

Interacción Espín-Órbita en Átomos Artificiales

Spin-Orbit Interaction in Artificial Atoms

H.E. Caicedo-Ortiz^{a,b}*, S. T. Perez-Merchancano^c

^aGrupo de Ingeniería y Tecnologías Cuánticas, Facultad de Ingeniería, Corporación Universitaria Autónoma del Cauca, Popayán, Colombia.

^bInstituto de Educación Media Superior del Distrito Federal, Ciudad de México, México.

^cGrupo Senuma, Departamento de Física, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.

Recibido: 15/7/2011; revisado: 16/11/2011; aceptado: 28/02/2012.

Resumen

Se presentan los resultados de la interacción espín órbita entre el momento magnético dipolar de espín y el campo magnético interno de un átomo artificial de Hidrógeno o punto cuántico con un único electrón, sobre el cual actúa un campo magnético externo. Los resultados obtenidos confirman que este tipo de interacciones tienen poca relevancia en la implementación de compuertas cuánticas.

Palabras Claves: Interacción Espín-Orbita, Átomos Artificiales, Puntos Cuánticos, Compuertas Cuánticas.

Abstract

We present the results of the spin-orbit interaction between the spin dipole magnetic moment and the magnetic field inside an Hydrogen atom artificial or quantum dot with a single electron, which acts on an external magnetic field. The results confirm that such interactions have little relevance to the implementation of quantum gates.

Keywords: Spin-Orbit Interaction, Artificial Atoms, Quantum Dots, Quantum Gates.

1. Introducción

En los últimos años, los procesos de reducción de las dimensiones de los materiales semiconductores en los cuales están localizados algunos electrones, es decir, confinamiento cuántico, han atraído ampliamente el interés en la comunidad científica, ello debido a las nuevas propiedades ópticas y electrónicas que surgen de este proceso de miniaturización, dando lugar a la aparición de una nueva área denominada física de sistemas de baja dimensionalidad. En ella se estudian sistemas de dimensiones entre 100nm y 10nm, tales como los átomos artificiales o puntos cuánticos[1].

En este trabajo se estudian los efectos del acoplamiento espín-órbita para un átomo artificial de hidrógeno (punto cuántico con un electrón). Inicialmente se describe este acoplamiento en la forma más gene-

ral la cual es aplicable a cualquier sistema de un átomo monoeléctrico. Posteriormente, usando teoría de perturbaciones, se evalúa esta cantidad para el caso de un punto cuántico con un electrón y estudiamos sus potenciales efectos en la implementación de compuertas cuánticas.

2. Interacción Espín-Orbita en un Átomo con un Electrón

Consideremos un sistema como el descrito en la figura 1.a. Según este esquema, es posible entender el origen del campo magnético que experimenta un electrón en un átomo monoeléctrico si se considera el movimiento del núcleo desde el punto de vista del electrón.

* hernando.caicedo@uni-autonoma.edu.co

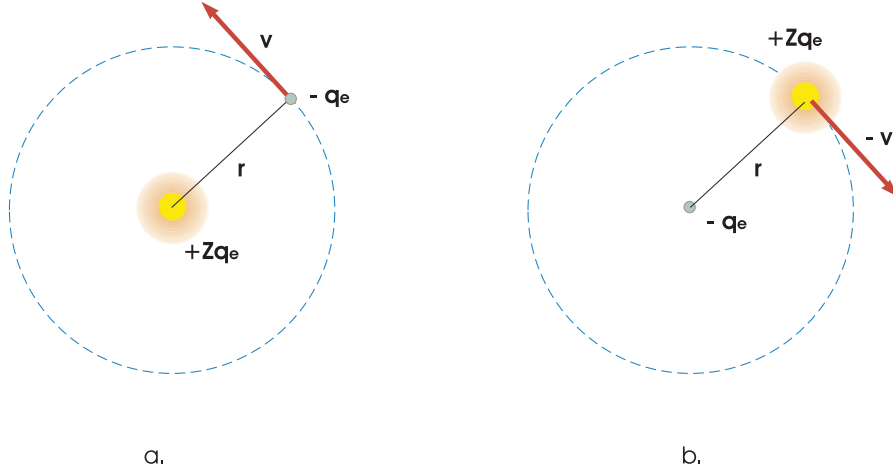


Figura 1. a. Movimiento del electrón según el sistema de referencia ubicado en el núcleo. b. Movimiento del núcleo según el sistema de referencia ubicado en el electrón.

En un sistema de referencia fijo con respecto al electrón, el núcleo cargado ($+Zq_e$) se mueve alrededor del electrón y este, de hecho, se encuentra localizado en el interior de una espira de corriente la cual produce un campo magnético.

En la figura 1.b el núcleo cargado que se mueve con velocidad $-\mathbf{v}$ constituye una densidad lineal de corriente dada por:

$$\mathbf{j} = -zq_e \mathbf{v}. \quad (1)$$

De acuerdo con la Biot-Savart, esta densidad de corriente produce un campo magnético \mathbf{B}_{int} en la posición del electrón donde:

$$\mathbf{B}_{int} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{j} \times \mathbf{r}}{r^3} = \frac{-zq_e \mu_0}{4\pi} \frac{\mathbf{v} \times \mathbf{r}}{r^3}. \quad (2)$$

es conveniente expresar esta relación en términos del campo eléctrico \mathbf{E}_{int} que actúa sobre el electrón. Según la Ley de Coulomb:

$$\mathbf{E}_{int} = \frac{zq_e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3} \quad (3)$$

de estas dos últimas ecuaciones se tiene:

$$\mathbf{B}_{int} = -\frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}_{int} \quad (4)$$

donde $c = 1/\sqrt{\epsilon_0\mu_0}$. Aquí \mathbf{B}_{int} es el campo magnético experimentado por el electrón cuando este se mueve a una velocidad \mathbf{v} relativa al núcleo dentro de un campo eléctrico \mathbf{E}_{int} producido por el propio núcleo. Esta relación es de validez general y de igual forma puede ser obtenida a través de condiciones relativistas.

El electrón y su momento magnético dipolar de espín pueden tener diferentes orientaciones en el campo magnético interno del átomo y su energía potencial es diferente para cada una de estas orientaciones. Considerando la energía potencial de interacción entre el espín del electrón y el campo magnético \mathbf{B}_{int} de la forma:

$$\hat{H}_{s-o} = -\mu_s \cdot \mathbf{B}_{int}, \quad (5)$$

tomando en cuenta que $\mu_s = \frac{g_s \mu_B \hat{S}}{\hbar}$, al reemplazar el campo \mathbf{B}_{int} por la ecuación (4) se obtiene:

$$\hat{H}_{s-o} = -\frac{g_s \mu_B \hat{S}}{\hbar c^2} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{E}_{int}) \quad (6)$$

y es el hamiltoniano que representa la interacción espín órbita para un átomo monoeléctrico y en el cual se observa una dependencia directa del campo eléctrico debido al núcleo. Otra forma de expresar esta ecuación es empleando \hat{L} , por lo cual el término toma la forma

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{1}{\mu^2 c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \left(\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \right), \quad (7)$$

por lo cual el hamiltoniano de Espín Órbita queda expresado en función de $U(r)$ que es la energía potencial asociada al sistema y esta ecuación se ha evaluado en un sistema de referencia en el cual el electrón está en reposo.

Lo interesante en este modelo es medir la energía en el sistema de referencia original, en el cual el núcleo está en reposo (aproximación Borh-Oppenheimer[2]). Debido al efecto llamado *precesión de Thomas*[3], en la transformación de velocidades relativistas al retomar el sistema de referencia del núcleo resulta una reducción

de la energía potencial de orientación por un factor de 2[3], por lo tanto:

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{1}{2\mu^2 c^2} \hat{S} \cdot \hat{L} \left(\frac{1}{r} \frac{dU(r)}{dr} \right), \quad (8)$$

donde r es la distancia de separación entre núcleo y electrón, y μ corresponde a la masa del electrón y que para el caso de un punto cuántico de GaAs con un electrón, este término representa la masa efectiva del electrón.

Considerando que $\hat{S} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}$, donde σ representa las matrices de Pauli y considerando una función $\varphi(r)$ tal que $\nabla\varphi(r) = -\frac{\nabla U(r)}{q_e}$, la ecuación (8) queda finalmente representada por:

$$\hat{H}_{s-o} = \frac{q_e \hbar}{4\mu^2 c^2} (\nabla\varphi(r) \times \hat{\sigma}) \cdot \hat{p}, \quad (9)$$

que representa la interacción espín órbita.

$$\begin{aligned} \hat{H}_{s-o} = & k \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{A}^+\hat{A} - \hat{B}^+\hat{B} + \hat{A}^+\hat{B}^+ - 1 \right) \hat{\sigma}_z + \lambda \left(\hat{B}^+\hat{B} - \hat{A}^+\hat{A} \right) \hat{\sigma}_z \\ & - Q \left(\hat{B} - \hat{A} + \hat{B}^+ - \hat{A}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z - iQ \left(\hat{A}^+ + \hat{B}^+ - \hat{A} - \hat{B} \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z \\ & + R \left(\hat{A} + \hat{B} + \hat{A}^+ + \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_y \hat{p}_z + iR \left(\hat{B} - \hat{A} + \hat{A}^+ - \hat{B}^+ \right) \hat{\sigma}_x \hat{p}_z, \end{aligned} \quad (11)$$

donde $\hat{A}, \hat{A}^+, \hat{B}, \hat{B}^+$ son los operadores de creación y destrucción. Debido a que la inclusión de la interacción espín-órbita complica el hamiltoniano total del punto cuántico con un electrón bajo un campo magnético externo considerando los efectos de espín y tomando en cuenta que el efecto debido a \hat{H}_{s-o} es muy pequeño, es posible solucionar este problema utilizando la *Teoría de Perturbaciones*[4]. En este modelo, el primer paso es la resolución exacta del problema simplificado. El segundo paso es el cálculo aproximado de las correcciones determinadas por los términos que se han prescindido en el problema simplificado y que en este caso es

3. Energía debida al acoplamiento espín-órbita en un punto cuántico

Suponiendo que el hamiltoniano de la interacción espín-órbita es una pequeña perturbación a nuestro sistema de un punto cuántico con un electrón bajo la acción de un campo magnético externo, es posible determinar el aporte energético al sistema. Para calcularlo, se hace uso de la teoría de perturbaciones, considerando para ello que el átomo artificial monoeléctrico se encuentra en el estado fundamental y no presenta degenerancia. Este electrón se ubica en la banda de conducción del GaAs, de tal forma que su energía potencial está representada por:

$$U(r) = \left[\frac{1}{2} \omega_c (\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) + \frac{1}{2} \mu \Omega^2 (\hat{x}^2 + \hat{y}^2) \right] \quad (10)$$

A partir de este término, se construye la ecuación (9), obteniendo:

\hat{H}_{s-o} , para ello supongamos que el hamiltoniano total de nuestro sistema está dado de la forma:

$$\hat{H}_T = \hat{H} + \mathfrak{S} \hat{H}_{s-o} \quad (12)$$

donde \hat{H}_{s-o} que es el acoplamiento espín-órbita representa una pequeña corrección o perturbación al hamiltoniano \hat{H} . Esta perturbación de primer orden para el sistema en un estado no degenerado está representada por:

$$E_{1p} = \langle \psi' | \mathfrak{S} \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle, \quad (13)$$

tomando $\mathfrak{S} = 1$ se tiene:

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = & k \langle \psi' | \hat{A}\hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{A}^+\hat{A} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{B}^+\hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle \\ & + k \langle \psi' | \hat{A}^+\hat{B}^+ \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - k \langle \psi' | \hat{\sigma}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | \lambda \hat{B}^+\hat{B} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle \\ & - \langle \psi' | \lambda \hat{A}^+\hat{A} \hat{\sigma}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{B} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{A} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle \\ & + \langle \psi' | Q \hat{B}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | Q \hat{A}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | iQ \hat{A}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\ & + \langle \psi' | iQ \hat{B}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | iQ \hat{A} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | iQ \hat{B} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\ & + \langle \psi' | R \hat{A} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | R \hat{B} \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | R \hat{A}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle \\ & + \langle \psi' | R \hat{B}^+ \hat{\sigma}_y \hat{p}_z | \psi \rangle + \langle \psi' | iR \hat{B} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | iR \hat{A} \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle \\ & + \langle \psi' | iR \hat{A}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle - \langle \psi' | iR \hat{B}^+ \hat{\sigma}_x \hat{p}_z | \psi \rangle, \end{aligned} \quad (14)$$

donde:

$$|\psi\rangle = |\varphi_{n_A, n_B}\rangle \otimes |\varphi_{n_z}\rangle \otimes |\varphi_{m_z}\rangle.$$

Debido a que la acción de los operadores inmersos en

\hat{H}_{s-o} solo se realiza sobre cada uno de los autoestados asociados, la evaluación de la ecuación (13) se simplifica considerablemente. En forma explícita la acción de los operadores sobre cada subespacio es:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{n'_A} | \hat{A} | \varphi_{n_A} \rangle &= \sqrt{n_A} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A-1}}; & \langle \varphi_{n'_B} | \hat{B} | \varphi_{n_B} \rangle &= \sqrt{n_B} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B-1}} \\ \langle \varphi_{n'_A} | \hat{A}^+ | \varphi_{n_A} \rangle &= \sqrt{n_A + 1} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A+1}}; & \langle \varphi_{n'_B} | \hat{B}^+ | \varphi_{n_B} \rangle &= \sqrt{n_B + 1} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B+1}} \\ \langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_x | \varphi_{m_z} \rangle &= \delta_{\varphi_{m'_z}, -\varphi_{m_z}}; & \langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_y | \varphi_{m_z} \rangle &= im_z \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \\ \langle \varphi_{m'_z} | \hat{\sigma}_x | \varphi_{m_z} \rangle &= m_z \delta_{\varphi_{m'_z}, -\varphi_{m_z}}; & \langle \varphi_{n'_z} | \hat{p}_z | \varphi_{n_z} \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Si se observa con detenimiento de la última relación, todos los términos de (14) sobre las cuales actúa \hat{p}_z son

iguales a cero, por lo tanto la corrección de primer orden al hamiltoniano \hat{H} es:

$$\begin{aligned} \langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle &= km_z \sqrt{n_A} \sqrt{n_B} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A-1}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B-1}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\ &\quad - km_z n_A \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\ &\quad - km_z n_B \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\ &\quad + km_z \sqrt{n_A + 1} \sqrt{n_B + 1} \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A+1}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B+1}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\ &\quad - km_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}} \\ &\quad + \lambda n_B m_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} - \lambda n_A m_z \delta_{\varphi_{n'_A}, \varphi_{n_A}} \delta_{\varphi_{n'_B}, \varphi_{n_B}} \delta_{\varphi_{m'_z}, \varphi_{m_z}} \delta_{\varphi_{n'_z}, \varphi_{n_z}}. \end{aligned} \quad (15)$$

4. Resultados

Observemos como es el efecto que describe el término (15) sobre los estados de más baja energía, para ello es necesario tomar $n_a = n_b = 0$ y que además $|\psi'\rangle = |\psi\rangle$. Por consiguiente la energía debida al acoplamiento espín órbita en este caso es:

$$\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = -km_z \quad (16)$$

Para determinar cuál es el estado con más baja energía tomando en cuenta que el electrón puede tener dos diferentes orientaciones de espín, se determina la energía del punto sin perturbación. Tomando la masa efectiva

del electron en un punto cuántico de Arsenuro de Galio (GaAs) como $0,067m_e$ y el cual está sometido a un potencial de confinamiento $\hbar\omega_0 = 3\text{meV}$ [5], bajo un campo $B = 1\text{T}$, la energía para este sistema donde $m_z = 1$ es $E_{0,0,1,1} = 10,0094 \times 10^{-3}\text{eV}$ mientras que para $m_z = -1$ es $E_{0,0,1,-1} = 8,28149 \times 10^{-3}\text{eV}$, por lo tanto el estado de mas baja energía es para $m_z = -1$. La interacción espín órbita al ser evaluada para este estado es $\langle \psi' | \hat{H}_{s-o} | \psi \rangle = 5,7694 \times 10^{-10}\text{eV}$, es decir, existe una diferencia de siete ordenes de magnitud entre la energía del sistema y la perturbación debida al acoplamiento espín órbita.

La gráfica 2 representa el comportamiento de energía debida al acoplamiento espín órbita para el estado de mínima energía. Como se puede apreciar, el comportamiento de la perturbación en función del campo magnético aplicado sobre el sistema es de tipo polinomial. Un hecho muy relevante de este resultado es que a pesar de que la interacción espín órbita es el resultado del efecto entre el campo magnético interno del sistema y el espín del electrón, finalmente el término

obtenido en este trabajo indica una relación directa con el campo magnético externo aplicado sobre el sistema. Adicionalmente, el gráfico nos dice que al no existir un campo magnético externo sobre el sistema, los efectos de acoplamiento espín órbita desaparecen.

La omisión de este efecto sobre sistemas que constituyen compuertas cuánticas de dos o más qubits tiene una muy pequeña influencia en la coherencia del espín

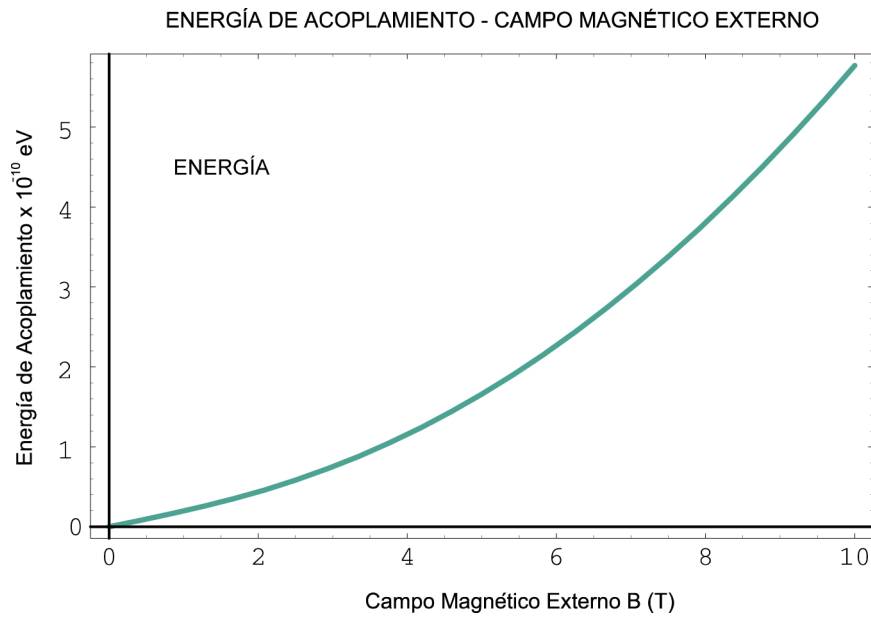


Figura 2. Comportamiento energético de la perturbación debida al acoplamiento espín órbita en función del campo magnético externo.

del electrón, ello debido a que el término de espín órbita depende directamente de la masa efectiva del electrón, la cual es muy pequeña. Si por el contrario, consideramos huecos, los efectos de acoplamiento espín órbita toman una mayor relevancia desde el punto de vista energético y ya no es posible omitirlo [6].

5. Conclusiones

Empleando la teoría de perturbaciones, se logra determinar el acoplamiento espín órbita para un sistema de un punto cuántico confinando un electrón. El término que describe esta interacción para el nivel de mínima energía presenta una dependencia directa con el campo magnético externo aplicado sobre el punto cuántico en la dirección z . Tal dependencia trae consigo que solo el acoplamiento espín órbita exista si sobre el sistema actúa un campo B , de lo contrario, este efecto desaparece. Introduciendo datos reales de puntos cuánticos fabri-

cados experimentalmente, la diferencia entre la energía del sistema sin incluir el acoplamiento espín órbita y esta interacción es de siete ordenes de magnitud menor.

Referencias

- [1] John Davies. *The Physics of Low Dimensional Semiconductor*. Cambridge University Press, 1st edition, 1998.
- [2] Spinel, María Carolina. *Introducción al formalismo de la mecánica cuántica no relativista*. Notas de Clase, Universidad Nacional de Colombia - Bogotá, 1st edition, 2001.
- [3] Eisber, Robert and Resnick, Robert. *Física Cuántica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos y Partículas*. Limusa Noriega Editores, 2002.
- [4] Cohen-Tannoudji, Claude et al. *Quantum Mechanics Vol. II*. Hermann and John Wiley & Sons, 1st edition, 1977.
- [5] Kouwenhoven, L. P. et al. Excitation spectra of circular, few-electron quantum dots. *Science*, 278:1788, 1997.
- [6] Loss, Daniel and DiVincenzo, David P. Quantum computation with quantum dots. *Phys. Rev. A*, 57(120), 1998.