\}$. Se puede definir una distribución de probabilidad para los resultados del sistema conjunto $p(x, y)$ y para cada parte del sistema por separado $p(x) = \sum_j p(x, y_j)$, $p(y) = \sum_i p(x_i, y)$. Una herramienta fundamental en teoría de la información, que nos ayuda a estudiar las correlaciones, es la entropía de Shannon, definida como

$$S(X) = S(p(x)) = - \sum_i p(x_i) \log p(x_i), \quad (1.7)$$

esta mide la incerteza sobre una variable aleatoria X con posibles resultados $\{x_i\}$ y una distribución de probabilidad para estos $p(x)$. Para ver las correlaciones entre dos variables, se define la información mutua como

$$I(X, Y) = S(X) + S(Y) - S(X, Y), \quad (1.8)$$

donde la entropía del sistema conjunto $S(X, Y)$ se define como

$$S(X, Y) = - \sum_{i,j} p(x_i, y_j) \log p(x_i, y_j). \quad (1.9)$$

La información mutua [Ec. 1.8] es la suma de las incertezas de las variables por separado, menos la incerteza sobre ambas variables. $I(X, Y)$ es una medida de la correlación entre las variables aleatorias X e Y . Si la distribución de probabilidad conjunta se puede escribir como $p'(x, y) = p(x)p(y)$, entonces es sencillo ver que $I(p'(x, y)) = 0$, es decir no hay información adicional en la distribución conjunta. Otra forma de escribir la información mutua es utilizando la entropía condicional $S_X(Y)$ definida por

$$\begin{aligned} S_X(Y) &= - \sum_{i,j} p(x_i, y_j) \log \frac{p(x_i, y_j)}{p(x_i)} \\ &= \sum_i \left(\underbrace{\sum_j p(x_i, y_j)}_{p(x_i)} \right) \log p(x_i) - \sum_{i,j} p(x_i, y_j) \log p(x_i, y_j) \\ &= -S(X) + S(X, Y), \end{aligned} \quad (1.10)$$

podemos reescribir la información mutua como

$$I(X, Y) = S(X) - S_Y(X) = S(Y) - S_X(Y). \quad (1.11)$$

Esta forma de escribir la información mutua se puede interpretar como la información ganada sobre la variable X (Y) al haber medido Y (X). Ambas definiciones son equivalentes en el caso clásico. Sin embargo, cuando generalizamos estos conceptos a mecánica cuántica, debemos tratar la segunda definición con más cuidado ya que implica realizar una medición sobre

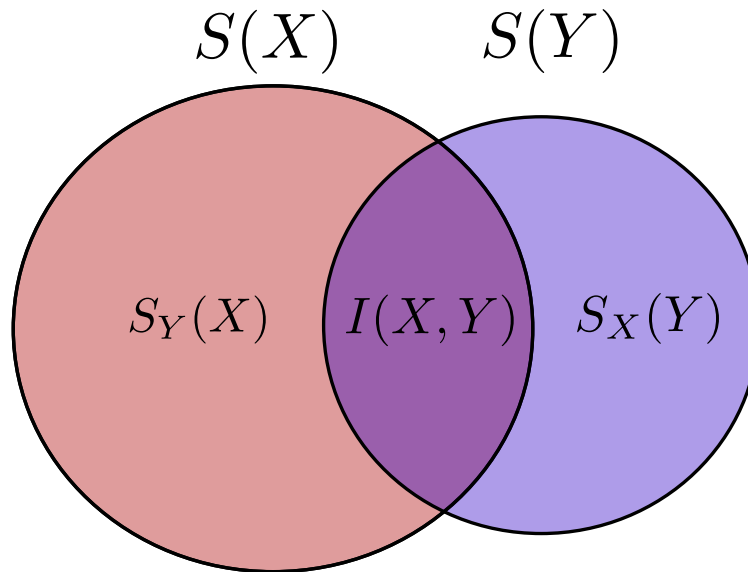


Figura 1.4: Diagrama de Venn para dos variables aleatorias X e Y donde se representa su entropía $S(X)$, $S(Y)$, su entropía condicional $S_Y(X)$, $S_X(Y)$, y su información mutua $I(X, Y)$.

el sistema. Estas definiciones se representan gráficamente mediante un diagrama de Venn (Figura 1.4).

Para ejemplificar estas definiciones, consideremos un sistema de dos bits con la siguiente distribución de probabilidad conjunta:

$$\begin{aligned}
 p(1, 1) &= 0 \\
 p(1, 0) &= \frac{1}{2} \\
 p(0, 1) &= \frac{1}{2} \\
 p(0, 0) &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{1.12}$$

Vale la pena notar que esta distribución tiene completa incerteza sobre el valor de cada una de las variables por separado, $p(x = 0, 1) = p(y = 0, 1) = 1/2$, pero sabemos con probabilidad uno que los bits van a tener valores opuestos. Si calculamos la información mutua del sistema esta es $I(X, Y) = \log 2$, es decir comparten un bit de información. Además, se puede probar que para dos bits clásicos este es el máximo posible de información mutua. Por lo tanto podemos afirmar que los bits se encuentran máximamente correlacionados.

1.5. Entrelazamiento

La teoría de información clásica desarrollada por Shannon tiene su contraparte cuántica donde las correlaciones se dan entre dos partes de un sistema, y las medidas de correlación están definidas utilizando la entropía de von Neumann $S(\rho)$ dada por

$$S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log \rho) = -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i, \quad (1.13)$$

para una operador densidad ρ , donde λ_i son los autovalores de ρ . Al igual que en el caso clásico, esta entropía cuantifica la incerteza que tenemos sobre el sistema. Para un sistema de dos partes, descrito por ρ_{AB} podemos describir la información compartida en el sistema, mediante la información cuántica mutua $I(\rho_{AB})$ definida como

$$I(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (1.14)$$

donde $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB})$ y $\rho_B = \text{Tr}_A(\rho_{AB})$. Haciendo una analogía con el caso clásico, la información mutua cuántica se puede interpretar como la información almacenada en el estado conjunto.

Un concepto que juega un rol clave en la teoría de información cuántica es el entrelazamiento. El estado global de un sistema compuesto esta entrelazado si no se puede escribir como un producto de los subsistemas individuales. Es decir

$$\rho_{AB} \neq \sum_i c_i \rho_A^i \otimes \rho_B^i. \quad (1.15)$$

Para ilustrar los efectos del entrelazamiento en las correlaciones vamos a considerar el estado singlete para dos qubits

$$|\Phi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|10\rangle - |01\rangle), \quad (1.16)$$

con un operador densidad asociado $\rho_{AB} = |\Phi\rangle\langle\Phi|$ y su matriz asociada

$$\rho_{AB} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.17)$$

Donde ρ_{AB} esta escrita en la base $B = \{|00\rangle, |01\rangle, |10\rangle, |11\rangle\}$. La matriz densidad reducida resulta $\rho_A = \rho_B = I/2$. El estado global del sistema tiene máxima información, es decir hay un observable que tiene un solo resultado con probabilidad uno. En este caso el observable es $M_z = \sigma_z \otimes \sigma_z$, ya que $M_z|\Phi\rangle = -1|\Phi\rangle$. En cambio no hay observables que actúen solo sobre una parte del sistema y tengan un resultado con probabilidad uno, aún mas todos los observables sobre las partes por separado tienen máxima incerteza, ya que las matrices reducidas ρ_A y ρ_B son proporcionales a la identidad. Entonces decimos que el estado $|\Phi\rangle$ esta máximamente entrelazado.

Podemos calcular la información mutua cuántica [Eq. (1.14)] para este estado, obtenemos que $S(\rho_{AB}) = 0$ ya que no hay incerteza en el estado global, y $S(\rho_A) = S(\rho_B) = \log(2)$. Entonces la información mutua cuántica resulta $I = 2\log 2$, esto es el doble del máximo clásico para dos bits que vimos en la Sección anterior. Estas correlaciones mas fuertes son un efecto puramente cuántico y son debidas al entrelazamiento del sistema.

Ahora vamos a introducir herramientas para cuantificar el grado de entrelazamiento de un sistema bipartito para estados puros y luego generalizarlo a estados mixtos. Primero, consideremos un estado puro escrito en la descomposición de Schmidt

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_i^d c_i |\alpha_i\rangle_A \otimes |\beta_i\rangle_B, \quad (1.18)$$

donde $|\alpha_i\rangle_A$ y $|\beta_i\rangle_B$ forman una base ortonormal para los sistemas A y B , respectivamente, y los coeficientes c_i son números reales positivos. La existencia de entrelazamiento se verifica simplemente si la suma contiene más de un término. Además, los coeficientes c_i son invariantes bajo transformaciones unitarias en cada una de las partes; por lo tanto, una definición razonable de entrelazamiento debe depender solo de estos coeficientes. Vamos a utilizar la entropía de entrelazamiento $E(\Psi)$ como una medida de entrelazamiento. Esta se define como:

$$E(\Psi) = S(\text{Tr}_A(|\Psi\rangle\langle\Psi|)) = S(\text{Tr}_B(|\Psi\rangle\langle\Psi|)) = - \sum_i^d c_i^2 \log c_i^2 = E, \quad (1.19)$$

donde E es la cantidad de bits de entrelazamiento o *ebits* que tiene el estado $|\Psi\rangle_{AB}$. La entropía de entrelazamiento tiene la ventaja de ser igual a cero si y solo si el estado es separable, y $E(\Psi) = \log d$ si el estado está máximamente entrelazado, donde d es la dimensión

del espacio de Hilbert del subsistema mas pequeño. La idea detrás de esta medida es utilizar el estado singlete $|\Phi\rangle = (|01\rangle - |10\rangle)/\sqrt{2}$ como la unidad básica de entrelazamiento, definiendo su entrelazamiento como un *ebit*. Luego, para medir el entrelazamiento de un estado arbitrario, se lo relaciona con el estado singlete. Una demostración completa de sus propiedades y funcionamiento se encuentra en las referencias [10, 11].

Una posible generalización de esta medida para estados mixtos es el entrelazamiento de formación [11, 12]. Dado un estado descrito por ρ_{AB} , escrito en una descomposición de estados puros de la forma

$$\rho_{AB} = \sum_i p_i |\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|, \quad (1.20)$$

donde $|\Phi_i\rangle$ son estados puros normalizados y p_i son números reales positivos que suman uno, se define el entrelazamiento de formación como

$$E_f(\rho) = \inf_{\Phi} \left\{ \sum_i p_i E(\Phi_i) \right\}, \quad (1.21)$$

donde $E(\Phi_i) = S(\text{Tr}_A |\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|) = S(\text{Tr}_B |\Phi_i\rangle\langle\Phi_i|)$ es la entropía de entrelazamiento de $|\Phi_i\rangle$. El ínfimo en esta definición se toma sobre todas las posibles descomposiciones de ρ en estados puros.

El entrelazamiento de formación cumple las mismas propiedades que las descritas para la entropía de entrelazamiento, es decir cumple $E_f(\rho) = 0$ si solo si el estado no esta entrelazado, y $E_f(\rho) = \log d$ si se encuentra máximamente entrelazado. Calcular el ínfimo sobre todas las posibles descomposiciones en estados puros es complicado para un estado general. Sin embargo existe una forma cerrada para un sistema bipartito de qubits, que se presenta en la Sección 3.3.1.

Como vimos el entrelazamiento juega un papel clave para entender las correlaciones de sistemas cuánticos, y ha sido ampliamente estudiado en el contexto de la información cuántica y computación cuántica [13, 14]. También ha surgido como un fenómeno significativo en la física de sistemas de muchos cuerpos [15], abarcando diversos aspectos como cadenas de spin [16, 17, 18], el efecto Kondo [19, 20], el efecto Hall cuántico fraccionario [21, 22, 23] y los spins de un gas de electrones no interactuantes [24, 25, 26], entre otros.

1.6. Quantum Discord

En general el entrelazamiento no captura todas las correlaciones cuánticas de un sistema. Un estado separable puede igual contener correlaciones cuánticas, que se encuentran descritas por el quantum discord. Esta medida surge de notar que las definiciones de información mutua Eq. (1.8) y Eq. (1.11), equivalentes en el caso clásico, pueden diferir en el caso cuántico.

El problema está en la definición de información mutua Eq. (1.11), que utiliza $S_A(B)$ la incerteza del subsistema B dado que conocemos el estado de A . Esta entropía condicional implica medir sobre una parte del sistema. Cuando queremos generalizar esta cantidad al caso cuántico hay que tener cuidado ya que una medición en general altera el estado del sistema.

Esta definición de información mutua mide la correlación entre A y B , mediante la reducción de entropía que se obtiene en $A(B)$ al medir el subsistema $B(A)$, que es la idea clásica de correlación entre dos sistemas físicos. Esta cantidad en el caso cuántico se define como

$$I_{cl}(\rho_{AB}) = S(\rho_A) - \sum_j p_j S(\rho_A^{(j)}), \quad (1.22)$$

es decir la incerteza sobre el sistema A menos la incerteza que tenemos sobre A dado que realizamos una medición Π_j sobre B obteniendo $\rho_A^{(j)} = \text{Tr}_B(\Pi_j \rho_{AB})/p_j$ con probabilidad $p_j = \text{Tr}(\Pi_j \rho_{AB})$, y sumado sobre todos los elementos. Donde la medición sobre B es del tipo POVM (positive operator-valued measure), cuyos elementos Π_j son operadores hermíticos semidefinidos positivos que cumplen $\sum_j \Pi_j = I$. El máximo de esta cantidad sobre todas las posibles mediciones se define como correlación clásica

$$C(\rho_{AB}) = \max_{\Pi} [I_{cl}(\rho_{AB})]. \quad (1.23)$$

Entonces el quantum discord $Q(\rho_{AB})$ resulta

$$Q(\rho_{AB}) = I(\rho_{AB}) - \max_{\Pi} [I_{cl}(\rho_{AB})]. \quad (1.24)$$

En física clásica medir es revelar una propiedad intrínseca del sistema, por esto ambas definiciones para información mutua coinciden y el quantum discord es cero. Sin embargo

en mecánica cuántica la medición sobre una parte del sistema altera el estado total, lo que provoca que estas cantidades puedan diferir produciendo el quantum discord.

Ahora vamos a presentar los resultados de las correlaciones clásicas, el quantum discord y el entrelazamiento de formación para el estado singlete $|\Phi\rangle = (|10\rangle - |01\rangle)/\sqrt{2}$, con $\rho = |\Phi\rangle\langle\Phi|$. Un calculo detallado de estas cantidades para un estado mas general se encuentra en la Sección 3.3.1 y 3.3.2.

Recordamos que la información mutua cuántica para este estado es $I(\rho) = 2 \log 2$. Las correlaciones clásicas $C(\rho) = \log 2$, el quantum discord $Q(\rho) = I(\rho) - C(\rho) = \log 2$, y la entrelazamiento de formación resulta $E_f(\rho) = \log 2$.

Como el estado singlete se encuentra máximamente entrelazado, obtenemos un máximo de información mutua y como vimos es el doble del máximo posible para dos bits clásicos. Esta información mutua se descompone en un bit de correlaciones clásicas y un bit de correlaciones cuánticas (quantum discord). Además para este estado el quantum discord y el entrelazamiento de formación son iguales, es decir todas las correlaciones cuánticas son debido al entrelazamiento.

Por ultimo vamos a considerar un estado interesante para ver la relación entre entrelazamiento y quantum discord. Este es el estado de Werner [27], dado por

$$\rho = (1 - c)\frac{I}{4} + c|\Phi\rangle\langle\Phi|, \quad (1.25)$$

donde $|\Phi\rangle$ es el estado singlete y $c \in [0, 1]$. Para diferentes valores del parámetro c este estado pasa de tener mínima información y no estar entrelazado a uno máximamente entrelazado. Se puede calcular el entrelazamiento de formación y el quantum discord en función del parámetro c , ver Figura 1.5.

Se observa que el quantum discord es mayor al entrelazamiento para $c \in (0, 0.879)$, y luego el entrelazamiento pasa a ser dominante cuando $c \in (0.879, 1)$. Cuando $c = 1$ obtenemos el resultado presentado anteriormente para el estado singlete. También es interesante notar que el entrelazamiento de formación se anula para $c \in (0, 1/3)$, sin embargo el quantum discord es distinto de cero con excepción del caso $c = 0$. Como se puede apreciar, no existe una relación clara entre ambas correlaciones. Estas medidas no solo son cuantitativamente distintas, sino que también son cualitativamente distintas.

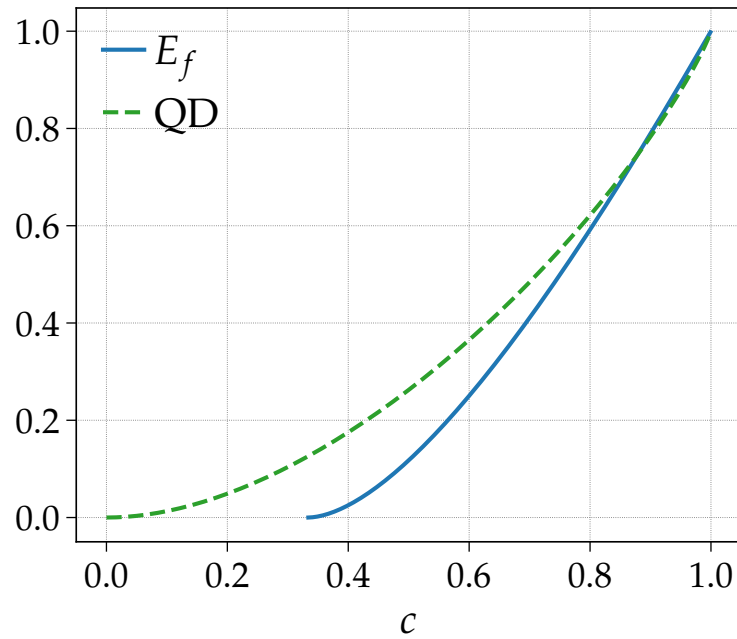


Figura 1.5: Gráfico de entrelazamiento de formación (línea sólida) y quantum discord (línea punteada), para un estado de Werner en función del parámetro c .

En resumen estudiar el quantum discord es interesante ya que propone una clasificación de correlaciones cuánticas y clásicas utilizando un enfoque diferente a la clasificación tradicional de estados entrelazados versus separables. Además, tiene interés práctico ya que se ha demostrado útil para ciertas tareas de computación cuántica [28, 29]. También ha sido útil para estudiar el grado de correlación en algunos sistemas de muchos cuerpos [30, 31, 32].

Capítulo 2

Formulación del 2DEG con ISO en Segunda Cuantización

En este capítulo, exploraremos el problema del gas bidimensional con interacción de Rashba desde el formalismo de segunda cuantización. Este sistema presenta una característica interesante: las autofunciones de una partícula exhiben una dirección de spin que depende del vector momento \mathbf{k} . Esto difiere del gas de electrones sin interacción de spin-órbita, donde el spin siempre puede definirse en una dirección independiente del momento. Además, la interacción de Rashba rompe la degeneración de spin, dando lugar a dos ramas de energía dependientes de la proyección de spin, lo que resulta en un estado fundamental cualitativamente diferente al caso sin interacción de spin-órbita.

A continuación, enumeramos los puntos principales de este capítulo:

- Introducimos el Hamiltoniano de una partícula con interacción spin-orbita de Rashba, junto con sus respectivas autofunciones y autoenergías.
- Escribimos este Hamiltoniano bajo el formalismo de segunda cuantización para estudiar el sistema de N partículas.
- Describimos el estado fundamental no interactuante de N partículas para este sistema. Identificamos dos regímenes cualitativamente distintos: uno para densidades mayores y otro para densidades menores a la densidad crítica $n = m^* \alpha^2 / \pi \hbar^4$.

- Agregamos el termino de Coulomb al Hamiltoniano en segunda cuantización utilizando el modelo de Jellium.
- Utilizando el Hamiltoniano con interacción de Coulomb calculamos la corrección de energía a primer orden que introduce esta interacción.
- Por ultimo calculamos el propagador libre de este sistema para los dos regímenes de densidad encontrados.

2.1. Gas de electrones con interacción de Rashba

El Hamiltoniano de un electrón confinado en un quantum well de semiconductores incluyendo la interacción spin-órbita de Rashba es

$$H_R = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m^*} + \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y). \quad (2.1)$$

Los operadores momento (a menos de un \hbar) son $k_x = -i\frac{\partial}{\partial x}$ y $k_y = -i\frac{\partial}{\partial y}$. La masa efectiva de la banda de conducción es m^* , y α es el parámetro que describe la intensidad del acoplamiento spin-orbita. El valor de éste surge del material y la forma del quantum well. σ_x y σ_y son matrices de Pauli. El Hamiltoniano de Rashba puede ser resuelto analíticamente, y se obtienen las siguientes autoenergías y autofunciones [6]:

$$\Psi_{\mathbf{k}\gamma}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} \gamma i e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

$$E(\mathbf{k}, \gamma) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma k \alpha. \quad (2.3)$$

En estas expresiones \mathbf{k} es el vector de onda bidimensional, φ es el ángulo de \mathbf{k} en coordenadas polares, y A es la superficie de la muestra.

El número cuántico de spin $\gamma = \pm 1$ denota autoestados con spin-up y spin-down. El eje de cuantización de spin, que yace en el plano x-y, es perpendicular al vector \mathbf{k} , este se observa en la Figura 2.1.

A pesar de que la dirección de cuantización del spin varía con el orbital de partícula única, el estado fundamental de un gas de electrones con Hamiltoniano Rashba es paramagnético [33]. Además, notar que el Hamiltoniano de Rashba H_R , es invariante frente a la inversión temporal. Esto implica que $\Psi_{\mathbf{k}\gamma}(\mathbf{r})$ y $\Psi_{-\mathbf{k},\gamma}(\mathbf{r})$ sean estados conjugados de Kramers con el mismo autovalor de energía $E(k, \gamma)$ [34].

2.1.1. Hamiltoniano en segunda cuantización

Para tratar el sistema de N partículas es conveniente usar el formalismo de segunda cuantización. Entonces definimos \hat{c}^\dagger y \hat{c} operadores de creación y destrucción en la base de

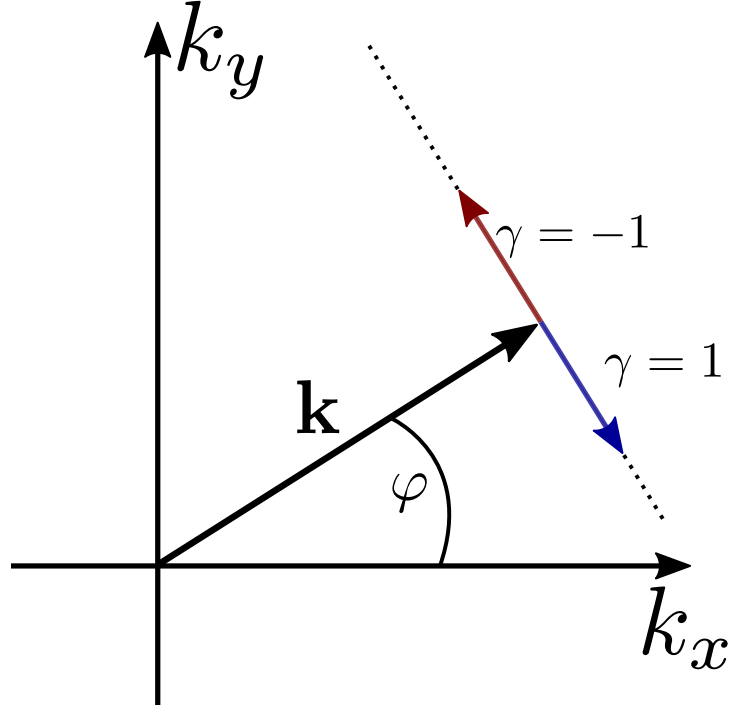


Figura 2.1: Gráfico de un vector momento \mathbf{k} con ángulo polar φ y sus proyecciones de spin asociadas $\gamma = \pm 1$.

partícula única $\{|\mathbf{k}, \gamma\rangle\}$ autoestados de $\hat{h}_0 = \hat{T} + \hat{H}_R$. En segunda cuantización este hamiltoniano se escribe

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_0 &= \sum_{\mathbf{k}'\gamma', \mathbf{k}\gamma} \langle \mathbf{k}', \gamma' | \hat{h}_0 | \mathbf{k}, \gamma \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}'\gamma', \mathbf{k}\gamma} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma k \alpha \right] \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} \delta_{\gamma'\gamma} \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + k \alpha \right] \hat{c}_{\mathbf{k}+}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}+} + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - k \alpha \right] \hat{c}_{\mathbf{k}-}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}-}.
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Este Hamiltoniano no tiene en cuenta la interacción de Coulomb entre los electrones. Esto va a ser tratado mas adelante.

2.1.2. Estado Fundamental

La interacción de Rashba rompe la degeneración de spin en la energía, como se observa en la Ec. (2.3). Esto produce que existan dos ramas de energía; el número cuántico γ es el que etiqueta las ramas, y toma los valores $\gamma = \pm 1$.

Cuando el sistema esta en el estado fundamental, dada la energía de Fermi del sistema, o equivalentemente la densidad electrónica n , los electrones van a llenar las ramas respetando el principio de exclusión y ocupando el estado de menor energía disponible. Se pueden distinguir dos regímenes dependiendo de la densidad de electrones. Baja densidad cuando $n < \frac{m^{*2}\alpha^2}{\pi\hbar^4}$, donde solo la rama de energía con $\gamma = -1$ está poblada y la superficie de Fermi toma la forma de un anillo, cuyos radios menor y mayor son

$$\begin{cases} k_{Fmin}^- &= \frac{\alpha m^*}{\hbar^2} - \frac{\pi\hbar^2 n}{\alpha m^*} \\ k_{Fmax}^- &= \frac{\alpha m^*}{\hbar^2} + \frac{\pi\hbar^2 n}{\alpha m^*}. \end{cases} \quad (2.5)$$

Este estado fundamental se puede expresar en segunda cuantización de la siguiente forma

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}|=k_{Fmin}^-}^{k_{Fmax}^-} \hat{c}_{\mathbf{k}-}^\dagger |0\rangle. \quad (2.6)$$

En el otro caso, de alta densidad $n > \frac{m^{*2}\alpha^2}{\pi\hbar^4}$, ambas ramas están ocupadas, formando dos discos de Fermi, una con radio k_F^+ para la proyección de spin $\gamma = 1$ y la otra con radio k_F^- para la proyección $\gamma = -1$, como se observa en la Figura 2.2. Estos radios de Fermi se pueden escribir en función de los parámetros del sistema

$$\begin{cases} k_F^- &= \frac{\alpha m^* + \sqrt{2\pi\hbar^4 n - \alpha^2 m^{*2}}}{\hbar^2} \\ k_F^+ &= \frac{-\alpha m^* + \sqrt{2\pi\hbar^4 n - \alpha^2 m^{*2}}}{\hbar^2}. \end{cases} \quad (2.7)$$

Escrito en segunda cuantización resulta

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}|}^{k_F^+} \hat{c}_{\mathbf{k}+}^\dagger \prod_{|\mathbf{k}|}^{k_F^-} \hat{c}_{\mathbf{k}-}^\dagger |0\rangle. \quad (2.8)$$

Un ejemplo de efecto Rashba en quantum wells es el arseniuro de galio (GaAs). Este tiene $m^* = 0.063m_0$, $\alpha = 0.06 \times 10^{-11} \text{eV m}$ [35] y una densidad crítica de $n_c = 7.83 \times 10^6 \text{cm}^{-2}$. Otro ejemplo es el antimoniuro de indio (InSb), $m^* = 0.016m_0$, $\alpha = 0.9 \times 10^{-11} \text{eV m}$ [36] y densidad crítica $n_c = 1.13 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$. Vemos que la densidad crítica aumenta considerablemente al aumentar la intensidad del acople de Rashba ($n_c \sim \alpha^2$). Esto es importante ya que muchos de los efectos descritos en el Capítulo 3 ocurren cerca de la densidad crítica. Por lo tanto, si

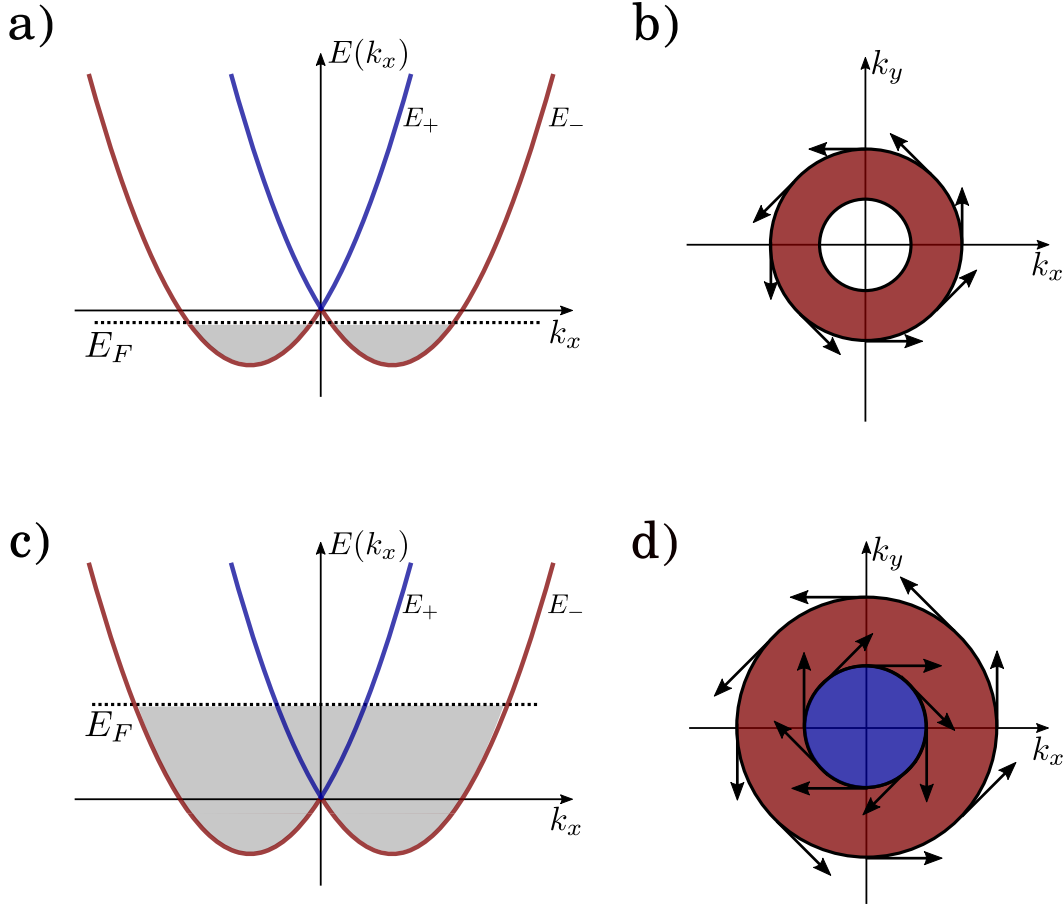


Figura 2.2: a) y c) son gráficos de la energía del Hamiltoniano de Rashba en función de k_x para diferentes energías de Fermi. En a) la energía de Fermi es tal que solo la banda con proyección $\gamma = -1$ esta ocupada, y en b) se representa la superficie de Fermi asociada, esta es un anillo con radio menor $k_{F_{min}}^-$ y radio mayor $k_{F_{max}}^-$, las flechas indican la orientación de los spins. En b) la energía de Fermi es tal que ambas ramas están pobladas con electrones, y en d) se observan las superficies de Fermi asociadas. Estas son dos discos de distinto radio, uno para cada proyección de γ , las flechas indican el sentido de los spins en cada superficie.

se desea realizar observaciones experimentales de estos, es necesario utilizar un material con parámetros que permitan alcanzar la densidad crítica de manera factible en un experimento.

2.2. Interacción de Coulomb

Para tener en cuenta la interacción de Coulomb entre los electrones primero hay que agregar este término al Hamiltoniano en segunda cuantización [Ec. 2.4]. Vamos a utilizar el

modelo de Jellium [37] para describir este gas de electrones bidimensional. El Hamiltoniano de la interacción Coulombiana es

$$\hat{H}_{Coulomb} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{\mathbf{k}_1\gamma_1 \\ \mathbf{k}_2\gamma_2 \\ \mathbf{k}_3\gamma_3 \\ \mathbf{k}_4\gamma_4}} \hat{c}_{\mathbf{k}_1\gamma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}_2\gamma_2}^\dagger \langle \mathbf{k}_1\gamma_1, \mathbf{k}_2\gamma_2 | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \mathbf{k}_3\gamma_3, \mathbf{k}_4\gamma_4 \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}_4\gamma_4} \hat{c}_{\mathbf{k}_3\gamma_3}, \quad (2.9)$$

donde

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{k}\gamma \rangle = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \chi_\gamma(k) = \frac{1}{\sqrt{2A}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \begin{pmatrix} \gamma e^{-i\varphi} \\ 1 \end{pmatrix},$$

son las autofunciones de partícula única para el hamiltoniano \hat{h}_0 , y $v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ el potencial de Coulomb con el apantallamiento dado por el potencial de Yukawa

$$v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \frac{e^2 e^{-\mu|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}.$$

Evaluamos explícitamente el elemento de matriz

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1\gamma_1, \mathbf{k}_2\gamma_2 | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \mathbf{k}_3\gamma_3, \mathbf{k}_4\gamma_4 \rangle &= \frac{e^2}{(2A)^2} \int dx_1^2 \int dx_2^2 e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x}_1} \chi_1^\dagger(1) \\ & e^{-i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{x}_2} \chi_2^\dagger(2) \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} e^{-i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x}_3} \chi_3(1) \\ & e^{-i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{x}_4} \chi_4(2), \end{aligned}$$

agrupando las exponenciales y notando que los estados de spin no dependen de las coordenadas espaciales se sigue

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1\gamma_1, \mathbf{k}_2\gamma_2 | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \mathbf{k}_3\gamma_3, \mathbf{k}_4\gamma_4 \rangle &= \frac{e^2}{(2A)^2} \chi_1^\dagger(1) \chi_3(1) \chi_2^\dagger(2) \chi_4(2) \\ & \int dx_1^2 \int dx_2^2 e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{x}_1} e^{-i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{x}_2} \frac{e^{-\mu|\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2|}}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

Vamos a desarrollar el producto de los estados de spin para dos estados arbitrarios

$$\begin{aligned} \chi_{\gamma_n}^\dagger \chi_{\gamma_m} &= \begin{pmatrix} -i\gamma_n e^{i\phi_n} & 1 \\ & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\gamma_n e^{-i\phi_m} \\ 1 \end{pmatrix} = -i^2 \gamma_n \gamma_m e^{i(\phi_n - \phi_m)} + 1 \\ &= \gamma_n \gamma_m e^{i(\phi_n - \phi_m)} + 1 = \gamma_n \gamma_m e^{i\theta_{nm}} + 1, \end{aligned} \quad (2.11)$$

donde $\theta_{nm} = \phi_n - \phi_m$. Reemplazando en la Ec. (2.10) y haciendo el cambio de variables $\mathbf{x} = \mathbf{x}_2$ y $\mathbf{y} = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2$ obtenemos

$$\langle \mathbf{k}_1\gamma_1, \mathbf{k}_2\gamma_2 | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \mathbf{k}_3\gamma_3, \mathbf{k}_4\gamma_4 \rangle = \frac{e^2}{(2A)^2} (\gamma_1\gamma_3 e^{i\theta_{13}} + 1) (\gamma_2\gamma_4 e^{i\theta_{24}} + 1) \int dx^2 \int dy^2 e^{-i(\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{x}} e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{y}} \frac{e^{-\mu|\mathbf{y}|}}{|\mathbf{y}|}. \quad (2.12)$$

Integrando en \mathbf{x} :

$$\langle \mathbf{k}_1\gamma_1, \mathbf{k}_2\gamma_2 | v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) | \mathbf{k}_3\gamma_3, \mathbf{k}_4\gamma_4 \rangle = \frac{e^2 A}{(2A)^2} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} (\gamma_1\gamma_3 e^{i\theta_{13}} + 1) (\gamma_2\gamma_4 e^{i\theta_{24}} + 1) \underbrace{\int dy^2 e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{y}} \frac{e^{-\mu|\mathbf{y}|}}{|\mathbf{y}|}}_I \quad (2.13)$$

La $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ que apareció nos da la conservación del momento total. Ahora calculamos la integral que queda con la sustitución $\mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3$, y usando la definición de la función de Bessel de primera especie J_0 y su transformada de Laplace

$$\begin{aligned} I &= \int dy^2 e^{i(\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_1)\cdot\mathbf{y}} \frac{e^{-\mu|\mathbf{y}|}}{|\mathbf{y}|} = \int \int d\alpha dr r e^{iqr \cos \alpha} e^{-\mu r} \\ &= 2\pi \int dr e^{-\mu r} J_0(qr) = \frac{2\pi}{\sqrt{q^2 + \mu^2}}, \end{aligned} \quad (2.14)$$

finalmente reemplazando la Ec. (2.14) en el Hamiltoniano de Coulomb, y utilizando la $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ podemos eliminar una variable de la sumatoria usando

$$\begin{cases} \mathbf{q} = \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 & ; \mathbf{k} = \mathbf{k}_3 \\ \mathbf{k}_2 = \mathbf{p} - \mathbf{q} & ; \mathbf{k}_4 = \mathbf{p} \end{cases}$$

también debemos reescribir los ángulos θ_{13} y θ_{24} usando $\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3 = -(\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4)$ entonces $\theta_{13} = -\theta_{24} \equiv \theta$. Con esto definimos $\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta)$ tal que

$$\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta) = (\gamma_1\gamma_3 e^{i\theta} + 1) (\gamma_2\gamma_4 e^{-i\theta} + 1). \quad (2.15)$$

Como sucede en el calculo del modelo de Jellium tradicional sin spin-orbita el termino con $q = 0$ se cancela con el Hamiltoniano del fondo de iones y la interacción electrón-ion.

Finalmente tomando el límite $\mu \rightarrow 0$, es decir que el apantallamiento ocurre a distancias muy grandes, tenemos que el Hamiltoniano completo resulta

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\gamma} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \gamma \alpha k \right] \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} + \frac{\pi e^2}{4A} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q} \\ \gamma_1\gamma_3 \\ \gamma_2\gamma_4}} \frac{\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta)}{q} \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\gamma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\gamma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p},\gamma_4} \hat{c}_{\mathbf{k},\gamma_3}. \quad (2.16)$$

2.3. Cálculo del Corrimiento de Energía a Primer Orden

En esta sección vamos a calcular el corrimiento de energía generado por la interacción de Coulomb entre los electrones a primer orden utilizando teoría de perturbaciones. Escribimos el hamiltoniano adimensionalizado tomando $A = \pi r_0^2 N$, entonces $A = r_0^2 \bar{A}$, $\mathbf{k} = r_0^{-1} \bar{\mathbf{k}}$, $\alpha = r_0^{-1} \bar{\alpha}$, $\mathbf{p} = r_0^{-1} \bar{\mathbf{p}}$, $\mathbf{q} = r_0^{-1} \bar{\mathbf{q}}$, $a_0 = \frac{\hbar^2}{m^* c}$ y $r_s = \frac{r_0}{a_0}$ resulta

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_s^2} \left(\sum_{\bar{\mathbf{k}}\gamma} \left[\frac{\bar{k}^2}{2} + \gamma \bar{\alpha} \bar{k} \right] \hat{c}_{\bar{\mathbf{k}}\gamma}^\dagger \hat{c}_{\bar{\mathbf{k}}\gamma} + \frac{\pi r_s}{4\bar{A}} \sum_{\substack{\bar{\mathbf{k}}\bar{\mathbf{p}}\bar{\mathbf{q}} \\ \gamma_1\gamma_3 \\ \gamma_2\gamma_4}} \frac{\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta)}{\bar{q}} \hat{c}_{\bar{\mathbf{k}}+\bar{\mathbf{q}},\gamma_1}^\dagger \hat{c}_{\bar{\mathbf{p}}-\bar{\mathbf{q}},\gamma_2}^\dagger \hat{c}_{\bar{\mathbf{p}},\gamma_4} \hat{c}_{\bar{\mathbf{k}},\gamma_3} \right). \quad (2.17)$$

Si renormalizamos el Hamiltoniano eliminando la constante multiplicativa $\frac{e^2}{a_0 r_s^2}$ y consideramos el límite $r_s \rightarrow 0$ (alta densidad), obtenemos el Hamiltoniano de Rashba sin interacción. Por lo tanto, al restringir nuestro estudio al caso de alta densidad, podemos tratar la interacción de Coulomb como una perturbación en el Hamiltoniano de Rashba. Realizaremos el cálculo en este régimen, donde tomamos $\hat{H}_0 = \hat{H}_R$, y $\hat{H}_1 = \hat{H}_{Coulomb}$ como una perturbación. Consideremos $|\Phi_0\rangle$ el estado fundamental de \hat{H}_0 en el caso de alta densidad ($n > n_c$) definido como

$$|\Phi_0\rangle = \prod_{|\mathbf{k}|}^{k_F^+} \hat{c}_{\mathbf{k}^+}^\dagger \prod_{|\mathbf{k}|}^{k_F^-} \hat{c}_{\mathbf{k}^-}^\dagger |0\rangle, \quad (2.18)$$

calculamos la energía a orden cero del estado fundamental tomando el valor medio de \hat{H}_0 , y a primer orden con \hat{H}_1 . Como estamos en el caso de alta densidad del gas de electrones, donde $E_F > 0$ ambas bandas del espectro están ocupadas.

Primero calculamos la energía a orden cero:

$$\langle \Phi_0 | \hat{H}_0 | \Phi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \alpha k \right] \underbrace{\langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k}^+} | \Phi_0 \rangle}_{\theta(k_F^+ - k)} + \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \alpha k \right] \underbrace{\langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k}^-} | \Phi_0 \rangle}_{\theta(k_F^- - k)}. \quad (2.19)$$

Pasando la sumatoria en \mathbf{k} al continuo e integrando, se obtiene

$$E^{(0)} = \langle \Phi_0 | \hat{H}_0 | \Phi_0 \rangle = \frac{A}{2\pi} \left(\frac{\hbar^2}{8m^*} (k_F^{+4} + k_F^{-4}) + \frac{\alpha}{3} (k_F^{+3} - k_F^{-3}) \right). \quad (2.20)$$

Ahora calculamos la corrección de energía a primer orden:

$$\langle \Phi_0 | \hat{H}_1 | \Phi_0 \rangle = \frac{\pi e^2}{4A} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q} \\ \gamma_1\gamma_3 \\ \gamma_2\gamma_4}} \frac{\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta)}{q} \langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\gamma_1}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\gamma_2}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p},\gamma_4} \hat{c}_{\mathbf{k},\gamma_3} | \Phi_0 \rangle. \quad (2.21)$$

Para que el valor medio de la Ec. (2.21) no se anule se deben satisfacer alguna de las siguientes relaciones

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k} + \mathbf{q}, \gamma_1 = \mathbf{p}, \gamma_4 \\ \mathbf{p} - \mathbf{q}, \gamma_2 = \mathbf{k}, \gamma_3 \end{array} \right. \quad \text{ó,} \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{k} + \mathbf{q}, \gamma_1 = \mathbf{k}, \gamma_3 \\ \mathbf{p} - \mathbf{q}, \gamma_2 = \mathbf{p}, \gamma_4 \end{array} \right. . \quad (2.22)$$

Vemos que solo puede valer el primer caso ya que el segundo implica $q = 0$ que no esta incluido en la sumatoria. Usando estas igualdades se puede reescribir el término $\Gamma_{\gamma_1\gamma_2\gamma_3\gamma_4}(\theta)$, ver la Ec. (2.15), redefiniendo $\gamma_1 = \gamma_4 = \gamma$ y $\gamma_2 = \gamma_3 = \gamma'$, se obtiene

$$\begin{aligned} \Gamma &= (\gamma_1\gamma_3 e^{i\theta} + 1)(\gamma_2\gamma_4 e^{-i\theta} + 1) = (\gamma\gamma' e^{i\theta} + 1)(\gamma'\gamma e^{-i\theta} + 1) \\ &= \underbrace{(\gamma\gamma')^2}_{1} + 1 + 2\gamma\gamma' \cos \theta = 2(1 + \gamma\gamma' \cos \theta) = \Gamma_{\gamma'\gamma}(\theta), \end{aligned} \quad (2.23)$$

utilizando esto y evaluando explícitamente el valor medio en la Ec. (2.21) obtenemos

$$\begin{aligned} E^{(1)} &= \frac{\pi e^2}{4A} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{p}\mathbf{q} \\ \gamma\gamma'}} \delta_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\mathbf{p}} \frac{\Gamma_{\gamma\gamma'}(\theta)}{q} \langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\gamma}^\dagger \underbrace{\hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\gamma'}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{p},\gamma}}_{\substack{\delta_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\mathbf{p}} \delta_{\gamma,\gamma'} \\ -\hat{c}_{\mathbf{p},\gamma} \hat{c}_{\mathbf{p}-\mathbf{q},\gamma'}^\dagger}} \hat{c}_{\mathbf{k},\gamma'} | \Phi_0 \rangle \\ E^{(1)} &= -\frac{\pi e^2}{4A} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{q} \\ \gamma\gamma'}} \frac{\Gamma_{\gamma\gamma'}(\theta)}{q} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k}+\mathbf{q},\gamma} \hat{n}_{\mathbf{k},\gamma'} | \Phi_0 \rangle = -\frac{\pi e^2}{4A} \sum_{\substack{\mathbf{k}\mathbf{q} \\ \gamma\gamma'}} \frac{\Gamma_{\gamma\gamma'}(\theta)}{q} \left[\theta (k_F^\gamma - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \theta (k_F^{\gamma'} - k) \right] \end{aligned} \quad (2.24)$$

pasando al continuo las sumatorias se obtiene

$$E^{(1)} = -\frac{\pi e^2 A}{4(2\pi)^4} \sum_{\gamma\gamma'} \int dq^2 \frac{\Gamma_{\gamma\gamma'}(\theta)}{q} \int dk^2 \left[\theta(k_F^\gamma - |\mathbf{k} + \mathbf{q}|) \theta(k_F^{\gamma'} - k) \right], \quad (2.25)$$

donde la integral en \mathbf{k} es simplemente el área dada por la intersección de dos discos, uno con radio $k_F^{\gamma'}$ centrado en el origen y el otro con radio k_F^γ centrado en $-q$. A esta cantidad geométrica la vamos a llamar $A_{\gamma\gamma'}(q)$. Calculando esta área se obtiene

$$A_{\gamma\gamma'}(q) = k_F^{\gamma'2} \arccos\left(\frac{k_F^{\gamma'2} - k_F^{\gamma2} + q^2}{2k_F^{\gamma'2}q}\right) + k_F^{\gamma2} \arccos\left(\frac{k_F^{\gamma2} - k_F^{\gamma'2} + q^2}{2k_F^{\gamma2}q}\right) - \left(\frac{-(k_F^{\gamma'2} - k_F^{\gamma2}) + (k_F^{\gamma'2} + k_F^{\gamma2})2q^2 - q^4}{4}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad (2.26)$$

con este término la corrección a la energía resulta

$$E^{(1)} = -\frac{\pi e^2 A}{4(2\pi)^4} \sum_{\gamma\gamma'} \int dq A_{\gamma\gamma'}(q) \int d\theta \Gamma_{\gamma\gamma'}(\theta), \quad (2.27)$$

la integral angular solo aporta un factor 4π y la integral sobre q es sencilla en el caso $\gamma = \gamma'$

$$\int dq A_{\gamma\gamma}(q) = \frac{8k^\gamma{}^3}{3} \quad (2.28)$$

$$E^{(1)} = -\frac{\pi^2 e^2 A}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{3} (k_F^{+3} + k_F^{-3}) + 2 \int dq A_{+-}(q) \right], \quad (2.29)$$

donde usamos que $A_{+-} = A_{-+}$, esta última de integral es el cálculo del área entre dos discos de distinto radio con sus centros desplazados una distancia q , por lo tanto la integral se separa en dos términos.

$$\int dq A_{+-}(q) = \int_0^{k_F^- - k_F^+} \pi k_F^{+2} dq + \int_{k_F^- - k_F^+}^{k_F^- + k_F^+} A_{+-}(q) dq = \pi k_F^{+2} (k_F^- - k_F^+) + \int_{k_F^- - k_F^+}^{k_F^- + k_F^+} A_{+-}(q) dq, \quad (2.30)$$

en el primer término como $k_F^- > k_F^+$, el disco de radio k_F^+ está completamente encerrado por el de radio k_F^- , y en el segundo hay que tener en cuenta la intersección cuando no están

completamente solapados, este término es mas complicado de calcular. La corrección a la energía resulta

$$E^{(1)} = -\frac{\pi^2 e^2 A}{(2\pi)^4} \left[\frac{8}{3} (k_F^{+3} + k_F^{-3}) + 2\pi k_F^{+2} (k_F^- - k_F^+) + 2 \int_{k_F^- - k_F^+}^{k_F^- + k_F^+} A_{+-}(q) dq \right], \quad (2.31)$$

donde esta ultima integral no tiene una forma analítica simple pero se puede calcular fácilmente por métodos numéricos. Esta expresión también se puede escribir en términos de la densidad fermionica n

$$n = \sum_{\mathbf{k}} \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k},+} | \Phi_0 \rangle + \langle \Phi_0 | \hat{n}_{\mathbf{k},-} | \Phi_0 \rangle = \frac{(2\pi)}{(2\pi)^2} \left[\int_0^{k_F^+} dk k + \int_0^{k_F^-} dk k \right] = \frac{1}{2\pi} \frac{(k_F^{2+} + k_F^{2-})}{2}. \quad (2.32)$$

La presencia de una corrección no nula en la energía, como se describe en la Ec. (2.31), sugiere la existencia de una estructura no trivial en el estado fundamental de muchas partículas no interactuantes. La antisimetría de la función de onda de los electrones impone correlaciones que cambian su energía. En la Sección 3, exploraremos en detalle las implicaciones de estas correlaciones.

2.4. Cálculo del Propagador Libre

En esta Sección calculamos el propagador libre para un 2DEG con ISO de Rashba, aunque no continuamos en esa dirección este podría utilizarse para tener en cuenta los efectos de la temperatura en el sistema y en el calculo de correcciones de energía a orden mayor donde el método perturbativo tradicional diverge.

El propagador libre, o función de Green libre $G^{(0)}$, se puede interpretar como la amplitud de probabilidad que una partícula, o hueco, cambie de un estado hacia otro en un tiempo determinado para el sistema sin interacción. Este es importante ya que cuando se agregan interacciones la función de Green generalmente no se puede resolver de manera exacta, pero si se puede expandir de forma perturbativa en términos de $G^{(0)}$. Ahora consideremos el sistema de N electrones sin interacción Coulombiana, con Hamiltoniano H_0 . La función de Green esta dada por

$$iG_{\gamma\beta}^{(0)}(\mathbf{k}t, \mathbf{k}'t') = \frac{1}{\langle \Phi_0 | \Phi_0 \rangle} \langle \Phi_0 | T \left[\hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}(t)_{H_0} \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger(t')_{H_0} \right] | \Phi_0 \rangle, \quad (2.33)$$

donde $|\Phi_0\rangle$ es el estado fundamental de N partículas de H_0 . Los operadores de creación y destrucción se encuentran en el picture de interacción, y su evolución temporal está determinada por H_0 de la siguiente manera

$$\begin{cases} \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}(t)_{H_0} &= e^{iH_0 t} \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} e^{-iH_0 t} = \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} e^{-i\epsilon_\gamma(k)t} \\ \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger(t')_{H_0} &= e^{iH_0 t'} \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger e^{-iH_0 t'} = \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger e^{i\epsilon_\beta(k')t'}. \end{cases} \quad (2.34)$$

Usando la Ec. (2.34) y escribiendo explícitamente el operador ordenamiento temporal T obtenemos

$$iG_{\gamma\beta}^{(0)}(\mathbf{k}t, \mathbf{k}'t') = e^{i(\epsilon_\beta(k')t' - \epsilon_\gamma(k)t)} \left[\theta(t - t') \langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger | \Phi_0 \rangle - \theta(t' - t) \langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} | \Phi_0 \rangle \right]. \quad (2.35)$$

Notar que en esta base la dirección de spin depende de \mathbf{k} , por lo tanto no se pueden tratar como cantidades independientes. Para que los valores medios de la Ec. (2.35) no se anulen se deben crear y destruir partículas con igual proyección de spin, para que los estados resultantes no sean ortogonales. Esto hace que la función de Green no interactuante sea diagonal en spin.

$$G^{(0)} = \begin{pmatrix} G_{++}^{(0)} & 0 \\ 0 & G_{--}^{(0)} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

Para evaluar los valores medios explícitamente hay que separar en los casos de baja y alta densidad, ya que la forma de las superficies de Fermi va a ser cualitativamente diferentes.

2.4.1. Régimen de Baja Densidad

En este caso, con $n < \frac{m^* \alpha^2}{\pi \hbar^4}$, solo está poblada la rama con $\gamma = -1$. Por lo tanto, el único elemento de matriz de la función de Green que es distinto de cero es $G_{--}^{(0)}$.

Calculamos los valores medios de los operadores de creación y destrucción que aparecen en la ecuación 2.35. Recordamos que en el caso de baja densidad, el estado fundamental se puede representar en el espacio de momento como un anillo (ver Figura 2.2b). Por lo tanto,

utilizamos el hecho de que crear una partícula dentro de este anillo anula el estado debido al principio de exclusión, al igual que crear un hueco fuera del anillo.

$$\langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}-} \hat{c}_{\mathbf{k}'-}^\dagger | \Phi_0 \rangle = \begin{cases} \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} & \text{si } k < k_{Fmin}^-, \\ 0 & \text{si } k_{Fmin}^- < k < k_{Fmax}^-, = \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(1 - \theta(k_{Fmax}^- - k)\theta(k - k_{Fmin}^-)) \\ \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} & \text{si } x > k_{Fmax}^-. \end{cases}$$

$$\langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}'\beta}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma} | \Phi_0 \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } k < k_{Fmin}^-, \\ \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}} & \text{si } k_{Fmin}^- < k < k_{Fmax}^-, \equiv \delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}\theta_{anillo}(k) \\ 0 & \text{si } x > 0. \end{cases} \quad (2.37)$$

donde $\theta_{anillo} \equiv \theta(k_{Fmax}^- - k)\theta(k - k_{Fmin}^-)$ vale uno dentro del anillo definido por las superficies de Fermi y cero fuera de este. Usando esto y aplicando la delta de $\delta_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}$ la función de Green resulta

$$iG_{--}^{(0)}(\mathbf{k}, t' - t) = e^{i\epsilon_-(k)(t'-t)} [\theta(t - t')(1 - \theta_{anillo}(k)) - \theta(t' - t)\theta_{anillo}(k)], \quad (2.38)$$

que solo depende de k y $t' - t$. Su representación en frecuencias se puede obtener utilizando

$$\begin{cases} \theta(\tau) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{i2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{-e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\eta} \\ \theta(-\tau) &= \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \frac{1}{i2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega - i\eta} \end{cases}, \quad (2.39)$$

reemplazando en la Ec. (2.38) obtenemos

$$iG_{--}^{(0)}(\mathbf{k}, t' - t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{i2\pi} e^{i(\epsilon_-(k)+\omega)(t'-t)} \left[\frac{(1 - \theta_{anillo}(k))}{\omega + i\eta} - \frac{\theta_{anillo}(k)}{\omega - i\eta} \right]. \quad (2.40)$$

Definiendo $\Omega = \omega + \epsilon_-(\mathbf{k})$, con $\epsilon_-(\mathbf{k})$ la energía de partícula única con $\gamma = -1$, se obtiene

$$iG_{--}^{(0)}(\mathbf{k}, t' - t) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\Omega}{i2\pi} e^{i\Omega(t'-t)} \left[\frac{(1 - \theta_{anillo}(k))}{\Omega - \epsilon_-(k) + i\eta} - \frac{\theta_{anillo}(k)}{\Omega - \epsilon_-(k) - i\eta} \right]$$

$$G_{--}^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left[\frac{(1 - \theta_{anillo}(k))}{\omega - \epsilon_-(k) + i\eta} - \frac{\theta_{anillo}(k)}{\omega - \epsilon_-(k) - i\eta} \right]. \quad (2.41)$$

Este resultado es similar al caso de electrones libres. La diferencia es que la superficie de Fermi ahora son los bordes del anillo que representa el estado fundamental en lugar del borde de un disco para un 2DEG sin ISO, y con la energía de las excitaciones dada por la Ec. (2.3) con $\gamma = -1$.

2.4.2. Régimen de Alta Densidad

Para el caso de alta densidad ($n > \frac{m^*2\alpha^2}{\pi\hbar^4}$), ambas ramas del espectro van a estar pobladas y aparecen dos momentos de Fermi k_F^γ , donde γ indica sobre cual de los discos de Fermi nos estamos refiriendo. Partiendo de Eq. (2.35), debemos calcular el valor medio de los operadores de creación y destrucción. El primer valor medio es no nulo cuando \mathbf{k} se encuentra por fuera del disco de Fermi y el otro valor medio es no nulo cuando \mathbf{k} se encuentra dentro de este, usando esto obtenemos

$$iG_{\gamma\beta}^{(0)}(\mathbf{k}, t' - t) = \delta_{\gamma\beta} e^{i\epsilon_\gamma(\mathbf{k})(t'-t)} \left[\theta(t - t')\theta(\mathbf{k} - \mathbf{k}_F^\gamma) - \theta(t' - t)\theta(\mathbf{k}_F^\gamma - \mathbf{k}) \right], \quad (2.42)$$

siguiendo los pasos hechos para el caso anterior, y escribiendo la función de Green en su forma matricial se obtiene

$$G^{(0)}(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \begin{pmatrix} \left[\frac{\theta(k - k_F^+)}{\omega - \epsilon_+(k) + i\eta} - \frac{\theta(k_F^+ - k)}{\omega - \epsilon_+(k) - i\eta} \right] & 0 \\ 0 & \left[\frac{\theta(k - k_F^-)}{\omega - \epsilon_-(k) + i\eta} - \frac{\theta(k_F^- - k)}{\omega - \epsilon_-(k) - i\eta} \right] \end{pmatrix}. \quad (2.43)$$

Cada componente de la diagonal de la matriz, es idéntico al caso de gas de electrones libres con un $k_F = k_F^\gamma$, y con una energía modificada que depende del valor de γ y de la intensidad de la interacción de Rashba α .

Capítulo 3

Correlaciones

El gas de electrones está sujeto a restricciones impuestas por la simetría de intercambio de los fermiones. Un indicio de esta estructura no trivial de su función de onda se manifestó implícitamente en la Sección 2.3, donde observamos una reducción en la energía del sistema al calcular el valor medio de la interacción de Coulomb sobre el estado de muchas partículas no interactuantes.

En este capítulo, exploramos las correlaciones inducidas por la simetría de intercambio en un 2DEG con ISO de Rashba. Utilizamos la matriz densidad de dos electrones y aplicamos métodos tradicionales de física de muchos cuerpos, junto con herramientas modernas de información cuántica, para estudiarlas. Además, comparamos los resultados con el caso sin ISO de Rashba.

Es importante destacar que el origen de las correlaciones que investigamos es puramente cuántico. Estas correlaciones que describimos son producto de la estadística cuántica de los fermiones. Sin embargo, vamos a diferenciar entre correlaciones clásicas y cuánticas según si tienen o no un equivalente en sistemas clásicos. Como mencionamos en la introducción, el entrelazamiento y el quantum discord carecen de análogos en sistemas clásicos, por lo tanto, las denominamos correlaciones cuánticas. Otras correlaciones que estudiaremos en este sistema de electrones tienen características clásicas, justificando así esta distinción.

A continuación, enumeramos los puntos principales de este capítulo:

- Calculamos la matriz densidad de dos partículas tanto para un 2DEG con ISO de

Rashba como para uno sin ISO de Rashba.

- Utilizando la matriz densidad de dos partículas, derivamos la función de correlación de pares, que describe la probabilidad de encontrar un electrón en un lugar y spin determinados, dado que hay otro en una posición diferente, y spin igual u opuesto. Encontramos una correlación para electrones con distinta proyección de spin que no se presenta en el caso sin ISO de Rashba.
- Consideramos otra función de correlación de pares que, *a priori*, parece ser correcta, y justificamos por qué carece de sentido físico.
- Consideramos el factor de estructura resuelto en spin, el cual está directamente relacionado con la función de correlación de pares. Mencionamos como una medición experimental de esta cantidad podría mostrar los efectos encontrados en la función de correlación de pares para el sistema con ISO de Rashba.
- Cuantificamos el entrelazamiento entre dos electrones en función de su separación utilizando la concurrencia y el entrelazamiento de formación. Encontramos una distancia de separación a partir de la cual los electrones dejan de estar entrelazados.
- Cuantificamos el quantum discord entre dos electrones en función de su separación. A diferencia del entrelazamiento, el quantum discord decae suavemente a medida que la separación entre ellos tiende a infinito.

3.1. Matriz densidad de dos partículas

Para estudiar las correlaciones del gas de electrones con interacción de Rashba vamos a utilizar la matriz densidad de dos electrones. Por definición la matriz densidad es

$$\rho_{ss';tt'} = \langle \Phi_0 | \hat{\Psi}_{t'}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_t^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{s'}(\mathbf{r}') | \Phi_0 \rangle, \quad (3.1)$$

Donde $\hat{\Psi}_s^\dagger(\mathbf{r})$ es el operador de campo que crea una partícula en \mathbf{r} con proyección de spin s en la dirección $\hat{\mathbf{x}}$. Los operadores de campo se pueden escribir como

$$\begin{aligned} \hat{\Psi}_s(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}=0}^{\infty} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \hat{a}_{\mathbf{k}s} = \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \gamma'} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \langle \phi_{\mathbf{k},s} | \psi_{\mathbf{k}',\gamma'} \rangle \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'} \\ &= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \gamma'} \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{2A}} \int_0^\infty dr'^2 \phi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}')^* \psi_{\mathbf{k}'\gamma'}(\mathbf{r}') \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}, \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde $\hat{a}_{\mathbf{k}s}^\dagger$ crea un electrón en el estado $\phi_{\mathbf{k},s}$, que es una autofunción del 2DEG sin ISO de Rashba con momento \mathbf{k} y proyección de spin s en $\hat{\mathbf{x}}$. En la Ec. (3.2), expresamos el operador $\hat{a}_{\mathbf{k}s}$ en términos de los operadores de Rashba $\hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}$ y sus autofunciones $\psi_{\mathbf{k}'\gamma'}$. Calculamos la integral de las autofunciones

$$\int_0^\infty dr'^2 \phi_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r}')^* \psi_{\mathbf{k}'\gamma'}(\mathbf{r}') = \frac{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{2} (\gamma' i e^{i\phi_{\mathbf{k}'}} + s), \quad (3.3)$$

y reemplazamos en la Ec. (3.1) obteniendo

$$\begin{aligned} \rho_{ss';tt'} &= \sum_{\mathbf{k}\gamma} \sum_{\mathbf{k}'\gamma'} \sum_{l'\sigma'} \sum_{l\sigma} \frac{1}{2^6 A^2} e^{-i(\mathbf{k}-l)\cdot\mathbf{r}} e^{-i(\mathbf{k}'-l')\cdot\mathbf{r}'} \\ &\quad (t' - \gamma' i e^{i\phi_{\mathbf{k}'}})(t - \gamma i e^{i\phi_{\mathbf{k}}}) \\ &\quad (s + \sigma' i e^{-i\phi_{l'}})(s + \sigma i e^{-i\phi_l}) \\ &\quad \langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}^\dagger \hat{c}_{l'\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} | \Phi_0 \rangle, \end{aligned} \quad (3.4)$$

donde ya aplicamos las deltas de Kronecker que aparecen por la Ec. (3.3). Los límites en la sumatoria están dados por el k_F correspondiente a su proyección de spin, valores mayores están prohibidos ya que anularían el elemento de matriz. Vamos a expandir este valor medio permutando todos los operadores de creación hacia la derecha y usamos que $\hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger | \Phi_0 \rangle = 0$

$$\langle \Phi_0 | \hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}^\dagger \hat{c}_{\mathbf{k}'\gamma'}^\dagger \hat{c}_{l'\sigma'} \hat{c}_{l\sigma} | \Phi_0 \rangle = \delta_{\mathbf{k}l} \delta_{\mathbf{k}'l'} \delta_{\gamma\sigma} \delta_{\gamma'\sigma'} - \delta_{\mathbf{k}l'} \delta_{\mathbf{k}'l} \delta_{\gamma\sigma'} \delta_{\gamma'\sigma}, \quad (3.5)$$

Aquí utilizamos las relaciones de anticonmutación de los operadores de creación y destrucción $\{\hat{c}_{\mathbf{k},\gamma}^\dagger, \hat{c}_{\mathbf{k}',\gamma'}\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\gamma\gamma'}$. En esta ecuación aparecen dos términos con deltas de Kronecker, que llamamos directo (D) y de intercambio (E), reemplazando en la Ec. 3.4 obtenemos

$$\begin{aligned} \rho_{ss';tt'} &= \sum_{\mathbf{k}\gamma} \sum_{\mathbf{k}'\gamma'} \sum_{l\sigma'} \sum_{l\sigma} \frac{1}{2^6 A^2} e^{-i(\mathbf{k}-l)\cdot\mathbf{r}} e^{-i(\mathbf{k}'-l')\cdot\mathbf{r}'} \\ &\quad (t' - \gamma i e^{i\phi_k})(t - \gamma' i e^{i\phi_{k'}}) \\ &\quad (s + \sigma' i e^{-i\phi_{-l'}})(s' + \sigma i e^{-i\phi_l}) \\ &\quad (\delta_{\mathbf{k}l}\delta_{\mathbf{k}'l'}\delta_{\gamma\sigma}\delta_{\gamma'\sigma'} - \delta_{\mathbf{k}l'}\delta_{\mathbf{k}l}\delta_{\gamma\sigma'}\delta_{\gamma'\sigma}). \end{aligned} \quad (3.6)$$

Primero desarrollamos el termino directo aplicando las deltas

$$D_{ss';tt'} = \sum_{\mathbf{k}\gamma} \sum_{\mathbf{k}'\gamma'} \frac{1}{2^6 A^2} (t' - \gamma i e^{i\phi_k})(t - \gamma' i e^{i\phi_{k'}})(s + \gamma' i e^{-i\phi_{k'}})(s' + \gamma i e^{-i\phi_k}), \quad (3.7)$$

si vemos solo la parte diagonal $s = t$, $s' = t'$, y llevamos las sumatorias en \mathbf{k} al limite integral obtenemos

$$\begin{aligned} D_{ss'} &= \sum_{\mathbf{k}\gamma} \sum_{\mathbf{k}'\gamma'} \frac{1}{2^4 (\sqrt{2A})^4} (s' - \gamma i e^{i\phi_k})(s - \gamma' i e^{i\phi_{k'}})(s + \gamma' i e^{-i\phi_{k'}})(s' + \gamma i e^{-i\phi_k}) \\ &= \sum_{\mathbf{k}\gamma} \sum_{\mathbf{k}'\gamma'} \frac{1}{2^4 (\sqrt{2A})^4} |s - \gamma i e^{i\phi_k}|^2 |s' - \gamma' i e^{i\phi_{k'}}|^2 \\ &= \sum_{\gamma\gamma'} \frac{A^2}{(2\pi)^4} \frac{1}{2^4 (\sqrt{2A})^4} \left(\int_0^{k_F^\gamma} k dk \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{k}} |s - \gamma i e^{i\phi_{\mathbf{k}}}|^2 \right) \left(\int_0^{k_F^{\gamma'}} k' dk' \int_0^{2\pi} d\phi_{\mathbf{k}'} |s' - \gamma' i e^{i\phi_{\mathbf{k}'}}|^2 \right) \\ &= \sum_{\gamma\gamma'} 16\pi^2 \frac{k_F^{\gamma 2} k_F^{\gamma' 2}}{4}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

El termino directo para la parte diagonal es una constante que no depende de la distancia entre los electrones. También se puede verificar que cualquier termino directo no diagonal es

ceros. Ahora vamos a estudiar el término de intercambio, este es

$$\begin{aligned}
E_{ss';tt'} &= \sum_{k\gamma} \sum_{k'\gamma'} \frac{1}{2^6 A^2} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} (t' - \gamma i e^{i\phi_k})(t - \gamma' i e^{i\phi_{k'}})(s + \gamma i e^{-i\phi_k})(s' + \gamma' i e^{-i\phi_{k'}}) \\
&= \sum_{\gamma\gamma'} \frac{1}{2^6 A^2} \left[\sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} (s + \gamma i e^{-i\phi_k})(t' - \gamma i e^{i\phi_k}) \right] \left[\sum_{k'} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} (s' + \gamma' i e^{-i\phi_{k'}})(t - \gamma' i e^{i\phi_{k'}}) \right] \\
&= \sum_{\gamma\gamma'} \frac{A^2/(2\pi)^4}{2^6 A^2} \underbrace{\left[\int_0^{k_F^\gamma} k dk \int_0^{2\pi} d\phi_k e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} (s + \gamma i e^{-i\phi_k})(t' - \gamma i e^{i\phi_k}) \right]}_{I_\gamma(s,t')} \\
&\quad \underbrace{\left[\int_0^{k_F^{\gamma'}} k' dk' \int_0^{2\pi} d\phi_{k'} e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} (s' + \gamma' i e^{-i\phi_{k'}})(t - \gamma' i e^{i\phi_{k'}}) \right]}_{I'_{\gamma'}(s',t)} \\
&= \sum_{\gamma\gamma'} \frac{A^2/(2\pi)^4}{2^6 A^2} I_\gamma(s,t') I'_{\gamma'}(s',t),
\end{aligned} \tag{3.9}$$

donde la expresión para el término de intercambio quedó en función de las integrales $I_\gamma(s, t')$, $I'_{\gamma'}(s', t)$, que a su vez dependen del elemento de matriz considerado. Juntando el término directo y de intercambio obtenemos

$$\rho_{ss';tt'} = \sum_{\gamma\gamma'} 16\pi^2 \frac{k_F^{\gamma 2} k_F^{\gamma' 2}}{4} \delta_{s,t} \delta_{s',t'} - \sum_{\gamma\gamma'} \frac{A^2/(2\pi)^4}{2^6 A^2} I_\gamma(s,t') I'_{\gamma'}(s',t). \tag{3.10}$$

Ahora calculamos cada una de las integrales para los diferentes índices s, s', t, t' . Luego aplicamos la condición de normalización $\text{Tr}(\rho) = 1$. Así obtenemos la expresión final para la matriz densidad de dos electrones

$$\rho = \frac{1}{4 - 2c} \begin{pmatrix} 1 - f_1^2 & f_1 f_2 & -f_1 f_2 & f_2^2 \\ f_1 f_2 & 1 - f_2^2 & -f_1^2 & f_1 f_2 \\ -f_1 f_2 & -f_1^2 & 1 - f_2^2 & -f_1 f_2 \\ f_2^2 & f_1 f_2 & -f_1 f_2 & 1 - f_1^2 \end{pmatrix}, \tag{3.11}$$

con $c = f_1^2 + f_2^2$, y la base de spin $\mathbf{B} = \{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}$, con la dirección de cuantización del spin en $\hat{\mathbf{x}}$. Aquí, f_1 y f_2 están definidos por

$$f_1 = \frac{2 [k_F^+ J_1(k_F^+ |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) + k_F^- J_1(k_F^- |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| [k_F^{+2} + k_F^{-2}]} \tag{3.12}$$

$$f_2 = \frac{\pi \left[k_F^+ (H_0 J_1 - H_1 J_0) \Big|_{k_F^+ |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| [k_F^{+2} + k_F^{-2}]} - \frac{\pi \left[k_F^- (H_0 J_1 - H_1 J_0) \Big|_{k_F^- |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| [k_F^{+2} + k_F^{-2}]} . \quad (3.13)$$

J_n son las funciones de Bessel de primera especie, y H_n son las funciones de Struve de primera especie. Podemos verificar que si establecemos $\alpha = 0$, entonces $k_F^+ = k_F^- = k_F$ y

$$\begin{cases} \tilde{f}_1 &= \frac{2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| k_F} J_1(k_F |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \\ \tilde{f}_2 &= 0 \end{cases} . \quad (3.14)$$

Usando esto en la ecuación (3.11), recuperamos la matriz de densidad conocida de dos electrones sin ISO de Rashba (ρ_{NR}) [24]

$$\rho_{\text{NR}} = \frac{1}{4 - 2\tilde{f}_1^2} \begin{pmatrix} 1 - \tilde{f}_1^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\tilde{f}_1^2 & 0 \\ 0 & -\tilde{f}_1^2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \tilde{f}_1^2 \end{pmatrix} . \quad (3.15)$$

En lo que resta del capítulo vamos a usar la matriz densidad obtenida [Ec. (3.11)], para estudiar las correlación de dos electrones en el material.

3.2. Función de Correlación de Pares

La función de correlación de pares $R_{ss'}$ es una medida de correlación tradicional utilizada en física de muchos cuerpos. La interpretación habitual de $R_{ss'}$ es la de una probabilidad condicional de encontrar un electrón en (\mathbf{r}, s) , dado que hay otro en (\mathbf{r}', s') [38, 39]. La matriz densidad de dos partículas está relacionada con la función de correlación de pares ($R_{ss'}$) mediante $\rho_{ss';tt'} = (4 - 2c)\delta_{s,t}\delta_{s',t'}R_{ss'}$, donde se incluye $(4 - 2c)$ para poder interpretar cada elemento de R como una probabilidad. En forma matricial se escribe como

$$R_{ss'} = \begin{pmatrix} 1 - f_1^2 & 1 - f_2^2 \\ 1 - f_2^2 & 1 - f_1^2 \end{pmatrix} . \quad (3.16)$$

Claramente, esta probabilidad condicional $R_{ss'}$ depende de la distancia entre los electrones $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$, ya que f_1 y f_2 lo hacen. Cuando $s = s'$, los electrones se evitan entre sí debido al

principio de exclusión de Pauli. Cada electrón está rodeado por una región de probabilidad menor que uno de encontrar otro electrón con el mismo spin, conocida como hueco de intercambio. Esta correlación produce la corrección de energía de primer orden para el gas de electrones interactuante, ver Sección 2.3, que puede interpretarse como la interacción de Coulomb de los electrones con la carga positiva del hueco, reduciendo así la energía total del sistema.

En la Figura 3.1a, presentamos el hueco de intercambio tradicional para dos electrones con la misma proyección de spin $R_{\uparrow\uparrow}$, para un 2DEG sin ISO de Rashba $R_{\uparrow\uparrow}^{\text{NR}} = 1 - f_1^2$, y con ISO de Rashba $R_{\uparrow\uparrow}^{\text{Rashba}} = 1 - f_1^2$. Para la Figura 3.1 utilizamos los valores del coeficiente de Rashba y la masa efectiva correspondientes a la aleación de superficie Bi/Ag(111) [40]. Estos son $\alpha = 3.05 \times 10^{-11} \text{eVm}$, $m^* = 0.35m_0$, y tomamos una densidad electrónica de $n = 6.25 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$, con un radio asociado $r_0 = (\sqrt{\pi n})^{-1} = 7.14 \times 10^{-7} \text{cm}$. Utilizamos los valores para este material ya que presenta un fuerte acople de Rashba en comparación con otros sistemas.

Nótese que la ISO de Rashba parece reducir el tamaño del hueco de intercambio. Más sorprendente es el termino $R_{\uparrow\downarrow}$ (Figura 3.1b), que en el caso sin Rashba es constante e igual a uno (sin correlación), y sin embargo la ISO de Rashba muestra una correlación no trivial para dos electrones con spins opuestos $R_{\uparrow\downarrow}^{(\text{R})} = 1 - f_2^2$. Esta extraña correlación aparece porque la parte de spin de la solución de partícula única del Hamiltoniano de Rashba [Ec. (2.10)] depende de la dirección del vector de momento \mathbf{k} . Esta dependencia de \mathbf{k} impide que el operador de campo en la Ec. (3.1) localice completamente la proyección del spin. Esto se debe a que cuando $\hat{\Psi}_s(\mathbf{r})$ actúa sobre el estado fundamental, la suma en momento llega hasta k_F^γ , ya que $\hat{c}_{\mathbf{k}\gamma}|\Phi_0\rangle = 0$ para $|\mathbf{k}| > k_F^\gamma$ [ver última línea de la Ec. (3.2)]. La suma truncada produce un estado que no tiene completa incertidumbre en momento y, como consecuencia, no tiene una posición y spin completamente localizado. Lo mismo sucede sin ISO de Rashba, pero en este caso la dirección del spin siempre se puede definir independientemente del momento, y por lo tanto, el efecto de esta deslocalización es solo espacial y se observa en $R_{\uparrow\uparrow}$.

Si consideramos una densidad electrónica n más alta, ahora k_F^γ también es mayor para acomodar los nuevos electrones. Como consecuencia, la función de onda de los electrones estará más localizada y, para ambos casos, el hueco de intercambio será más pequeño. En el

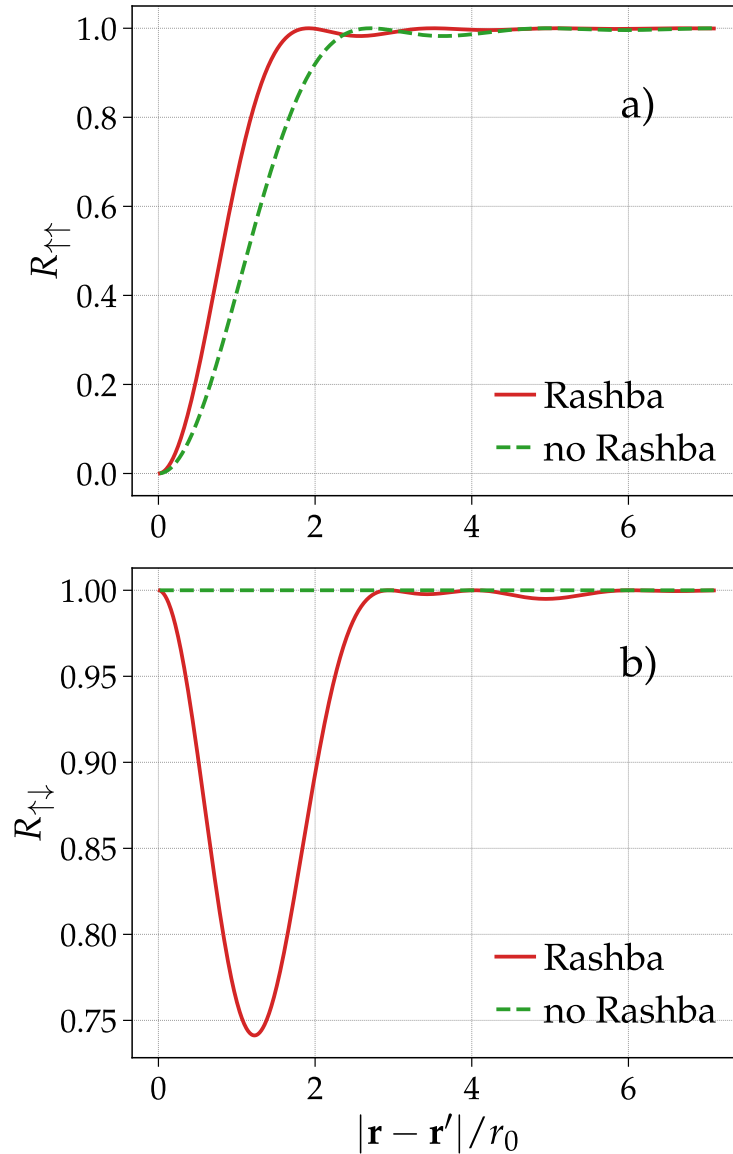


Figura 3.1: Gráficos de la función de correlación de pares $R_{ss'}$ en función de la distancia relativa entre electrones, para un 2DEG con ISO de Rashba (línea sólida) y sin ISO (línea punteada). En (a) los spins de los electrones son paralelos, mientras que en (b) los spins son antiparalelos.

límite de densidad infinita, $R_{\uparrow\downarrow}^{(R)} = R_{\uparrow\downarrow}^{(NR)} = 1$, y $R_{\uparrow\uparrow}$ será uno en todas partes, excepto en el punto donde $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, respetando el principio de exclusión de Pauli.

3.2.1. Justificación de la Función de Correlación de Pares

En esta Sección vamos a mostrar porque los efectos encontrados para la función de correlación de pares del 2DEG con ISO de Rashba [Eq. 3.16], no son producto de utilizar

una base arbitraria. Vamos a justificar porque la base elegida, $\{|\phi_{\mathbf{k},s}\rangle\}$, con $\mathbf{k} \in \mathbb{R}^2$ y $s = 0, 1\}$, para escribir los operadores de campo es la que da sentido físico a la función de correlación de pares. Para esto partimos de otra función de correlación de pares que a primera vista parece más natural, esta es

$$R_{\gamma\gamma'} = \langle \Phi_0 | \hat{\Psi}_{\gamma'}^\dagger(\mathbf{r}') \hat{\Psi}_\gamma^\dagger(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_\gamma(\mathbf{r}) \hat{\Psi}_{\gamma'}(\mathbf{r}') | \Phi_0 \rangle, \quad (3.17)$$

donde $\hat{\Psi}_\gamma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_k \psi_{k\gamma}^*(\mathbf{r}) c_{k\gamma}^\dagger$, y la base utilizada son las autofunciones del Hamiltoniano de Rashba de partícula única. Aquí, γ es el número cuántico que se utiliza en la Ec. (2.3) para etiquetar las dos ramas de energía. Al calcular esta función, obtenemos

$$R_{\gamma\gamma'} = 1 - \delta_{\gamma\gamma'} \frac{\pi^2 H_0^2 J_1^2 - 2\pi^2 H_0 H_1 J_0 J_1 + \pi^2 H_1^2 J_0^2 + 4J_1^4}{k_F^{\gamma^2} |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2}, \quad (3.18)$$

donde las funciones de Struve y Bessel se evalúan en $k_F^\gamma |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Es claro que no hay correlación para valores opuestos de γ y γ' ($R_{+-} = R_{-+} = 1$). Además, hay dos correlaciones diferentes no triviales, R_{++} y R_{--} , como se muestra en la Figura 3.2. La densidad utilizada para esta figura fue mayor que la utilizada en la Figura 3.1 de forma que R_{++} sea comparable con R_{--} .

La diferencia de tamaño entre R_{++} y R_{--} surge del hecho de que para construir R_{++} se utilizan operadores de campo que suman todos los estados con $\gamma = +$, correspondientes a todos los estados en el espacio de momentos dentro del disco de radio k_F^+ , que es más pequeño que el disco utilizado para construir R_{--} ($k_F^+ < k_F^-$). Tener menos estados de momento en la suma corresponde a un estado menos localizado en posición, lo que resulta en una mayor superposición en la función de onda de los electrones, y por lo tanto, un mayor hueco de intercambio. Esta función de correlación exhibe un comportamiento similar al de un 2DEG sin ISO Rashba, en el sentido de que no muestra correlaciones para valores opuestos de γ . Sin embargo, aunque es matemáticamente correcta, no tiene la interpretación física de la función de correlación de pares, que representa la probabilidad de encontrar un electrón en una posición y spin específicos, dado que hay otro electrón en una posición diferente con spin igual u opuesto. Esto se debe a que el número cuántico γ no contiene información sobre el estado de spin de un electrón creado con $\hat{\Psi}_\gamma^\dagger(\mathbf{r})$.

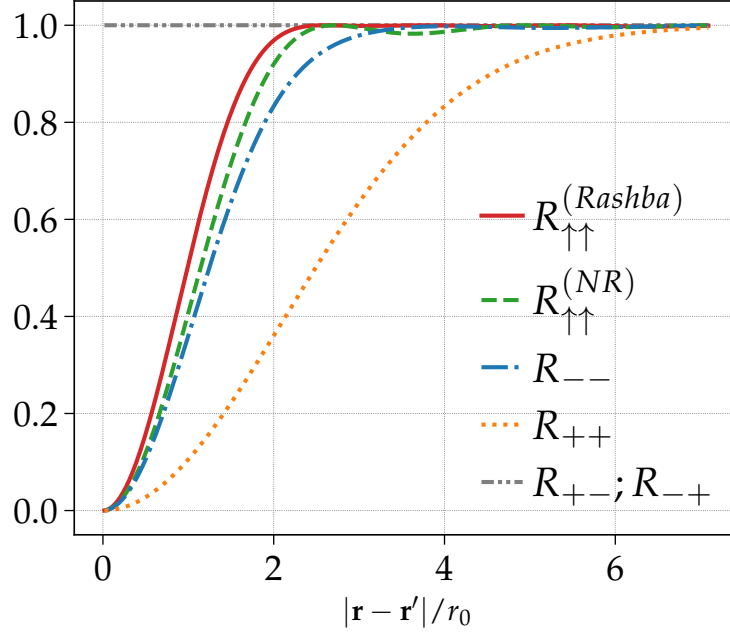


Figura 3.2: Gráficos de la función de correlación de pares $R_{s's'}$ en función de la distancia relativa entre electrones, para un 2DEG con SOC Rashba (línea sólida), y sin SOC (línea discontinua), y también la función $R_{\gamma\gamma'}$ para todas las combinaciones de γ y γ' .

También hay un problema con $R_{\gamma\gamma'}$ con respecto a una regla de suma importante que la función de correlación de pares debe satisfacer (ver Apéndice 4 de Ref. [38]). La regla de suma se expresa como

$$\int n(\mathbf{r})[R(\mathbf{r}) - 1]d\mathbf{r} = \int h(\mathbf{r})d\mathbf{r} = -1, \quad (3.19)$$

con $h = n(R - 1)$, y R definido como

$$R = \sum_{s_1 s_2} \frac{R_{s_1 s_2} n_{s_1} n_{s_2}}{n^2}. \quad (3.20)$$

Calculamos esta regla de suma numéricamente para la función de correlación de pares obtenida a partir de la matriz de densidad de la Ec. (3.11) y para la definida en la Ec. (3.18); los resultados fueron -0.99993 y -2.0279, respectivamente. Por lo tanto la función de correlación de pares [Eq. 3.16] es la única que tiene sentido físico y la que va dar consecuencias físicas que en principio pueden ser medidas experimentalmente.

3.2.2. Medición experimental

En principio, la función de correlación de pares tiene efectos medibles. Aunque observar directamente R puede ser complicado, es posible medir el factor de estructura estático del gas de electrones, el cual se puede calcular a partir de R utilizando

$$S(q) = \frac{\langle \hat{n}_{-\mathbf{q}} \hat{n}_{\mathbf{q}} \rangle}{N} = 1 + n \int (R(r) - 1) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}, \quad (3.21)$$

y su versión resuelta en spin

$$S_{ss'}(q) = \frac{\langle \hat{n}_{-\mathbf{q},s} \hat{n}_{\mathbf{q},s'} \rangle}{N} = \frac{n_s}{n} + \frac{n_s n_{s'}}{n} \int (R_{ss'}(r) - 1) e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}. \quad (3.22)$$

Ambas versiones del factor de estructura van a presentar diferencias para el 2DEG con y sin ISO de Rashba. Sin embargo, la versión resuelta en spin tendría una diferencia significativa ya que $S_{\uparrow\downarrow}^{(\text{NR})} = 0$, lo que significa que no hay características, en contraste con el caso con ISO de Rashba, donde encontraríamos una estructura no trivial en $S_{\uparrow\downarrow}^{(\text{R})}$. Un problema al medir esta cantidad es que no hemos tenido en cuenta las correlaciones inducidas por la interacción de Coulomb. Estas correlaciones afectarían considerablemente tanto a $S_{\uparrow\uparrow}$ como a $S_{\uparrow\downarrow}$. Este efecto debe tenerse en cuenta para discriminar adecuadamente las correlaciones de intercambio y Coulomb. Pueden calcularse utilizando el método de Monte Carlo cuántico, como se hace en la Ref. [41]. El factor de estructura resuelto en spin para un gas de Fermi ha sido medido utilizando la espectroscopia de Bragg [42]. Sin embargo, hasta donde sabemos, no se ha realizado ningún experimento de este tipo para un 2DEG con interacción de Rashba. Una medición experimental del factor de estructura estático resuelto en spin podría, en principio, mostrar los efectos presentados en este trabajo.

3.3. Medidas de Correlaciones Cuánticas

En la Sección anterior usamos la matriz densidad para obtener la función de correlación de pares [Ec. 3.16]. Esta es útil para comprender las consecuencias de la simetría de intercambio de electrones y cómo pueden surgir correlaciones incluso sin interacciones. Sin embargo, no distingue entre correlaciones clásicas y cuánticas, como el entrelazamiento o el quantum discord. Comprender la naturaleza de las correlaciones de fermiones idénticos sigue siendo un tema de investigación actual [43].

En esta Sección vamos a aplicar medidas modernas de información cuántica para explorar la naturaleza de las correlaciones producidas por la simetría de intercambio. En particular vamos a estudiar dos tipos de correlaciones cuánticas, el entrelazamiento y el quantum discord.

3.3.1. Entrelazamiento

Para cuantificar el entrelazamiento que hay entre dos electrones del 2DEG vamos a utilizar dos medidas, la concurrencia y entrelazamiento de formación [11]. La concurrencia $C(\rho_{AB})$ esta definida como

$$C(\rho_{AB}) = \max\{0, \lambda_1 - \lambda_2 - \lambda_3 - \lambda_4\}, \quad (3.23)$$

donde λ_i son la raíz cuadrada de los autovalores de $\rho\tilde{\rho}$ en orden decreciente. Donde $\tilde{\rho}$ se define como

$$\tilde{\rho} = (\sigma_y \otimes \sigma_y)\rho^*(\sigma_y \otimes \sigma_y). \quad (3.24)$$

Se puede probar que la concurrencia satisface $0 \leq C \leq 1$, siendo 0 un estado puro y 1 un estado máximamente entrelazado. Con esta cantidad se puede definir el entrelazamiento de formación

$$E_f(C) = -\frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} \log_2 \frac{1 + \sqrt{1 - C^2}}{2} - \frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2} \log_2 \frac{1 - \sqrt{1 - C^2}}{2}. \quad (3.25)$$

Esta forma de escribir la formación de entrelazamiento es válida únicamente para el caso de dos qubits, es decir, un sistema bipartito de dos niveles. Nuestro sistema, en el cual consideramos el spin de dos electrones, es esencialmente un par de qubits, por lo tanto, podemos aplicar esta fórmula. Sin embargo, para un estado general, es necesario emplear la definición proporcionada en la Introducción, la cual es más complicada de calcular explícitamente (ver Ec. 1.21).

Antes de aplicar estas medidas, verificamos si la matriz densidad [Ec. (3.11)] presenta entrelazamiento utilizando el criterio de separabilidad de la traspuesta parcial [44, 45]. Este criterio establece que un sistema bipartito de dos niveles es separable si y solo si $\rho^{T_2} \geq 0$, es decir, si todos sus autovalores son mayores o iguales a cero. Aquí, $\rho_{m\mu, n\nu}^{T_2} = \rho_{m\nu, n\mu}$ representa la traspuesta parcial con respecto a la segunda partícula. Calculamos los autovalores de $\rho_R^{T_2}$ y $\rho_{NR}^{T_2}$ y aplicamos este criterio.

Las condiciones que obtenemos para que haya entrelazamiento son $f_1^2 + f_2^2 > \frac{1}{2}$ para el caso con ISO de Rashba y $\tilde{f}_1^2 > \frac{1}{2}$ para el caso sin ISO de Rashba. Por lo tanto, las matrices densidad están entrelazadas para distancias $0 < |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| < r_e$, es decir, a separaciones menores a r_e , dos electrones en el material estarán entrelazados. El radio r_e es diferente para el caso con y sin ISO de Rashba y se calcula a partir de $f_1^2 + f_2^2 = \frac{1}{2}$ y $\tilde{f}_1^2 = \frac{1}{2}$, respectivamente.

Es importante destacar que el hueco de intercambio aún existe para $r > r_e$ (ya que f_1 y f_2 no son igual a cero). Esto indica que deben existir otras correlaciones además del entrelazamiento. Para tener en cuenta todas las correlaciones del sistema, utilizamos la información mutua $I(\rho_{AB})$. Recordamos su definición

$$I(\rho_{AB}) = S(\rho_A) + S(\rho_B) - S(\rho_{AB}), \quad (3.26)$$

donde $S(\rho) = -\text{Tr}(\rho \log_2 \rho)$ y $\rho_A = \text{Tr}_B(\rho_{AB})$.

Para cuantificar la correlación total y el entrelazamiento de las matrices densidad calculamos la información mutua cuántica, la concurrencia y la entrelazamiento de formación. Obtenemos la información mutua cuántica mediante la Eq. (3.26), esta resulta

$$I(\rho^{(R)}) = 2 + \left(\frac{1+c}{4-2c} \right) \log_2 \left(\frac{1+c}{4-2c} \right) + 3 \left(\frac{1-c}{4-2c} \right) \log_2 \left(\frac{1-c}{4-2c} \right), \quad (3.27)$$

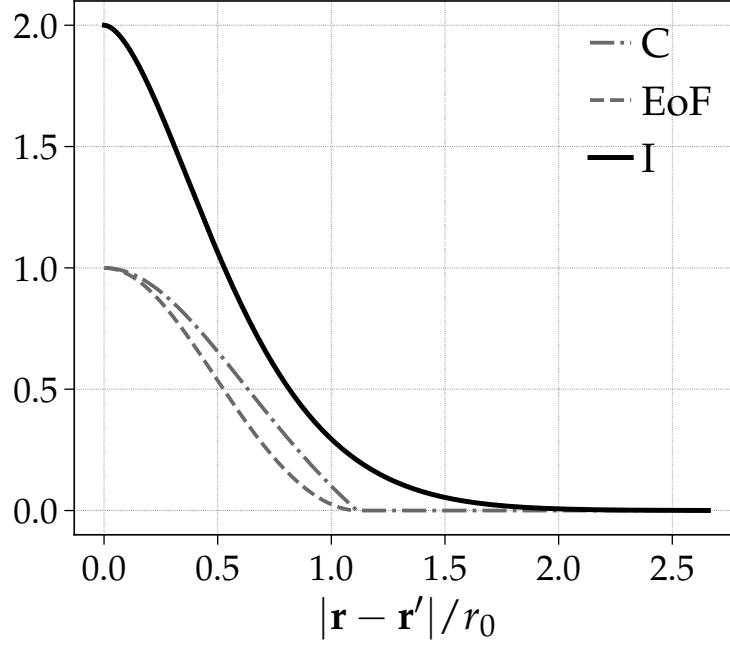


Figura 3.3: Gráficas de la información mutua cuántica I (línea sólida), concurrencia C (línea punteada) y entrelazamiento de formación EoF (línea discontinua) en función de la distancia relativa entre electrones, para un 2DEG con ISO de Rashba.

con $c = f_1^2 + f_2^2$, y para el caso sin ISO resulta

$$I(\rho^{(\text{NR})}) = 2 + \left(\frac{1 + \tilde{f}_1^2}{4 - 2\tilde{f}_1^2} \right) \log_2 \left(\frac{1 + \tilde{f}_1^2}{4 - 2\tilde{f}_1^2} \right) + 3 \left(\frac{1 - \tilde{f}_1^2}{4 - 2\tilde{f}_1^2} \right) \log_2 \left(\frac{1 - \tilde{f}_1^2}{4 - 2\tilde{f}_1^2} \right). \quad (3.28)$$

La concurrencia también se puede obtener fácilmente mediante su definición, esta resulta

$$C(\rho^{(\text{R})}) = \max \left\{ 0, \frac{3|c - 1| - (c + 1)}{2(c - 2)} \right\}, \quad (3.29)$$

mientras que para el caso sin ISO de Rashba obtenemos

$$C(\rho^{(\text{NR})}) = \max \left\{ 0, \frac{3|\tilde{f}_1^2 - 1| - (\tilde{f}_1^2 + 1)}{2(\tilde{f}_1^2 - 2)} \right\}. \quad (3.30)$$

Finalmente, para calcular el entrelazamiento de formación, utilizamos su definición en función de la concurrencia [Ec. 1.21]. Estas medidas para un 2DEG con ISO de Rashba se muestran en la Figura 3.3.

Como se observa en la Figura 3.3, la correlación total tiende a cero cuando $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$, al igual que el hueco de intercambio. Las medidas de entrelazamiento muestran un máximo cuando $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = 0$, el estado que corresponde a este máximo es $|\phi\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$, que

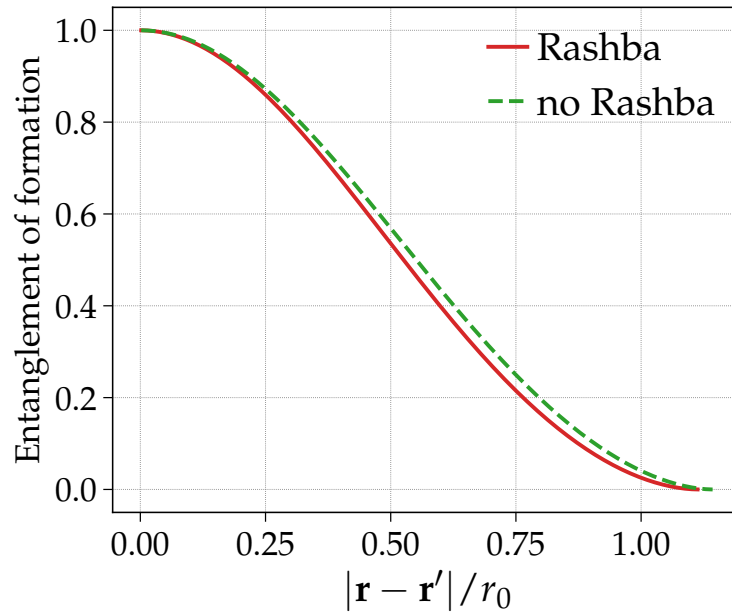


Figura 3.4: Gráfica de la entrelazamiento de formación en función de la distancia relativa entre electrones, para un 2DEG con ISO de Rashba (línea sólida) y sin él (línea discontinua). El ISO de Rashba reduce el entrelazamiento de los spins de los electrones.

es el estado singlete y es el estado máximamente entrelazado para dos spins. A medida que aumenta la distancia entre los electrones, empiezan a aparecer los estados triplete en la matriz densidad, lo que reduce el entrelazamiento general, hasta llegar a r_e , donde el entrelazamiento desaparece. Sin embargo, aún persisten correlaciones en la matriz de densidad hasta que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$, momento en el cual la matriz de densidad se vuelve proporcional a la identidad y todos los estados de la base tienen igual probabilidad.

En el caso sin ISO de Rashba, la condición para el entrelazamiento de los spins de los electrones viene dada por $\tilde{f}_1 > 1/2$. Calculamos la entrelazamiento de formación y comparamos esta medida para ambos sistemas, como se muestra en la Figura 3.4. El entrelazamiento es menor en el sistema con ISO de Rashba y también el radio de entrelazamiento r_e disminuye. Al igual que sucede con el agujero de intercambio, la diferencia entre el entrelazamiento de los dos sistemas desaparece cuando $n \rightarrow \infty$, ya que $f_2 \rightarrow 0$, $f_1 \rightarrow \tilde{f}_1$ y $\rho_R \rightarrow \rho_{NR}$.

3.3.2. Quantum discord

El quantum discord $\mathcal{Q}(\rho_{AB})$ [46, 47] es otro tipo de correlación cuántica que mide la diferencia entre la información mutua cuántica y las correlaciones clásicas. Esta correlación

se ha demostrado que es útil para ciertas tareas de computación cuántica [29, 28] y también es de interés teórico, ya que caracteriza las correlaciones cuánticas utilizando un enfoque diferente al de la clasificación tradicional de estados entrelazados versus separables. También ha sido útil para estudiar el grado de correlación en algunos sistemas de muchos cuerpos [30, 31, 32].

Ahora vamos a recordar brevemente las definiciones dadas en la Sección 1.6 de la introducción. Las correlaciones clásicas [48, 49, 50] se definen de la siguiente forma

$$C(\rho^{AB}) = \max_F [S(\rho_A) - \sum_k p_k S(\rho_A^{(k)})], \quad (3.31)$$

donde $\rho_A^{(k)}$ es el estado resultante de realizar una medición F_k del tipo POVM sobre el subsistema B y tomar la traza sobre este. Su definición matemática es

$$\rho_A^{(k)} = \frac{1}{p_k} \text{Tr}_B [\rho_k] = \frac{1}{p_k} \text{Tr}_B [(I \otimes F_k) \rho (I \otimes F_k)], \quad (3.32)$$

donde $p_k = \text{Tr}[(I \otimes F_k) \rho (I \otimes F_k)]$ para mantener la normalización. Una medición del tipo POVM general para el subsistema B se puede escribir como

$$\{F_k = V \Pi_k V^\dagger, k = 0, 1\} \quad (3.33)$$

donde $\Pi_k = |k\rangle\langle k|$ es un proyector en la base $\{|0\rangle, |1\rangle\}$, y $V \in \text{SU}(2)$

$$V = tI + i\vec{y}\vec{\sigma} \quad (3.34)$$

donde $t \in \mathbb{R}$ y $\vec{y} = (y_1, y_2, y_3) \in \mathbb{R}^3$ tal que

$$t^2 + y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 = 1. \quad (3.35)$$

La maximización involucrada en el cálculo de las correlaciones clásicas [Ec. 3.31] resulta complicada para un estado bipartito general de dos niveles, sin embargo, algunos casos más simples han sido resueltos analíticamente [51, 52]. Para nuestro sistema, la matriz densidad [Ec. 3.11] tiene dos parámetros, f_1 y f_2 . Ya hemos calculado la información mutua cuántica [Ec. 3.27], por lo que necesitamos calcular las correlaciones clásicas [Ec. 3.31] para obtener

el quantum discord. Primero escribimos la matriz densidad en términos de las matrices de Pauli:

$$\rho = \frac{I}{4} + \frac{1}{4-2c} \left[\frac{-f_1^2 + f_2^2}{2} (\sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_z \otimes \sigma_z) - \frac{f_1^2 + f_2^2}{2} \sigma_y \otimes \sigma_y + f_1 f_2 (-\sigma_x \otimes \sigma_z + \sigma_z \otimes \sigma_x) \right]. \quad (3.36)$$

Ahora vamos a calcular la matriz densidad ρ_k después de una medición en el subsistema B, y la probabilidad p_k para calcular las correlaciones clásicas

$$p_k \rho_k = (I \otimes F_k) \rho (I \otimes F_k) = [I \otimes (V \Pi_k V^\dagger)] \rho [I \otimes (V \Pi_k V^\dagger)], \quad (3.37)$$

usando las relaciones

$$V^\dagger \sigma_x V = (t^2 + y_1^2 - y_2^2 - y_3^2) \sigma_x + 2(ty_3 + y_1 y_2) \sigma_y + 2(y_1 y_3 - ty_2) \sigma_z \quad (3.38)$$

$$V^\dagger \sigma_y V = 2(-ty_3 + y_1 y_2) \sigma_x + (t^2 + y_2^2 - y_1^2 - y_3^2) \sigma_y + 2(ty_1 + y_2 y_3) \sigma_z \quad (3.39)$$

$$V^\dagger \sigma_z V = 2(ty_2 + y_1 y_3) \sigma_x + 2(-ty_1 + y_2 y_3) \sigma_y + (t^2 + y_3^2 - y_1^2 - y_2^2) \sigma_z \quad (3.40)$$

con $\Pi_0 \sigma_z \Pi_0 = \Pi_0$, $\Pi_1 \sigma_z \Pi_1 = -\Pi_1$ y $\Pi_k \sigma_j \Pi_k = 0$ para $j = x, y$, obtenemos

$$p_k \rho_k = \frac{1}{4} \left[I + \frac{1}{1-c/2} \left[\left(\frac{-f_1^2 + f_2^2}{2} z_1 - f_1 f_2 z_3 \right) \sigma_x - \frac{f_1^2 + f_2^2}{2} z_2 \sigma_y + \left(\frac{-f_1^2 + f_2^2}{2} z_3 + f_1 f_2 z_1 \right) \sigma_z \right] \right] \otimes V \Pi_k \sigma_z \Pi_k V^\dagger \quad (3.41)$$

donde definimos

$$z_1 = 2(-ty_2 + y_1 y_3) \quad (3.42)$$

$$z_2 = 2(ty_1 + y_2 y_3) \quad (3.43)$$

$$z_3 = (t^2 + y_3^2 - y_1^2 - y_2^2). \quad (3.44)$$

Tomando la traza de ρ_k obtenemos $p_0 = p_1 = \frac{1}{2}$. Ahora trazando sobre el subsistema B obtenemos $\rho_A^{(k)}$ y diagonalizando podemos obtener la entropía condicional

$$S(\rho_A^{(k)}) = p_0 S(\rho_A^{(0)}) + p_1 S(\rho_A^{(1)}) = -\frac{1-\theta}{2} \log_2 \frac{1-\theta}{2} - \frac{1+\theta}{2} \log_2 \frac{1+\theta}{2}, \quad (3.45)$$

que se encuentra en función θ que definimos como

$$\theta = \frac{1}{1-c/2} \sqrt{\left(\frac{f_1^2 + f_2^2}{2} \right)^2 (z_1^2 + z_2^2 + z_3^2)} = \frac{c}{2-c}, \quad (3.46)$$

donde usamos que $z_1^2 + z_2^2 + z_3^2 = 1$, y $c = f_1^2 + f_2^2$. La relación termina siendo independiente de la elección de V . Usando la entropía obtenida calculamos las correlaciones clásicas, estas resultan

$$C(\rho) = \frac{1-c}{2-c} \log_2 \frac{2-2c}{2-c} + \frac{1}{2-c} \log_2 \frac{2}{2-c}, \quad (3.47)$$

y usando la información mutua cuántica [Ec. 3.27] obtenemos el quantum discord

$$\begin{aligned} Q(\rho) = & 2 + \left(\frac{1+c}{4-2c} \right) \log_2 \left(\frac{1+c}{4-2c} \right) + 3 \left(\frac{1-c}{4-2c} \right) \log_2 \left(\frac{1-c}{4-2c} \right) \\ & - \frac{1-c}{2-c} \log_2 \left(\frac{2-2c}{2-c} \right) - \frac{1}{2-c} \log_2 \left(\frac{2}{2-c} \right). \end{aligned} \quad (3.48)$$

El quantum discord, la concurrencia y las correlaciones clásicas (C_{cl}) se muestran en la Figura 3.5. A diferencia del entrelazamiento, el quantum discord disminuye suavemente a cero en función de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Las correlaciones clásicas son siempre más pequeñas que el quantum discord. La relación entre el quantum discord y el entrelazamiento es menos clara, pero es interesante que existen estados que son separables (concurrencia cero) y aún tienen quantum discord distinto de cero. Las relaciones entre el quantum discord, la concurrencia y las correlaciones clásicas son cualitativamente iguales a las obtenidas a partir de un estado Werner [51, 52, 53], que es el estado obtenido a partir de la matriz de densidad de un 2DEG sin ISO de Rashba [Ec. 3.15], sin embargo son cuantitativamente distintas.

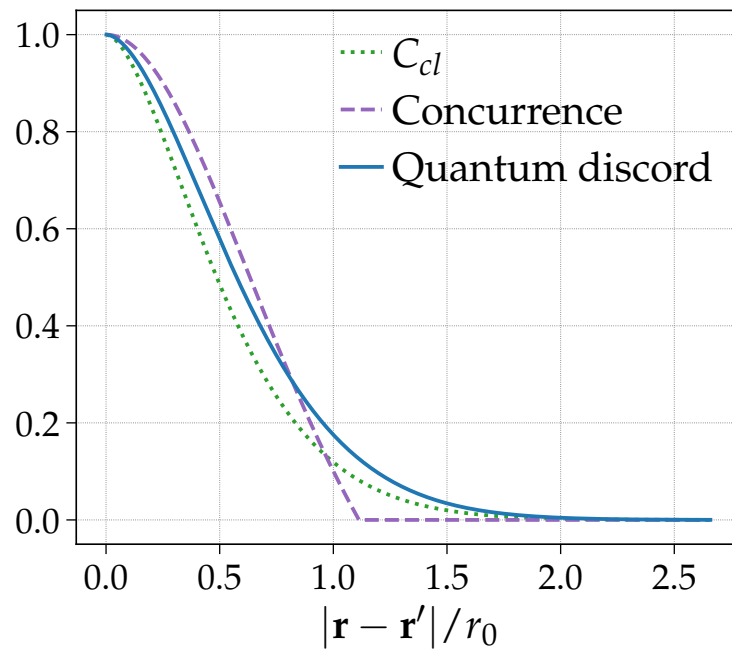


Figura 3.5: Gráfica de las correlaciones clásicas C_{cl} (línea punteada), concurrencia (línea discontinua) y quantum discord (línea sólida) para un 2DEG con ISO de Rashba.

Capítulo 4

Conclusiones

En esta tesis, hemos investigado las correlaciones en un gas de electrones bidimensional (2DEG) con interacción de spin-órbita (ISO) de Rashba. El Hamiltoniano que describe este sistema tiene una solución de partícula única que posee una componente spinorial dependiente del momento de la partícula. Esta característica nos motivó a estudiar el problema de muchas partículas y, en particular, cómo cambian las correlaciones entre los electrones cuando está presente la ISO.

Añadimos la interacción de Coulomb al Hamiltoniano de un 2DEG con ISO de Rashba en segunda cuantización utilizando el modelo de Jellium. Calculamos la corrección de energía a primer orden utilizando teoría de perturbaciones. Este cálculo representa el valor medio del Hamiltoniano de Coulomb en segunda cuantización en el estado fundamental no interactuante de N partículas. Esta corrección en la energía es diferente de cero tanto en el caso con Rashba como en el caso sin Rashba, debido a que los electrones son fermiones y cumplen las restricciones impuestas por la antisimetrización de la función de onda. Este resultado muestra que existen correlaciones entre los electrones incluso cuando no hay interacción Coulombiana. Además, calculamos el propagador libre $G^{(0)}$ para el 2DEG con ISO de Rashba, aunque no continuamos en esa dirección, esto podría utilizarse para tener en cuenta los efectos de la temperatura en las correlaciones del sistema y en el cálculo de correcciones de energía a orden superior, donde el método perturbativo tradicional diverge.

Obtuvimos una expresión analítica para la matriz densidad de dos electrones en el 2DEG con Rashba sin interacción Coulombiana. Utilizando esta matriz, obtuvimos la función de correlación de pares, la cual representa la probabilidad de encontrar un electrón en el estado (\mathbf{r}, s) dado que hay otro en (\mathbf{r}', s') . Para la correlación $R_{\uparrow\uparrow}$, encontramos un resultado similar al 2DEG sin Rashba. Sin embargo, la interacción de Rashba parece disminuir el hueco de intercambio, esta correlación es un efecto directo de la antisimetrización de la función de onda de ambos electrones; cuando las funciones de onda de los electrones se solapan, se observa el hueco de intercambio. La correlación $R_{\uparrow\downarrow}$ en el 2DEG sin Rashba, es constante e igual a uno, es decir, no hay correlación entre los electrones con spin opuestos, esto es de esperarse ya que los electrones se encuentran en estados de spin distintos y, si no hay interacción Coulombiana, sus posiciones son independientes entre sí. Sin embargo, en el caso con ISO de Rashba, emerge una correlación no trivial entre los electrones con spin opuestos, esto se debe a que los electrones, además de estar deslocalizados en posición, también están deslocalizados en spin, a diferencia del caso sin Rashba. Estas correlaciones podrían observarse midiendo el factor de estructura $S(q)$ del gas de electrones y su versión resuelta en spin $S_{ss'}(q)$.

También estudiamos las correlaciones del sistema desde el punto de vista de la información cuántica. Una medida que tiene en cuenta todas las correlaciones del sistema es la información mutua cuántica, la cual considera correlaciones cuánticas y clásicas. Para investigar los diferentes tipos de correlación abordados por la información mutua cuántica, utilizamos dos medidas de correlaciones cuánticas. En primer lugar, consideramos el entrelazamiento entre dos electrones del material. Usando el criterio de la traspuesta parcial, encontramos que existe un disco de radio r_e dentro del cual dos electrones están entrelazados en spin. Utilizando la concurrencia y el entrelazamiento de formación, cuantificamos el grado de entrelazamiento en función de la separación entre los electrones. Cuando la distancia entre los electrones es cero, los electrones se encuentran en el estado singlete (máximamente entrelazado), y a medida que la distancia aumenta, se empieza a mezclar con estados tripletes, disminuyendo su entrelazamiento hasta llegar a $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| = r_e$, donde el entrelazamiento es nulo. A partir de esta distancia, los electrones siguen estando correlacionados, pero su estado conjunto es separable, hasta que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ tiende a infinito, donde la matriz densidad es proporcional a la

identidad y no hay ningún tipo de correlación.

Finalmente, calculamos el quantum discord del sistema, que es una medida de correlaciones cuánticas fundamentalmente diferente al entrelazamiento. Esta mide las correlaciones generadas por la superposición de estados y nos permite estudiar correlaciones fuera del paradigma de estado entrelazado versus separable. Obtuvimos que, a diferencia del entrelazamiento, el quantum discord disminuye suavemente a cero cuando la distancia entre los electrones aumenta. Estas correlaciones muestran que un estado separable no es necesariamente un estado clásico. Como se muestra en la Figura 3.5, la concurrencia es mayor que el quantum discord para pequeñas separaciones de electrones, pero a distancias mayores, el quantum discord se vuelve dominante. La relación entre el quantum discord, la concurrencia y las correlaciones clásicas es cualitativamente la misma que para un estado de Werner, que es el estado obtenido por el operador de densidad de un 2DEG sin ISO de Rashba [Ec. 3.15]. Podemos concluir que la ISO de Rashba cambia cuantitativamente las medidas modernas de correlación. Sin embargo, en el caso del tradicional hueco de intercambio, que distingue la correlación de diferentes proyecciones de spin, encontramos una nueva correlación entre electrones con proyecciones de spin opuestas que no aparece en un 2DEG sin ISO de Rashba.

Por último, a continuación, vamos a enumerar algunas de las posibles líneas de investigación para el futuro:

- Obtener correcciones de orden superior en la energía en el régimen de alta densidad mediante el empleo de funciones de Green, partiendo del propagador libre derivado en el presente trabajo.
- Incorporar la interacción spin-órbita de Dresselhaus en el sistema de electrones bidimensionales (2DEG) junto con la interacción de Rashba, y analizar su efecto en las correlaciones. Este estudio resulta relevante, ya que en ciertos sistemas bidimensionales, la interacción spin-órbita de Dresselhaus compite con la interacción de Rashba, convirtiéndose en un término significativo.
- Utilizar Quantum Monte Carlo para calcular los efectos que introduce la interacción de

Coulomb en la función de correlación de pares. Esto permitiría una mejor comparación de resultados teóricos con mediciones experimentales del factor de estructura resuelto en spin, que esta directamente relacionado con la función de correlación de pares.

- Continuar la investigación de las correlaciones cuánticas, el entrelazamiento y el quantum discord en dos direcciones. Incorporar los efectos de la temperatura en la matriz densidad de dos partículas para determinar la dependencia de las correlaciones cuánticas con respecto a este parámetro. Otro enfoque interesante, aunque más complejo, sería incluir la interacción Coulombiana en la matriz densidad para ver su efecto en el entrelazamiento y el quantum discord de los electrones.

Agradecimientos

Quiero agradecer a Pablo por todo su tiempo y dedicación, por haberme enseñado mucho y guiarme en el mundo científico. A mis padres por su apoyo incondicional y su confianza plena. A mi familia, a mis amigos, a Clara, a los cuentos de Borges, a la música de Atahualpa y a los paisajes de Argentina por hacerme quien soy.

Bibliografía

- [1] Patrick Roblin y Hans Rohdin. *High-Speed Heterostructure Devices: From Device Concepts to Circuit Modeling*. Cambridge University Press, 2002. DOI: 10.1017/CB09780511754593.
- [2] K. v. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper. «New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance». En: *Phys. Rev. Lett.* 45 (6 ago. de 1980), págs. 494-497. DOI: 10.1103/PhysRevLett.45.494. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.45.494>.
- [3] B A Joyce. «Molecular beam epitaxy». En: *Reports on Progress in Physics* 48.12 (dic. de 1985), pág. 1637. DOI: 10.1088/0034-4885/48/12/002. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/48/12/002>.
- [4] John H. Davies. *The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction*. Cambridge University Press, 1997. DOI: 10.1017/CB09780511819070.
- [5] G. Dresselhaus. «Spin-Orbit Coupling Effects in Zinc Blende Structures». En: *Phys. Rev.* 100 (2 oct. de 1955), págs. 580-586. DOI: 10.1103/PhysRev.100.580. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.100.580>.
- [6] Yu A Bychkov y E I Rashba. «Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers». En: *Journal of Physics C: Solid State Physics* 17.33 (nov. de 1984), pág. 6039. DOI: 10.1088/0022-3719/17/33/015. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/17/33/015>.
- [7] Igor Žutić, Jaroslav Fabian y S. Das Sarma. «Spintronics: Fundamentals and applications». En: *Rev. Mod. Phys.* 76 (2 abr. de 2004), págs. 323-410. DOI: 10.1103/RevModPhys.76.323. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.76.323>.

- [8] Supriyo Datta y Biswajit Das. «Electronic analog of the electro-optic modulator». En: *Applied Physics Letters* 56.7 (feb. de 1990), págs. 665-667. ISSN: 0003-6951. DOI: 10.1063/1.102730. eprint: https://pubs.aip.org/aip/apl/article-pdf/56/7/665/7775941/665_1_online.pdf. URL: <https://doi.org/10.1063/1.102730>.
- [9] S. Bandyopadhyay y M. Cahay. *Introduction to spintronics*. CRC Press, 2020.
- [10] Charles H. Bennett et al. «Concentrating partial entanglement by local operations». En: *Phys. Rev. A* 53 (4 abr. de 1996), págs. 2046-2052. DOI: 10.1103/PhysRevA.53.2046. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.53.2046>.
- [11] William K Wootters. «Entanglement of formation and concurrence.» En: *Quantum Inf. Comput.* 1.1 (2001), págs. 27-44.
- [12] Sam A. Hill y William K. Wootters. «Entanglement of a Pair of Quantum Bits». En: *Phys. Rev. Lett.* 78 (26 jun. de 1997), págs. 5022-5025. DOI: 10.1103/PhysRevLett.78.5022. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.78.5022>.
- [13] Charles H. Bennett y David P. DiVincenzo. «Quantum information and computation». En: *Nature* 404.6775 (mar. de 2000), págs. 247-255. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/35005001. URL: <https://doi.org/10.1038/35005001>.
- [14] T. D. Ladd et al. «Quantum computers». En: *Nature* 464.7285 (mar. de 2010), págs. 45-53. ISSN: 1476-4687. DOI: 10.1038/nature08812. URL: <https://doi.org/10.1038/nature08812>.
- [15] Nicolas Laflorencie. «Quantum entanglement in condensed matter systems». En: *Physics Reports* 646 (2016). Quantum entanglement in condensed matter systems, págs. 1-59. ISSN: 0370-1573. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physrep.2016.06.008>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0370157316301582>.
- [16] Wei Zhang y Ziqiang Wang. *Critical behaviors of the entanglement and participation entropy near the many-body localization transition in a disordered quantum spin chain*. 2019. arXiv: 1908.04039 [cond-mat.str-el].

- [17] Y. Mohdeb et al. «Entanglement properties of disordered quantum spin chains with long-range antiferromagnetic interactions». En: *Phys. Rev. B* 102 (21 dic. de 2020), pág. 214201. DOI: 10.1103/PhysRevB.102.214201. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.102.214201>.
- [18] Youcef Mohdeb et al. *Entanglement Entropy Growth in Disordered Spin Chains with Tunable Range Interactions*. 2023. arXiv: 2303.02415 [cond-mat.dis-nn].
- [19] Sam Young Cho y Ross H. McKenzie. «Quantum entanglement in the two-impurity Kondo model». En: *Phys. Rev. A* 73 (1 ene. de 2006), pág. 012109. DOI: 10.1103/PhysRevA.73.012109. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.73.012109>.
- [20] Donghoon Kim, Jeongmin Shim y H.-S. Sim. «Universal Thermal Entanglement of Multichannel Kondo Effects». En: *Phys. Rev. Lett.* 127 (22 nov. de 2021), pág. 226801. DOI: 10.1103/PhysRevLett.127.226801. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.226801>.
- [21] Hui Li y F. D. M. Haldane. «Entanglement Spectrum as a Generalization of Entanglement Entropy: Identification of Topological Order in Non-Abelian Fractional Quantum Hall Effect States». En: *Phys. Rev. Lett.* 101 (1 jul. de 2008), pág. 010504. DOI: 10.1103/PhysRevLett.101.010504. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.101.010504>.
- [22] Li-Xia Wei et al. «Entanglement spectrum edge reconstruction and correlation hole of fractional quantum Hall liquids». En: *Phys. Rev. B* 101 (7 feb. de 2020), pág. 075137. DOI: 10.1103/PhysRevB.101.075137. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.101.075137>.
- [23] Blagoje Oblak, Nicolas Regnault y Benoit Estienne. «Equipartition of entanglement in quantum Hall states». En: *Phys. Rev. B* 105 (11 mar. de 2022), pág. 115131. DOI: 10.1103/PhysRevB.105.115131. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.115131>.
- [24] Vlatko Vedral. En: *Open Physics* 1.2 (2003), págs. 289-306. DOI: doi:10.2478/BF02476298. URL: <https://doi.org/10.2478/BF02476298>.

- [25] Sangchul Oh y Jaewan Kim. «Entanglement of electron spins of noninteracting electron gases». En: *Phys. Rev. A* 69 (5 mayo de 2004), pág. 054305. DOI: 10.1103/PhysRevA.69.054305. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.69.054305>.
- [26] J. I. Aranzadi y P. I. Tamborenea. «Quantum correlations of a two-dimensional electron gas with Rashba spin-orbit coupling». En: *Phys. Rev. B* 108 (sep. de 2023), pág. 115408. DOI: 10.1103/PhysRevB.108.115408. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.108.115408>.
- [27] Reinhard F. Werner. «Quantum states with Einstein-Podolsky-Rosen correlations admitting a hidden-variable model». En: *Phys. Rev. A* 40 (8 oct. de 1989), págs. 4277-4281. DOI: 10.1103/PhysRevA.40.4277. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.40.4277>.
- [28] Animesh Datta, Anil Shaji y Carlton M. Caves. «Quantum Discord and the Power of One Qubit». En: *Phys. Rev. Lett.* 100 (5 feb. de 2008), pág. 050502. DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.050502. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.050502>.
- [29] Animesh Datta y Anil Shaji. «Quantum Discord and Quantum Computing - An Appraisal». En: *International Journal of Quantum Information* 9 (sep. de 2011). DOI: 10.1142/S0219749911008416.
- [30] Raoul Dillenschneider. «Quantum discord and quantum phase transition in spin chains». En: *Phys. Rev. B* 78 (22 dic. de 2008), pág. 224413. DOI: 10.1103/PhysRevB.78.224413. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.224413>.
- [31] Yi-Xin Chen y Sheng-Wen Li. «Quantum correlations in topological quantum phase transitions». En: *Phys. Rev. A* 81 (3 mar. de 2010), pág. 032120. DOI: 10.1103/PhysRevA.81.032120. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.81.032120>.
- [32] Xiao Ma et al. «Quantum discord of electron spins of noninteracting electron gases». En: *The European Physical Journal D* 66 (feb. de 2012). DOI: 10.1140/epjd/e2012-20704-6.

- [33] Roland G. Winkler. «Spin-orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems». En: (2003).
- [34] Emmanuel I. Rashba. «Spin currents in thermodynamic equilibrium: The challenge of discerning transport currents». En: *Phys. Rev. B* 68 (24 dic. de 2003), pág. 241315. DOI: 10.1103/PhysRevB.68.241315. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.241315>.
- [35] J. B. Miller et al. «Gate-Controlled Spin-Orbit Quantum Interference Effects in Lateral Transport». En: *Phys. Rev. Lett.* 90 (7 feb. de 2003), pág. 076807. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.076807. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.076807>.
- [36] M A Leontiadou et al. «Experimental determination of the Rashba coefficient in InSb/InAlSb quantum wells at zero magnetic field and elevated temperatures». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 23.3 (ene. de 2011), pág. 035801. DOI: 10.1088/0953-8984/23/3/035801. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/23/3/035801>.
- [37] Gross E K U., E. Runge y O. Heinonen. *Many-particle theory*. Adam Hilger, 1991.
- [38] Gabriele Giuliani y Giovanni Vignale. *Quantum Theory of the Electron Liquid*. Cambridge University Press, 2005. DOI: 10.1017/CB09780511619915.
- [39] Hartmut Haug y Stephan W Koch. *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*. 5th. WORLD SCIENTIFIC, 2009. DOI: 10.1142/7184. eprint: <https://www.worldscientific.com/doi/pdf/10.1142/7184>. URL: <https://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/7184>.
- [40] Christian R. Ast et al. «Giant Spin Splitting through Surface Alloying». En: *Phys. Rev. Lett.* 98 (18 mayo de 2007), pág. 186807. DOI: 10.1103/PhysRevLett.98.186807. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.186807>.
- [41] B. Tanatar y D. M. Ceperley. «Ground state of the two-dimensional electron gas». En: *Phys. Rev. B* 39 (8 mar. de 1989), págs. 5005-5016. DOI: 10.1103/PhysRevB.39.5005. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.39.5005>.

- [42] S. Hoinka et al. «Dynamic Spin Response of a Strongly Interacting Fermi Gas». En: *Phys. Rev. Lett.* 109 (5 ago. de 2012), pág. 050403. DOI: 10.1103/PhysRevLett.109.050403. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.109.050403>.
- [43] A. P. Majtey, A. Valdés-Hernández y E. Cuestas. «Indistinguishable entangled fermions: basics and future challenges». En: *arXiv e-prints*, arXiv:2303.17539 (mar. de 2023), arXiv:2303.17539. DOI: 10.48550/arXiv.2303.17539. arXiv: 2303.17539 [quant-ph].
- [44] Michał Horodecki, Paweł Horodecki y Ryszard Horodecki. «Separability of mixed states: necessary and sufficient conditions». En: *Physics Letters A* 223.1 (1996), págs. 1-8. ISSN: 0375-9601. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0375-9601\(96\)00706-2](https://doi.org/10.1016/S0375-9601(96)00706-2). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960196007062>.
- [45] Asher Peres. «Separability Criterion for Density Matrices». En: *Phys. Rev. Lett.* 77 (8 ago. de 1996), págs. 1413-1415. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.1413. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.77.1413>.
- [46] Anindita Bera et al. «Quantum discord and its allies: a review of recent progress». En: *Reports on Progress in Physics* 81.2 (dic. de 2017), pág. 024001. DOI: 10.1088/1361-6633/aa872f. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/1361-6633/aa872f>.
- [47] Harold Ollivier y Wojciech H. Zurek. «Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations». En: *Phys. Rev. Lett.* 88 (1 dic. de 2001), pág. 017901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.017901. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.017901>.
- [48] Harold Ollivier y Wojciech H. Zurek. «Quantum Discord: A Measure of the Quantumness of Correlations». En: *Phys. Rev. Lett.* 88 (1 dic. de 2001), pág. 017901. DOI: 10.1103/PhysRevLett.88.017901. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.017901>.
- [49] L Henderson y V Vedral. «Classical, quantum and total correlations». En: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 34.35 (ago. de 2001), pág. 6899. DOI: 10.1088/0305-4470/34/35/315. URL: <https://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/34/35/315>.

- [50] V. Vedral. «Classical Correlations and Entanglement in Quantum Measurements». En: *Phys. Rev. Lett.* 90 (5 feb. de 2003), pág. 050401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.90.050401. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.90.050401>.
- [51] Shunlong Luo. «Quantum discord for two-qubit systems». En: *Phys. Rev. A* 77 (4 abr. de 2008), pág. 042303. DOI: 10.1103/PhysRevA.77.042303. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.77.042303>.
- [52] Mazhar Ali, A. R. P. Rau y G. Alber. «Quantum discord for two-qubit X states». En: *Phys. Rev. A* 81 (4 abr. de 2010), pág. 042105. DOI: 10.1103/PhysRevA.81.042105. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.81.042105>.
- [53] Xiao San Ma et al. «Tripartite entanglement of electron spins of noninteracting electron gases». En: *Quantum Information Processing* 12.4 (abr. de 2013), págs. 1807-1818. ISSN: 1573-1332. DOI: 10.1007/s11128-012-0495-3. URL: <https://doi.org/10.1007/s11128-012-0495-3>.

Tesis disponible bajo Licencia: Creative Commons, Atribución – No Comercial – Compartir Igual (by-nc-sa) 2.5 Argentina Buenos Aires, 2023