
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA
UNIDAD IZTAPALAPA
DIVISIÓN DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

***Dinámica de la polarización del espín electrónico y
nuclear en trampas paramagnéticas de Ga en GaAsN***

Tesis que presenta:
Víctor Guadalupe Ibarra Sierra
Para obtener el grado de
Doctor en Ciencias (Física)



Casa abierta al tiempo

Asesor: **Dr. Alejandro Kunold Bello**

Jurado Calificador:

Presidente: **Dr. Salvador Antonio Cruz Jiménez**

UAM-I

Secretario: **Dr. Alejandro Kunold Bello**

UAM-A

Vocal: **Dr. Gerardo García Naumis**

IF-UNAM

Vocal: **Dr. José Luis Cardoso Cortés**

UAM-A

Vocal: **Dr. Pedro Pereyra Padilla**

UAM-A

Ciudad de México

Agosto de 2018

*A mi toda mi familia,
en especial a mis padres Bernarda y Pablo.*

RESUMEN

Recientemente las propiedades de espín en muestras de GaAs dopadas con pequeñas cantidades de Nitrógeno han recibido un gran interés debido a la alta polarización del espín alcanzada por los electrones de la banda de conducción bajo excitación óptica de luz circularmente polarizada a temperatura ambiente. La incorporación de átomos de Nitrógeno desplaza a algunos Ga a los sitios intersticiales de la red creando estados localizados en la brecha de la banda prohibida. A estos estados se le conocen como centros de recombinación o trampas paramagnéticas. Debido a las propiedades de los centros de recombinación, estos capturan selectivamente electrones de la banda de conducción dependiendo de su orientación de espín. Este mecanismo origina altas polarizaciones de espín electrónicas y nucleares cuando la muestra es sujeta a bombeo óptico de luz circularmente polarizada.

En esta tesis, estudiamos teóricamente la dinámica de polarización del espín electrónico y nuclear así como el papel desempeñado por la interacción hiperfina entre el electrón y núcleo en las trampas paramagnéticas. Para esto, desarrollamos un modelo de ecuación maestra para el operador matriz de densidad basado en la teoría de sistemas cuánticos abiertos. Este toma en cuenta las interacciones de Zeeman e hiperfina entre el espín electrónico y nuclear de los defectos intersticiales Ga de filtro de espín. Este enfoque nos permite identificar los principales mecanismos de relajación del espín de electrones y núcleos basados en la teoría de relajación de Wangsness–Bloch–Redfield. El actual modelo reproduce correctamente las principales características de los resultados experimentales de la intensidad de la fotoluminiscencia y del grado de polarización del espín de los electrones de la banda de conducción como función del campo magnético y de la excitación óptica. Incluso ha permitido predecir la observación de las oscilaciones coherentes de los electrones y núcleos en las trampas por medio de un esquema de pulso–prueba. El estudio de este tipo de sistemas es importante para diseñar dispositivos espintrónicos que pudieran operar a temperatura ambiente.

ABSTRACT

Recently the spin properties in GaAs samples doped with small amounts of Nitrogen have received great interest because of the large spin polarization achieved by the electrons in the conduction band under optical excitation of circularly polarized light at room temperature. The incorporation of Nitrogen atoms displaces the Ga ones to interstitial places of the lattice creating localized states in the band gap. These states are known as recombination centers or paramagnetic traps. Due to the properties of these recombination centers, they selectively capture electrons from the conduction band depending on their spin orientation. This mechanism originates large electron and nuclear spin polarizations when the sample is subject to circularly polarized optical pumping.

In this thesis, we theoretically study the mechanism of dynamic electronic and nuclear spin polarization as well as the role played by the hyperfine interaction between electrons and nuclei in the paramagnetic traps. To this end, we develop a master equation model for the density matrix based on the theory of open quantum systems. It accounts for the Zeeman and hyperfine interaction between the electronic and nuclear spin of the Ga interstitial spin filtering defects. This approach has allowed us to identify the main mechanisms of spin relaxation for electrons and nuclei based on the Wangsness–Bloch–Redfield relaxation theory. The current model correctly reproduces the main features of the experimental results such as photoluminescence intensity and degree of circular polarization of the conduction band electrons as functions of the magnetic field and excitation power. This model has even allowed to predict the observation of the electronic and nuclear coherent oscillations by means of a pump–probe scheme. The study of this kind of systems is important to design spintronic devices that could operate at room temperature.

AGRADECIMIENTOS

- *Este trabajo se lo dedico principalmente a mi familia: a mis padres Bernarda y Pablo, a mis hermanos Jesús y David.*
- A mi madre, le agradezco su enorme fortaleza en los difíciles problemas de salud. *Gracias Doña Martha!*
- A *Evelyn Huerta Cuevas* y familia por su compañía y cariño.
- A mi asesor *Alejandro Kunold Bello*, le agradezco su gran paciencia, apoyo y consejos en todo momento en la dirección de este trabajo.
- A los profesores Pedro Pereyra Padilla, Gerardo García Naumis, Salvador Antonio Cruz Jiménez y José Luis Cardoso Cortés, por la lectura de esta tesis y sus valiosos comentarios como miembros del jurado de sinodales.
- A los *Koalegas*: Juan Carlos Sandoval, José Luis Cardoso y Alejandro Kunold. Por su amistad y las enormes discusiones realizadas en los diversos temas abordados. *I AM BECAUSE WE ARE!*
- A el profesor Gerardo García Naumis por el apoyo en la etapa final de doctorado.
- A el profesor Pedro Pereyra Padilla le agradezco sus valiosos consejos.
- A los profesores Andréa Balocchi y Thierry Amand de la *Universite de Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO* (Francia) y a los profesores Vlamidir Kalevich, Eugeneous Ivchenko y Leonid Bakaleinikov del *Ioffe Physical-Technical Institute* (Rusia), por la colaboración realizada en el tema central de esta tesis.
- A los profesores Celso Guadalupe Morlan y Cecilio Paredes, por despertar el interés de estudiar Física.
- A María Iseo González Christen por su enorme paciencia y apoyo en los diferentes tramites académicos.

- A la Universidad Autónoma Metropolitana, por el apoyo económico otorgado para realizar los estudios de doctorado.
- A Dalia Marín, Patricia Cruz, Gabriela Duran, Guadalupe Figueroa, Guadalupe Sagaon, Juan Carlos Sandoval, Gustavo Mejía, Julio Hidalgo, Martín Romero, Jairo Villafuerte, Yoshua Bolaños, Daniel Martínez, Ernesto Flores, Pedro Roman, Jorge Ávila, Miguel Maya, Gustavo Gutiérrez, Adolfo Guevara y Damián Méndez, les agradezco su amistad y su apoyo.

ÍNDICE

Resumen	v
Abstract	vii
Agradecimientos	ix
Índice	xi
Índice de figuras	xv
Lista de Acrónimos	xvii
1 Introducción	1
2 Transiciones ópticas y recombinación dependiente del espín (SDR)	11
2.1 Introducción	11
2.2 Transiciones ópticas	11
2.3 Centros de recombinación y mecanismo SDR	15
2.4 Modelo de dos cargas y tres cargas	19
3 Ecuación maestra para la dinámica del espín electrón-núcleo	25
3.1 Introducción	25
3.2 Ecuación maestra	25
3.3 Hamiltoniano: Interacción de Zeeman e hiperfina	28
3.4 Base de operadores	29
3.5 Matriz de densidad y disipador	33
3.5.1 Operador matriz de densidad	34
3.5.2 Disipador	34
3.6 Ecuaciones cinéticas y régimen de onda continua	41

4 Configuración de Faraday y relajación de espín nuclear	45
4.1 Introducción	45
4.2 Mecanismos de relajación de espín nuclear	45
4.3 Tiempos de relajación del espín nuclear	49
4.4 Polarización del espín electrón–núcleo en Ga^{2+} y razón SDR	54
5 Dinámica del espín en centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+}	61
5.1 Introducción	61
5.2 Generalización del modelo	61
5.3 Efecto de los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+}	66
6 Conclusiones y perspectivas	73
6.1 Conclusiones	73
6.2 Perspectivas	76
Apéndices	79
A Campo magnético Overhauser	81
A.1 Origen en metales y semiconductores	81
A.2 Breve descripción teórica	82
B Recombinación dependiente del espín electrón–núcleo en Ga	85
B.1 Recombinación dependiente del espín electrón–núcleo en Ga^{2+}	85
B.2 Recombinación dependiente del espín electrón–núcleo en Ga^{3+}	87
C Teoría de Wangsness–Bloch–Redfield	89
D Interacciones dipolar magnética y cuadrupolar eléctrica	95
D.1 Interacción dipolar magnética	95
D.2 Interacción cuadrupolar eléctrica	96
D.3 Elementos de matriz del disipador dipolar magnético	97
D.4 Elementos de matriz del disipador cuadrupolar eléctrico	98
E Artículos de investigación publicados	101
E.1 Journal of Materials Science: Materials in Electronics (2018)	103
E.2 Physical Review B, 95, 195204 (2017)	107
E.3 Journal of Mathematical Physics, 57, 042104 (2016)	111
E.4 Annals of Physics, 362 (2015) 83–117	115
E.5 Physical Review B 97, 155201 (2018)	119

Bibliografía

123



ÍNDICE DE FIGURAS

1.1	Configuraciones experimentales de Voigt y Faraday en GaAsN	3
1.2	Resultados experimentales en las configuraciones de Voigt y Faraday	4
1.3	Mezcla de estados debido a la interacción hiperfina	6
2.1	Estructura de bandas del GaAs	12
2.2	Transiciones ópticas para GaAs	13
2.3	Espectro de detección por resonancia magnética óptica	16
2.4	Esquema ilustrativo de la excitación óptica bajo luz linealmente polarizada en GaAsN.	17
2.5	Esquema ilustrativo de la excitación óptica bajo luz circularmente polarizada en GaAsN	18
2.6	Resultados teóricos obtenidos del modelo de dos cargas en configuración de Voigt	21
2.7	Esquema ilustrativo de las diferentes tasas de recombinación en los centros de recombinación Ga^{3+}	23
3.1	Espacio del operador matriz densidad	27
3.2	Diagrama esquemático de la transferencia de espín en GaAsN	35
3.3	Esquema ilustrativo de las fluctuaciones del campo magnético y eléctrico en trampas paramagnéticas	39
4.1	Grado de polarización circular en configuración de Faraday	47
4.2	Intensidad de la fotoluminiscencia en configuración de Faraday	48
4.3	Islóneas del mecanismo dipolar magnético	50
4.4	Campo magnético B_{efec} , ξ y ζ como función de la potencia W empleando el mecanismo dipolar	52
4.5	Islóneas y comportamiento de $\xi = P_{\infty}/P_0$ y $\zeta = J_{\infty}/J_0$ como función de W para el mecanismo cuadrupolar eléctrico	53

4.6	Grado de polarización circular del espín para electrones ligados y núcleos de los centros Ga^{2+}	56
4.7	Razón de recombinación dependiente del espín	58
5.1	Esquema ilustrativo de los estados de carga de los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+}	62
5.2	Grado de polarización del espín como función del campo magnético en configuración de Faraday, para diferentes valores de concentración de Ga^{3+}	68
5.3	Intensidad de la fotoluminiscencia como función del campo magnético en configuración de Faraday, para diferentes valores de concentración de Ga^{3+}	69
5.4	Campo magnético B_{efec} , ξ y ζ , como función de W y diferentes valores de concentración de Ga^{3+}	70
6.1	Oscilaciones coherentes en los centros de recombinación de Ga^{2+}	74
A.1	Mediciones experimentales del campo magnético Overhauser en metales y semiconductores	82
C.1	Esquema ilustrativo de un sistema cuántico abierto interaccionando débilmente con sus alrededores	90

LISTA DE ACRÓNIMOS

GaAs	Arseniuro de galio
GaAsN	Arseniuro de galio dopado con Nitrógeno
BC	Banda de conducción
BV	Banda de valencia
TP	Trampa paramagnética
TA	Trampa apareada (Trampa paramagnética con dos electrones en estado de singulete)
PL	<i>Photoluminescence Intensity</i> , por sus siglas en Inglés
SDR	<i>Spin Dependent Recombination</i> , por sus siglas en Inglés
ODMR	<i>Optically Detection Magnetic Resonance</i> , por sus siglas en Inglés
IHF	Interacción hiperfina
HP	Huecos pesados
HL	Huecos ligeros
SO	Huecos <i>split-off</i>
CW	<i>Continuous Wave</i> , por sus siglas en Inglés

LISTA DE ACRÓNIMOS

NSR *Nuclear Spin Relaxation*, por sus siglas en Inglés

SDR_r Razón de recombinación dependiente del espín

INTRODUCCIÓN

La espintrónica, también llamada magnetoelectrónica, es una tecnología que busca utilizar el espín electrónico para mejorar y superar a la electrónica convencional. Ésta se vale de las propiedades del espín y de la carga del electrón en semiconductores y/o metales para diseñar y realizar aplicaciones. Una de las posibles aplicaciones de esta área es la construcción de computadoras cuánticas [1, 2]. Quizá actualmente la aplicación más importante de la espintrónica es el uso de la magnetorresistencia gigante en las cabezas lectoras de discos duros [3]. De forma general, el cambio abrupto en la resistencia eléctrica a través de multicapas de materiales ferromagnéticos y no-magnéticos, cuando se modifica la polarización del espín electrónico (magnetización) en la zonas ferromagnéticas, permitió un aumento notable en la capacidad de almacenamiento y lectura de información en las computadoras convencionales. Sin embargo, elaborar otros dispositivos espintrónicos capaces de *crear, detectar, mantener y controlar* la polarización del espín de los portadores de carga sigue siendo el principal reto a vencer en esta área. Esto se debe principalmente a la relajación del espín y la decoherencia cuántica. Ejemplo de esto son los métodos convencionales para detectar y generar corrientes de polarización de espín en sistemas como: diodos emisores de luz [4], puntos cuánticos [5, 6], nanotubos de carbono [6], semiconductores ferromagnéticos [7] o semiconductores magnéticos diluidos [8]. Dichos métodos poseen importantes inconvenientes debido a que requieren bajas temperaturas y/o campos magnéticos intensos para poder detectar y generar a muy

bajas eficiencias de polarización del espín.

Recientemente las propiedades del espín en muestras a base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ [9–14] dopadas con pequeñas cantidades de Nitrógeno ($x < 3.4\%$) han generado gran interés debido a que alcanzan altas polarizaciones del espín de los electrones en la banda de conducción (BC) bajo luz circularmente polarizada a *temperatura ambiente*. La incorporación de átomos de Nitrógeno desplaza a algunos átomos de Ga a los intersticios de la red y forma estados localizados en la banda prohibida [14]. A estos defectos se les conoce como centros de recombinación, trampas paramagnéticas (TP's) o defectos intersticiales Ga^{2+} . La característica principal de estos defectos es que poseen un electrón ligado con una proyección de espín definida, que por simplicidad denominaremos espín $+1/2$ o $-1/2$. Esta propiedad surge de la configuración electrónica del Ga^{2+} ($[\text{Ar}]3d^{10}4s^14p^0$) que sólo posee un electrón de valencia en el orbital $4s^1$. Debido a esta configuración, las TP's pueden capturar selectivamente un electrón con orientación del espín opuesta a la del electrón en $4s^1$. A este fenómeno se le denomina recombinación dependiente del espín (SDR, Spin Dependent Recombination por sus siglas en Inglés) [11, 12]. Gracias a ésta y a un ciclo de transferencia de espín de los electrones de la BC y las TP's (ver figura 3.2) se consiguen altas intensidades de la fotoluminiscencia (PL, Photoluminescence Intensity por sus siglas en Inglés) y grado de la polarización del espín (P_e^{BC}) cuando la muestra de GaAsN es sometida a bombeo óptico de luz circularmente polarizada [10, 13]. El aumento considerable en la intensidad de la PL y la polarización de los electrones se debe principalmente a que las TP's polarizadas en el espín bloquean la recombinación de los electrones de la BC que poseen la misma polarización de espín, creando así elevadas poblaciones de electrones en la BC y de huecos en la banda de valencia (BV). A éste se le denomina fenómeno de filtro de espín [14]. Estando bloqueado el canal de recombinación vía las TP's, los electrones de la BC se ven forzados a recombinarse bimolecularmente¹ dando lugar a altas intensidades de la PL. La razón entre las intensidades de la PL bajo estimulación circularmente polarizada hacia la derecha o izquierda (J_{\pm}) y la PL bajo luz linealmente polarizada (J_X), $J_{\pm}/J_X = \text{SDR}_r$, permite entonces identificar la SDR ya que en su presencia $\text{SDR}_r > 1$ y en su ausencia $\text{SDR}_r = 1$.

En mayor detalle, el fenómeno de filtro de espín consiste en lo siguiente. Antes de la excitación óptica y en equilibrio termodinámico, la polarización neta del espín en la BC y en las TP's es igual a cero. Las poblaciones de las TP's con electrones ligados

¹La recombinación bimolecular, también llamada recombinación radiactiva espontánea, es la recombinación directa de un electrón en la BC hacia un hueco en la BV emitiendo un fotón de energía mayor o igual al valor de la energía de la banda prohibida [15, 16].

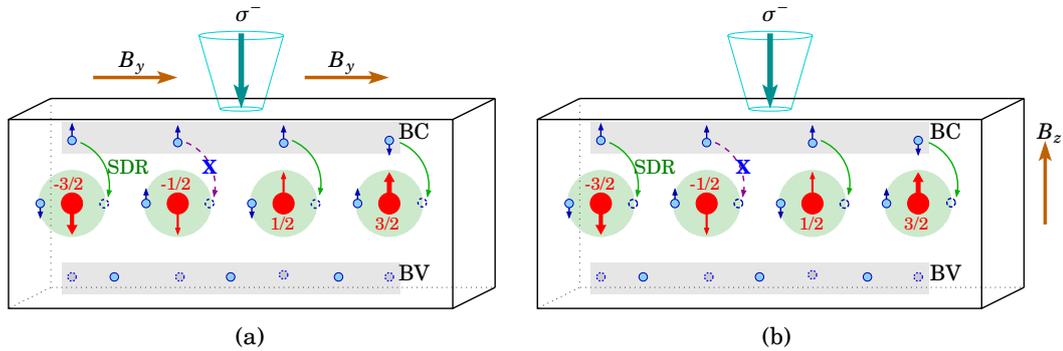


Figura 1.1: Esquema ilustrativo de las configuraciones experimentales de: (a) Voigt y (b) Faraday en una muestra de GaAsN. En ambos esquemas ejemplificamos: la banda de conducción (BC), la banda de valencia (BV), los centros de recombinación Ga^{2+} y el mecanismo de la SDR bajo luz circularmente polarizada hacia la izquierda (σ^-).

cuyo espines tiene proyecciones $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ son iguales de tal manera que la polarización del espín electrónico es igual a cero. Posteriormente, cuando la muestra es sometida a luz circularmente polarizada, se fotogeneran un 75% con una proyección de espín y el 25% con espín opuesto en la BC. Esta diferencia se debe principalmente al signo de la luz circularmente polarizada que puede ser derecha o izquierda. Después, los electrones en la BC con espín opuesto a los electrones ligados se recombinan en las TP's y forman estados cuánticos de singulete². Finalmente uno de los electrones apareados en las trampas ocupadas se recombina con un hueco en la BV. Este último proceso es más lento que la recombinación a las TP's, lo que ocasiona que las TP's y la BC se saturan con electrones polarizados con la misma proyección de espín. En este estado de saturación, el efecto de filtro de espín impide que electrones con la misma polarización del espín de las TP's se recombinen y favorece la captura de electrones con polarización del espín contraria. Así se observa un aumento en la intensidad de la PL.

En presencia de campos magnéticos externos se observan varios fenómenos que son de interés. Al aplicar un campo magnético perpendicular respecto a la dirección de incidencia de bombeo óptico, como se muestra en la figura 1.1(a), se observa un decaimiento con tendencia lorentziana en la P_e^{BC} como función del campo magnético debido al efecto Hanle [11, 18]. A este arreglo experimental se le conoce como confi-

²Existe una mayor probabilidad de que se forme un estado de singulete que un estado de triplete, así lo mostró Lepine en la Ref. [17]. Así, este estado corresponde a la configuración electrónica $[\text{Ar}]3d^{10}4s^24p^0$ para el centro de recombinación de Ga en GaAsN.

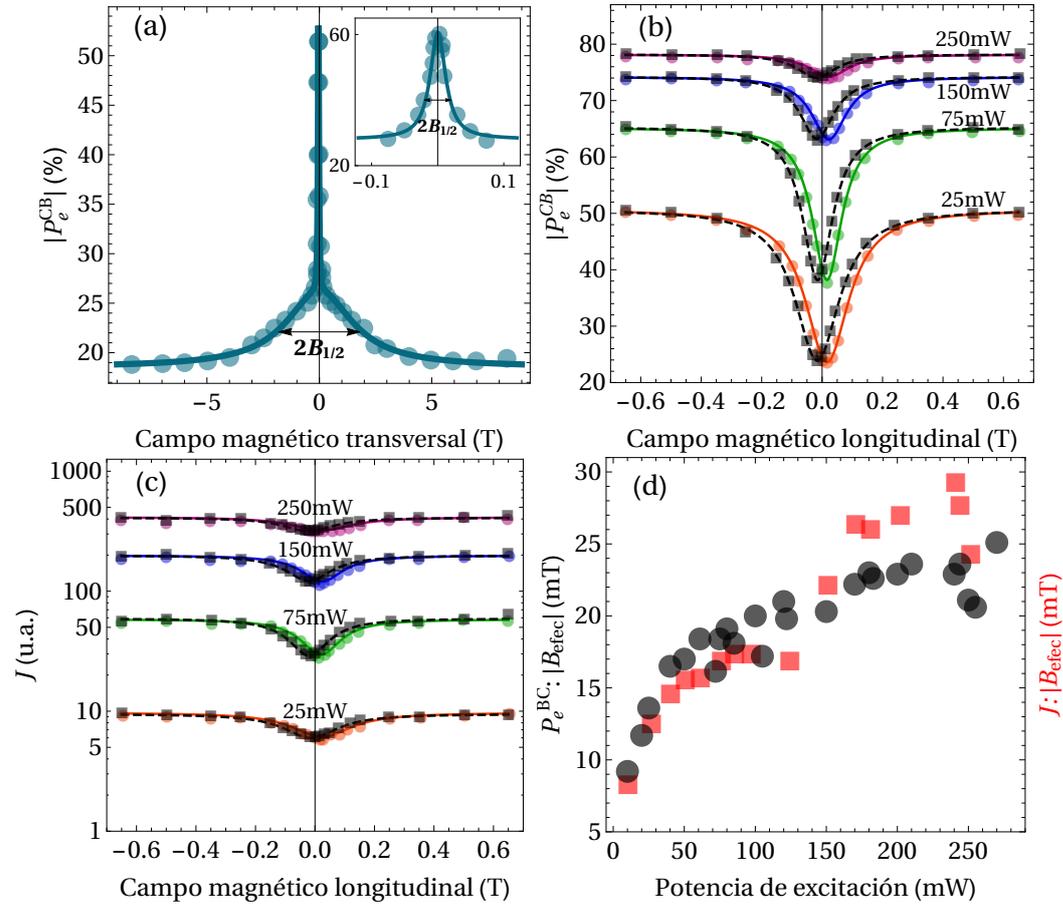


Figura 1.2: Resultados experimentales para las configuraciones de Voigt [18] y Faraday [19, 20]. En (a) exhibimos el comportamiento de P_e^{BC} en configuración de Voigt (efecto Hanle). Mostramos las mediciones en (b) de P_e^{BC} y en (c) para J en configuración de Faraday para luz σ^+ (línea continua) y σ^- (línea discontinua). En (d) presentamos el campo magnético tipo Overhauser obtenido del mínimo de P_e^{BC} (puntos negros) y J (cuadros rojos) como función de la potencia de excitación.

guración de Voigt. El efecto Hanle se debe a la precesión del espín de los electrones alrededor del campo magnético. La despolarización del espín de los electrones es más rápida cuanto más rápida es la velocidad de precesión. La importancia del efecto Hanle radica en permitir estimar los tiempos de relajación del espín de los electrones de la BC y las TP's por medio del ancho medio $B_{1/2}$ de dos curvas lorentzianas. En la figura 1.2(a) mostramos el comportamiento experimental de curvas tipo Hanle reportados por Kalevich et. al. [18] como función del campo magnético transversal. En esta figura, la lorentziana con menor ancho corresponde a la despolarización de

los electrones ligados en Ga^{2+} y la de mayor ancho corresponde a la de los electrones en la BC.

Por el contrario, cuando el campo magnético es paralelo a la dirección de bombeo óptico (ver figura 1.1(b)), llamada configuración de Faraday, se observan dos características de interés [19–22]. La primera consiste en un aumento del grado de polarización del espín de los electrones de la BC y de la intensidad de la PL (J) como se muestra en las figuras 1.2(b)–(c). Este aumento se debe principalmente a la supresión de la relajación de espín debido al campo magnético aplicado. El comportamiento de P_e^{BC} y J como funciones del campo magnético longitudinal es inverso al observado en el caso de la configuración de Voigt, esto es, con una tendencia lorentziana invertida con el mínimo aproximadamente a campo magnético cero. La segunda característica tiene que ver con la posición del mínimo de las curvas de P_e^{BC} y J como función del campo magnético longitudinal. Éste sufre un desplazamiento que es función de la potencia de bombeo, la concentración de Nitrógeno y de la orientación de la luz circularmente polarizada. Cuando la luz es circularmente polarizada hacia la izquierda (σ^-), el mínimo se desplaza hacia la región de campos magnéticos negativos, mientras que cuando ésta es derecha (σ^+) el mínimo se desplaza hacia la región de campos magnéticos positivos.

Las diferentes interpretaciones de este comportamiento coinciden en que el mecanismo responsable es la interacción hiperfina (IHF) entre el espín de los núcleos de Ga^{2+} ($I = 3/2$) y el correspondiente espín del electrón ligado ($S = 1/2$). Por ejemplo, Kalevich et. al. [19, 20] explican que la base de estos efectos es la supresión de la relajación del espín. En campo externo nulo ésta es producida por un campo magnético caótico entre los electrones ligados y la correspondiente fluctuación del espín nuclear en las TP's. La consecuencia de esta supresión permite que exista una eficiencia del efecto de filtro espín dada por la polarización del espín de los electrones ligados en los Ga^{2+} . Respecto al desplazamiento del mínimo, sugiere que se debe a la existencia de un campo tipo Overhauser³ [23] que se origina debido a la IHF entre el electrón ligado de la TP con su correspondiente núcleo. En la figura 1.2(d) mostramos el comportamiento experimental del campo tipo Overhauser en GaAsN [19], obtenido del mínimo de P_e^{BC} y J como función de la potencia de excitación. Para estudiar este fenómeno, se utiliza el modelo de dos cargas [11, 12, 24, 25] y se incluye el efecto de la supresión del espín a través de un tiempo de relajación que presenta una dependencia lorentziana del campo magnético longitudinal. Este modelo reproduce correctamente el efecto

³El origen del *campo magnético Overhauser* en metales y semiconductores se explica con más detalle en el apéndice A.

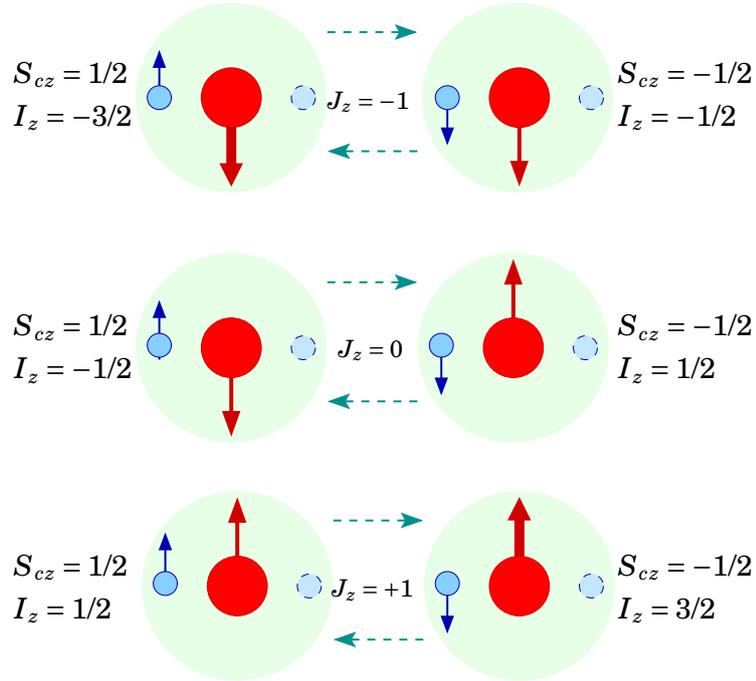


Figura 1.3: Mezcla de los estados de espín electrón-núcleo debidos a la IHF en los centros de recombinación Ga^{2+} . En este esquema $J_z = S_{cz} + I_z$ representa el espín total en cada TP.

del aumento de J y P_e^{BC} , sin embargo no predice el desplazamiento del mínimo y no es capaz de identificar el origen de la supresión de la relajación del espín de los electrones ligados en las TP's.

En un segundo análisis, la supresión de la relajación de espín es atribuida a la IHF, expresada por el hamiltoniano

$$\hat{H} = \mathcal{A} \hat{\mathbf{S}}_c \cdot \hat{\mathbf{I}} + g_c \mu_o \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c, \quad (1.1)$$

donde $\hat{\mathbf{S}}_c$, e $\hat{\mathbf{I}}$ son el espín de los electrones ligados a las TP's y sus núcleos respectivamente. El campo magnético externo es \mathbf{B} , g_c es el factor giromagnético, μ_o el magnetón de Bohr y \mathcal{A} es la constante hiperfina. El primer término de este hamiltoniano corresponde a la IHF y el segundo al efecto Zeeman. Se ha sugerido que a un campo aproximadamente igual a cero, existe una mezcla de estados cuánticos debido a la IHF, como se muestran en la figura 1.3, que provoca una polarización nuclear estacionaria $\langle I \rangle$ que podría explicar el desplazamiento del mínimo. El aumento de la intensidad de P_e^{BC} y J se debe entonces a que el campo magnético longitudinal hace

que la interacción predominante sea la de Zeeman, suprimiendo la mezcla de estados y reduciendo así el valor de $\langle I \rangle$.

Puttison et. al. [21, 22] atribuyen también este fenómeno a la IHF. A campos aproximadamente nulos la mezcla de estados de espín en las TP's disminuyen el efecto de filtro de espín y como consecuencia el grado de polarización en la BC. Adicionalmente demuestran que es posible estudiar esta mezcla de estados de forma experimental a través de la técnica de detección por resonancia magnética óptica (ODMR, *Optically Detection Magnetic Resonance* por sus siglas en Inglés). Sin embargo esta técnica requiere temperaturas del orden de 2K y campos magnéticos intensos $\sim 0.6T$, lo que produce que la mezcla de los estados de espín de electrón ligado y núcleo sea débil en comparación con la interacción de Zeeman. Por este motivo no se puede apreciar la mezcla de estados para campos donde el desplazamiento del mínimo es predominante. Así mismo, presentan un modelo a base de ecuaciones de balance para los diferentes estados nucleares y electrónicos de las trampas que se acopla al ya existente modelo de dos cargas. Las desventajas de este modelo son que introduce la IHF por medio de un término fenomenológico y las ecuaciones de balance sólo consideran los términos diagonales, es decir, en la dirección de la excitación óptica. Esta última desventaja impide estudiar el sistema bajo campos magnéticos oblicuos.

Otro aspecto que necesita un estudio adicional en la configuración de Faraday es la interacción entre los centros Ga^{2+} y sus vecinos adyacentes Ga, lo que llevaría a describir con más precisión los mecanismos de relajación del espín nuclear. En este sentido, el modelo propuesto en la Ref. [26] aunque reproduce correctamente el comportamiento de P_e^{BC} , J y del campo magnético tipo Overhauser, asume que el mecanismo de relajación del espín nuclear es muy rápido y puramente fenomenológico; incluso se toma en cuenta que la polarización del espín nuclear se pierde instantáneamente cuando un electrón es capturado por un centro de recombinación y en general esto permite una reducción en el espacio cuántico del sistema. Por otro lado, Ivchenko et. al. [27] consideran dos mecanismos fenomenológicos de relajación del espín nuclear con tiempos arbitrarios, para las TP's con un electrón ligado y aquellas que poseen dos electrones apareados. Además este enfoque estudia centros Ga^{2+} con un espín nuclear $1/2$ en lugar de $3/2$, con la finalidad de reducir el sistema de ecuaciones. Aunque en este nuevo tratamiento se pueden observar efectos similares al caso de $I = 3/2$ en configuración de Faraday, se desprecian los elementos fuera de la diagonal de la ecuación maestra y por lo tanto la IHF es abordada por medio de transiciones fenomenológicas. Así, este análisis posee dos principales limitaciones, primero, sólo permite el estudio en la situación en la que el campo magnético se



encuentra en configuración de Faraday y, segundo, no toma en cuenta la complejidad de los elementos fuera de la diagonal de la IHF.

Es preciso mencionar que ninguno de los modelos antes descritos introduce de manera correcta la IHF y ninguno de ellos explica el posible origen de los mecanismos de relajación del espín nuclear. Por esta razón en la presente tesis, presentamos un modelo basado en el ecuación maestra del operador matriz de densidad. En este enfoque se incluye los efectos claves en la configuración de Faraday, es decir, la interacción de Zeeman, la IHF, los procesos de recombinación dependiente del espín, la relajación del espín electrónico y revisamos tres diferentes mecanismos de relajación del espín nuclear. Además, se incorpora los elementos fuera de la diagonal en el operador matriz de densidad y por lo tanto el efecto completo de la IHF.

Además de estudiar el efecto general de los Ga^{2+} , estamos interesados en analizar las consecuencias de incluir centros de recombinación Ga^{3+} ($[\text{Ar}]3d^{10}4s^04p^0$). Existe cuantiosa evidencia teórica y experimental de la presencia de otros tipos de defectos de Ga intersticiales en otras muestras semiconductoras [28–31]. Por ejemplo, algunos trabajos sobre difusión de dopantes en Arseniuro de Galio (GaAs) sugieren que elementos como Zn [28, 29] y Cd [30] sustituyen principalmente al Ga en la red cristalina y producen defectos intersticiales de Ga. Usando espectroscopía de masa iónica secundaria en la difusión de iones Zn implantados, se encontró una ley de difusión cuadrática que caracteriza a la difusión de Zn, lo que implica que en el equilibrio térmico hay presencia de defectos intersticiales de Ga^{2+} y Ga^{3+} [28, 29]. Otros estudios similares de la difusión de iones implantados de Cd [30] sugieren que los iones Ga^{2+} son los más probables. Sin embargo, algunos de los perfiles de difusión también indican la participación de defectos intersticiales de Ga^{3+} a bajas temperaturas y de Ga^{1+} en altas temperaturas. En otros estudios posteriores sobre defectos intersticiales de Ga en isótopos de dopantes implantados en heteroestructuras [32], descartan la existencia de centros Ga^{2+} y Ga^{3+} , pero encuentran que los Ga^0 y Ga^{+1} son los iones dominantes en los procesos de difusión de Zn–Ga.

Gracias a las mediciones de ODMR sobre GaAsN, se han podido identificar ocho tipos de defectos intersticiales de Ga^{2+} que han sido clasificados por medio de su constante hiperfina y de sus isótopos más estables (^{69}Ga y ^{71}Ga). Aunque el papel de estos diversos tipos de centros de Ga^{2+} ha sido ampliamente estudiado, el impacto de posibles centros Ga^{3+} no identificados por la ODMR y que puedan participar como centros de filtro de espín, todavía no está claro. Por esta razón en este trabajo incluimos el efecto teórico de considerar estos centros de recombinación.

En resumen en esta tesis estudiamos, primero, los efectos de incluir únicamen-

te centros de recombinación de Ga^{2+} en configuración de Faraday, posteriormente, incluimos el efecto de los centros Ga^{3+} . Esta tesis está organizada de la siguiente manera:

- En el capítulo 2 estudiamos las transiciones ópticas de luz circularmente polarizada en el GaAs, que son importantes para comprender el origen de la polarización en la BC y del mecanismo de recombinación dependiente del espín en el GaAsN. También revisamos el modelo de dos cargas y tres cargas, que nos permite describir estos mecanismos de recombinación en los centros Ga^{2+} y Ga^{3+} respectivamente.
- En el capítulo 3 desarrollamos el modelo de ecuación maestra para el operador matriz de densidad. En este modelo se analiza el efecto general de los centros de recombinación Ga^{2+} . Incluye los fenómenos físicos discutidos en el presente capítulo en las configuraciones de Voigt y Faraday. Aunque este modelo reproduce correctamente del efecto Hanle, ya ampliamente estudiado por el modelo de dos cargas, nos enfocamos en estudiar las características principales en la configuración de Faraday. Además, se discuten tres mecanismos de relajación de espín nuclear: no-selectivo; dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico. Los últimos dos se abordan por medio de la teoría de relajación de Wangness–Bloch–Redfield [33–39].
- En el capítulo 4 resolvemos numéricamente el modelo obtenido para los centros Ga^{2+} . La solución del sistema resultante nos permite encontrar que el mecanismo detrás de la relajación del espín nuclear tiene que ver con la interacción tipo dipolar magnética entre los vecinos adyacentes de los Ga^{2+} . La aportación más importante de este capítulo es que determinamos teóricamente intervalos del tiempo de la relajación del espín nuclear en las TP's con un electrón ligado y dos en estado de singulete. Esto último gracias a la comparación con resultados experimentales reportados previamente por Kalevich et. al. [19, 20].
- En el capítulo 5 ampliamos el modelo desarrollado en el capítulo 3 e incluimos el efecto de los Ga^{3+} . Mostramos que aunque estos centros Ga^{3+} poseen un mecanismo de captura selectiva de electrones de la BC no tan eficiente, estos exhiben efectos de filtro de espín similares a los encontrados en los centros Ga^{2+} . Mostramos que un pequeño porcentaje de estos Ga^{3+} genera un ajuste superior en los resultados teóricos–experimentales de la intensidad de PL y grado de polarización en la BC.



- Finalmente en el capítulo 6 concluimos con las principales aportaciones de esta tesis. Además discutimos sobre las posibles extensiones del presente trabajo.

Para finalizar este capítulo, enfatizamos las principales aportaciones de esta tesis al estudio teórico de la dinámica del espín electrón–núcleo en GaAsN:

- El modelo de ecuación maestra incluye la forma completa de la IHF, del efecto Zeeman, del mecanismo de recombinación del espín electrón–núcleo y de la relajación del espín electrónico–nuclear.
- Este modelo incluye el espacio de las trampas con dos electrones en estado de singlete, que es de suma importancia para los procesos de recombinación y relajación del espín nuclear.
- Se estudia la importancia de los mecanismos de relajación del espín nuclear en el problema. En este caso se proponen tres posibles mecanismos de relajación, uno introducido de forma fenomenológica y dos por medio de la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield.
- Gracias a resultados experimentales y a la solución numérica del sistema de ecuaciones diferenciales no-lineales y altamente acopladas⁴, se ha reportado por primera vez rangos de valores para los tiempos de relajación en el espín nuclear para las trampas paramagnéticas y trampas con dos electrones en estado singlete.
- Se ha incluido el efecto de centros Ga³⁺ en el modelo de ecuación maestra. Hemos encontrado que al incluir un pequeño porcentaje de estos centros se consiguen fuertes ajustes teóricos en los resultado de las mediciones experimentales de intensidad de PL y del grado de polarización del espín.
- Adicionalmente, gracias al modelo expuesto en esta tesis se propuso un experimento para trazar las oscilaciones coherentes entre el espín electrónico y nuclear debidas a la IHF. Esto ha sido comprobado recientemente y expuesto en la Ref. [40], sin embargo no se explica de forma detallada en esta tesis.

⁴Este sistema de ecuaciones surgen del promedio estadístico cuántico sobre el modelo de ecuación maestra, como se indica en la ecuación (3.60).

TRANSICIONES ÓPTICAS Y RECOMBINACIÓN DEPENDIENTE DEL ESPÍN (SDR)

2.1 Introducción

En este capítulo revisamos las propiedades ópticas y el mecanismo de filtro de espín en la muestra de GaAsN. Primero, estudiamos el origen de la polarización de espín en la BC por medio de las transiciones ópticas que se generan al someter al GaAsN a luz linealmente y circularmente polarizada. Posteriormente para comprender el fenómeno de filtro de espín, analizamos el mecanismo de recombinación dependiente del espín. Finalmente, enunciaremos el modelo de dos y tres cargas que describen los procesos de recombinación dependiente e independiente del espín en los centros Ga^{2+} y Ga^{3+} respectivamente.

2.2 Transiciones ópticas

En esta parte analizamos el origen de la diferencia en población de fotoelectrones con proyección del espín $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$ en la BC del GaAsN. Para esto, analizamos las transiciones ópticas [15, 41–44] basadas en el GaAs, que son debidas a la estimulación óptica de luz circularmente polarizada.

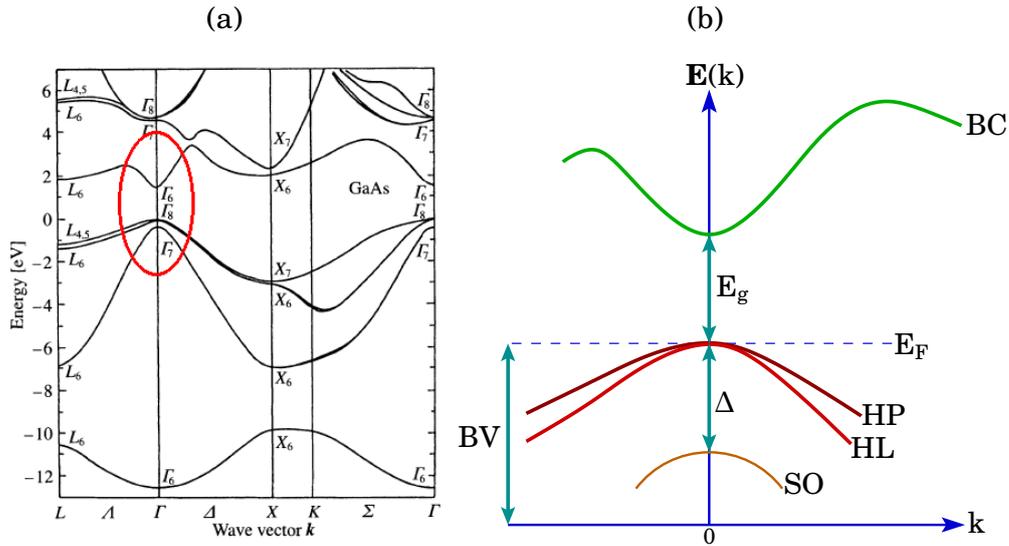


Figura 2.1: Estructura de bandas del GaAs. En (a) mostramos la estructura de las diversas bandas cerca de la de la primera zona Brillouin (elipse en rojo) [45]. En (b) presentamos una ampliación de esta primera zona (diagrama ilustrativo), cerca de $k = 0$, donde se indica la banda de conducción (BC) y la banda valencia (BV). La BV se divide en las sub-bandas: huecos pesados (HP), huecos ligeros (HL) y huecos *split-off* (SO). También se señala el nivel de la energía de Fermi E_F , la energía de la brecha prohibida E_g ($\approx 1.42\text{eV}$) y la brecha en energía debido al desdoblamiento espín-órbita Δ ($\approx 0.3\text{eV}$) [15, 41, 42].

El porcentaje de Nitrógeno en muestras a base de $\text{GaAs}_{1-x}\text{N}_x$ varía entre $0.3\% < x < 3.4\%$ [10, 11, 14, 22]. Esta pequeña cantidad permite estudiar a este semiconductor con las principales características ópticas del GaAs salvo por una pequeña reducción de la brecha prohibida. Tales características, provienen del comportamiento de los electrones y huecos en la estructura de bandas cerca del centro de la primera zona de Brillouin [15, 41, 42], como se ilustra en la figura 2.1. Así para el GaAs, existen dos bandas principales: la banda de conducción denotada como BC y la banda de valencia indicada como BV. La BC se encuentra por encima del nivel de Fermi E_F y posee una doble degeneración, debido a que, los electrones pueden tomar los valores de espín $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ por cada nivel energético. Por debajo de E_F se encuentra la BV y esta formada por tres sub-bandas: la banda de huecos pesados (HP), huecos ligeros (HL) y huecos *split-off* (SO). Si el vector de onda toma el valor $k = 0$, entonces existe una máxima probabilidad de transición de la BV hacia la BC. En este punto, los huecos de la banda HP poseen un momento angular total $J = 3/2$ y proyecciones

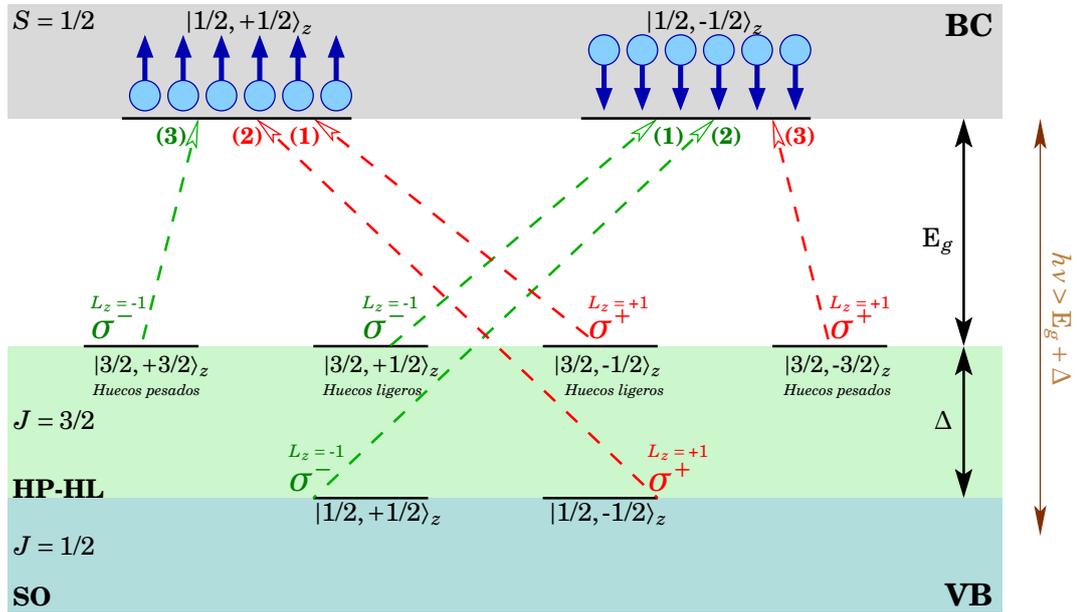


Figura 2.2: Transiciones ópticas de la BV a la BC bajo luz circularmente polarizada. El fotón polarizado circularmente hacia la izquierda (derecha) que es absorbido por la muestra, posee un momento angular $L_z = -1$ ($L_z = +1$). Esto permite las transiciones ópticas marcadas en color verde (rojo) con fuerza de oscilador: 3, 2 y 1 para HP, SO y HL respectivamente, hacia la BC.

$J_z = \pm 3/2$ y los huecos de la banda HL con $J = 3/2$ y proyecciones $J_z = \pm 1/2$. Esto último genera una cuádruple degeneración en el punto más alto de BV. La banda de SO se encuentra separada una distancia Δ , que corresponde a la energía del desdoblamiento espín-órbita, de las bandas HP y HL. En el nivel inferior de energía en la BV, los huecos *split-off* poseen una doble degeneración con $J = 1/2$ y proyecciones $J_z = \pm 1/2$. Finalmente, la menor distancia energética entre la BC y BV se denomina *brecha prohibida* E_g y cumple con $E_g > \Delta$.

De las características anteriores en la estructura de bandas del GaAs, podemos describir las transiciones ópticas [15, 41–44] que se originan en la conservación de momento angular de fotones cuando estos interactúan con la muestra semiconductor. Así, en la figura 2.2 mostramos todas las transiciones permitidas y las correspondientes fuerzas de oscilador¹ empleando luz circularmente polarizada hacia derecha σ^+ (en rojo) y con luz circularmente polarizada hacia la izquierda σ^- (en verde).

¹La fuerza del oscilador expresa el valor de la probabilidad transición de un estado base a un estado excitado cuando un átomo o molécula absorbe luz [46].

Luz circularmente polarizada	σ^+	σ^-
Momento angular del fotón	$L_z = +1$	$L_z = -1$
Energía del fotón	$E_g < h\nu < E_g + \Delta$	$E_g < h\nu < E_g + \Delta$
Transición: HP \rightarrow BC 3 veces más probable	$J_z = -3/2 \rightarrow S_z = -1/2$	$J_z = +3/2 \rightarrow S_z = +1/2$
Transición: HL \rightarrow BC	$J_z = -1/2 \rightarrow S_z = +1/2$	$J_z = +1/2 \rightarrow S_z = -1/2$
Energía del fotón	$h\nu > E_g + \Delta$	$h\nu > E_g + \Delta$
Transición: HP \rightarrow BC 3 veces más probable	$J_z = -3/2 \rightarrow S_z = -1/2$	$J_z = +3/2 \rightarrow S_z = +1/2$
Transición: HL \rightarrow BC	$J_z = -1/2 \rightarrow S_z = +1/2$	$J_z = +1/2 \rightarrow S_z = -1/2$
Transición: SO \rightarrow BC 2 veces más probable	$J_z = -1/2 \rightarrow S_z = +1/2$	$J_z = +1/2 \rightarrow S_z = -1/2$

Cuadro 2.1: Transiciones ópticas obtenidas del esquema de la figura 2.2 bajo luz circularmente polarizada.

En el caso de luz σ^- , si los fotones que absorbe la BV poseen una energía $E_g < h\nu < E_g + \Delta$ y un momento angular $L_z = -1$, es posible hacer transiciones (en verde) de los estados $J_z = +3/2$ de los HP y $J_z = +1/2$ en los HL a los estados $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ respectivamente, en la BC. Las transiciones ópticas que surgen de los estados de la banda de HP poseen una probabilidad tres veces mayor respecto a la correspondiente banda de HL. En otras palabras, bajo luz circularmente polarizada

hacia la izquierda se generan un 75% de electrones con espín $S_z = +1/2$ y un 25% con espín $S_z = -1/2$. Por otro lado, si el fotón posee una energía $h\nu > E_g + \Delta$, entonces deben incluirse las transiciones ópticas $J_z = +1/2 \rightarrow S_z = -1/2$ de la banda de SO hacia la BC con una probabilidad dos veces mayor respecto a la banda de HL. En este caso la probabilidad de excitar electrones a la BC con proyección de espín $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ es la misma y por lo tanto no es posible generar una polarización del espín en la BC. Es entonces importante notar que sólo es posible generar una diferencia de poblaciones con orientaciones de espín diferentes cuando $E_g < h\nu < E_g + \Delta$ [20].

Este mismo análisis se puede realizar para luz circularmente polarizada hacia la derecha y las transiciones permitidas en este caso son marcadas en rojo en la figura 2.2. De esta manera se puede generar una diferencia de población de electrones con una polarización del espín dependiendo del signo de la polarización circular de la luz incidente y de la energía del fotón que absorbe la muestra. En el cuadro 2.1 mostramos de forma resumida los resultados obtenidos de estas transiciones ópticas para el GaAs.

Finalmente, en el caso de luz linealmente polarizada se obtienen las mismas poblaciones de electrones generados con $S_z = +1/2$ que $S_z = -1/2$ que hacia abajo en la BC y por lo tanto la polarización neta es igual a cero. Esto se debe a que la luz linealmente polarizada posee el mismo número fotones con momento angular $L_z = +1$ que fotones con momento $L_z = -1$.

2.3 Centros de recombinación y mecanismo SDR

La incorporación de pequeñas cantidades de Nitrógeno al GaAs genera dos importantes propiedades en el sistema de GaAsN. La primera es la reducción de la brecha de la banda prohibida E_g al incrementar la concentración de N. Se ha reportado que esta energía se reduce de 1.42eV a 1.08eV cuando se varia el porcentaje de N de 0% a 3.4% [10]. Debido a esta característica, se excitan electrones del borde superior de la BV hacia la BC con una energía menor que la empleada en GaAs [20].

La segunda característica es la aparición de defectos intersticiales en la red cristalina del GaAsN [9, 14, 47]. Por medio de la detección por resonancia magnética óptica (ODMR, Optically Detection Magnetic Resonance por sus siglas en Inglés) se encontró que los defectos intersticiales corresponden a los Ga y no a las impurezas de Nitrógeno. De forma general, esta técnica espectroscópica combina la resonancia del espín de un electrón no apareado en un defecto intersticial y la respuesta óptica de emisión o absorción bajo luz circularmente polarizada [48]. Gracias a esto, se reconoció

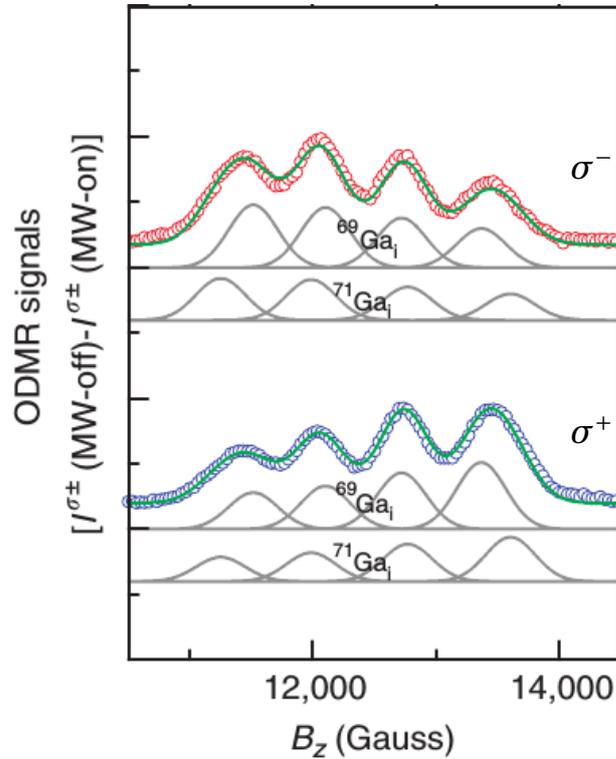


Figura 2.3: Espectro de ODMR experimental y simulado para una muestra de $\text{GaAs}_{0.9964}\text{N}_{0.0036}$. Los puntos en rojo corresponden a mediciones experimentales de luz σ^- y los correspondientes en azul a luz σ^+ a una excitación de 32 mW, a una temperatura de 2K y una microfrecuencia de 35.07 GHz. Las líneas continuas corresponden a simulaciones de la ODMR para los dos isótopos más estables del Galio: ^{69}Ga y ^{71}Ga [22].

a los Ga^{2+} como los principales centros de recombinación debido a que filtran el espín electrónico de la BC, y que son capaces de generar altas polarizaciones del espín a temperatura ambiente sin necesidad de aplicar campos magnéticos externos [47]. Además se identificó ocho tipos de Ga^{2+} , que se diferencian de acuerdo al valor de la constante hiperfina y al tipo de isótopo estable: ^{69}Ga y ^{71}Ga [14, 47]. En la figura 2.3 mostramos un espectro típico de la ODMR para los dos isótopos estables de Ga en GaAsN [22].

Respecto al aumento de la polarización, este es provocado por el efecto de filtro de espín entre la BC y las TP's. Debido al mecanismo de recombinación dependiente del espín, ocasionado por los centros Ga^{2+} y a la excitación óptica, es que se consiguen altas polarizaciones del espín tanto en la BC como en las TP's.

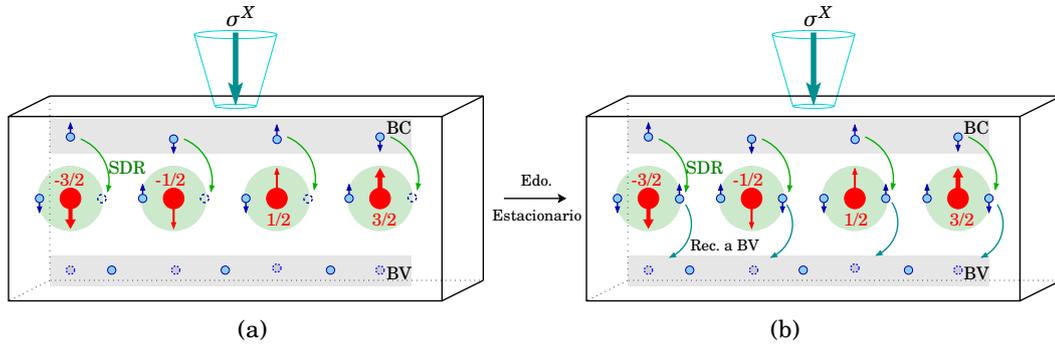


Figura 2.4: Esquema ilustrativo de la excitación óptica bajo luz linealmente polarizada. En (a) mostramos que inicialmente se generan el mismo número de electrones con $S_z = +1/2$ que $S_z = -1/2$. Las trampas, capturan los electrones de la BC y forman estados de singlete con polarización neta del espín igual a cero. En (b) puede verse el caso estacionario, donde la polarización en la BC y en las TP's trampas permanece constante e igual a cero.

Por ejemplo, antes de la excitación óptica y en equilibrio termodinámico, la polarización neta del espín en la BC y en las TP's es igual a cero. Igualmente las poblaciones de las TP's con electrones ligados cuyo espines tiene proyecciones $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ son iguales. Esto mismo sucede con la polarización nuclear, existen el mismo número de trampas en los estados nucleares $-3/2, -1/2, +1/2$ y $+3/2$ de tal manera que polarización neta nuclear de espín es igual a cero. Cuando la muestra se excita con luz linealmente polarizada, se fotogeneran el mismo número de electrones con $S_z = +1/2$ que $S_z = -1/2$ en la BC. Esto genera una polarización del espín electrónico igual a cero en la BC. En seguida, las trampas capturan a los electrones con espín opuesto al espín del electrón ligado en las TP's, respetando el principio de exclusión de Pauli, lo que también genera una polarización nula en las TP's. Posteriormente, los electrones se recombinan independientemente de su orientación del espín hacia la BV. Este proceso se realiza bajo el esquema de onda continua (CW, Continuous Wave por sus siglas en Inglés) y al alcanzar el estado estacionario la polarización del espín en la BC, como en las TP's, permanece constante e igual a cero. Así, en este caso la polarización del espín alcanzada es nula. En la figura 2.4 esquematizamos la excitación óptica bajo luz linealmente polarizada.

Debido a las transiciones ópticas vistas en la sección 2.2, en el caso de luz circularmente polarizada, se fotogenera 75% de la población de electrones con una proyección de espín y 25% con una proyección antiparalela. Por ejemplo, bajo luz circularmente

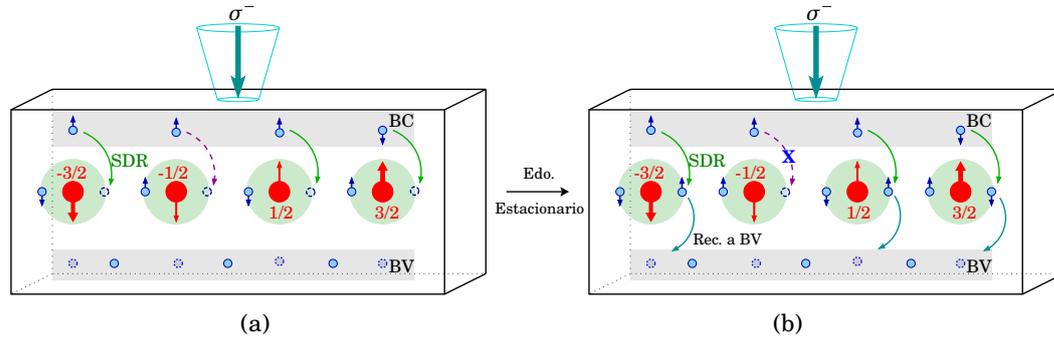


Figura 2.5: Esquema ilustrativo de la excitación óptica bajo luz circularmente polarizada. En (a) mostramos el caso inicial de someter a la muestra a una excitación de luz σ^- , generando un 75% de electrones con $S_z = +1/2$ y un 25% con $S_z = -1/2$. Las trampas, que inicialmente poseen electrones ligados con polarización neta del espín igual a cero, capturan electrones de la BC formando un singulete. En (b) ejemplificamos el caso estacionario, donde se tiene una polarización promedio con espín $S_z = +1/2$ en la BC y en los centros de recombinación de Ga^{2+} .

polarizada hacia la izquierda, este 75% corresponden a electrones con espín $S_z = +1/2$ y el 25% a electrones con espín $S_z = -1/2$. Así, al excitar inicialmente la muestra con σ^- se genera una polarización promedio con espín $S_z = +1/2$. Posteriormente, aquellas trampas que posean un electrón con espín antiparalelo a los de la BC, capturan selectivamente a estos electrones formando estados de singulete. Esto genera una polarización neta del espín con espín $S_z = +1/2$ tanto en la BC como en las TP's, esto gracias a que ciertos electrones son retenidos en la BC. Además, la velocidad de recombinación de los electrones con espín antiparalelo en la BC hacia las TP's es mayor ($c_n = 1/\tau^* N_c$, con $\tau^* = 4.4\text{ps}$ y N_c el número de Ga^{2+}) que la recombinación de los electrones de las TP's a la BV ($c_p = 1/\tau_h N_c$ con $\tau_h = 12\text{ps}$) [27], por lo que existe una acumulación de electrones polarizados y huecos en la BC y en la BV respectivamente. Por lo tanto en estado estacionario, esto mantiene el número de trampas polarizadas e impide la recombinación de espín de los electrones que poseen la misma polarización de espín. Este ciclo dinámico de transferencia de espín posee dos importantes características, primero, los electrones con espín hacia arriba son retenidos en la BC debido al principio de exclusión de Pauli, y segundo los electrones con espín hacia abajo son rápidamente filtrados de la BC, debido a que existe un alto número de trampas con espín hacia arriba [15]. En la figura 2.5 ejemplificamos este caso con luz circularmente polarizada hacia la izquierda.

2.4 Modelo de dos cargas y tres cargas

Para formular el modelo de ecuación maestra para los centros de recombinación Ga^{2+} tomamos como punto de partida el modelo de dos cargas. Este es capaz de reproducir varios de los fenómenos asociados a la recombinación dependiente del espín. Sin embargo, no es capaz de tomar en cuenta los efectos de un campo magnético en configuración de Faraday. El modelo de dos cargas consiste fundamentalmente en un sistema de ecuaciones diferenciales no lineales de balance para electrones y huecos originalmente propuesto por Kalevich et. al. [11, 24]. Contiene los mecanismos esenciales de la recombinación y de filtro de espín. Esta formado por las siguientes ecuaciones diferenciales

$$\dot{p} = -c_p p N_2 + G, \quad (2.1)$$

$$\dot{n}_\downarrow = -2c_n n_\downarrow N_\uparrow + G_\downarrow - \frac{n_\downarrow - n_\uparrow}{2\tau_s}, \quad (2.2)$$

$$\dot{n}_\uparrow = -2c_n n_\uparrow N_\downarrow + G_\uparrow - \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2\tau_s}, \quad (2.3)$$

$$\dot{N}_\downarrow = -2c_n n_\uparrow N_\downarrow + \frac{c_p}{2} p N_2 - \frac{N_\downarrow - N_\uparrow}{2\tau_{sc}}, \quad (2.4)$$

$$\dot{N}_\uparrow = -2c_n n_\downarrow N_\uparrow + \frac{c_p}{2} p N_2 - \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{2\tau_{sc}}, \quad (2.5)$$

$$\dot{N}_2 = 2c_n n_\uparrow N_\downarrow + 2c_n n_\downarrow N_\uparrow - c_p p N_2, \quad (2.6)$$

donde los subíndices \uparrow y \downarrow indican la polarización del espín de los electrones en sus dos proyecciones posibles $+1/2$ y $-1/2$ a lo largo del eje de la luz incidente. Así n_\uparrow es el número de electrones en la BC con proyección del espín $+1/2$ y n_\downarrow es el número de electrones con proyección $-1/2$. El número total de electrones generados en la BC es $n = n_\uparrow + n_\downarrow$. Similarmente N_\uparrow es el número de trampas cuyo electrón ligado tiene proyección de espín $+1/2$ y N_\downarrow son aquellas en las que su electrón ligado tiene proyección del espín $-1/2$. $N_1 = N_\uparrow + N_\downarrow$ es el número total de TP's. Además $N_2 = N_{\uparrow\downarrow}$ son las trampas que posee dos electrones en estado de singulete y $N_c = N_1 + N_2$ es el número total de trampas. Los coeficientes τ_s , τ_{sc} son los tiempos de relajación de espín en la BC y en las trampas respectivamente. El factor c_n es la tasa de recombinación de los electrones de la BC a las TP's y c_p es la tasa de recombinación de los electrones de las trampas apareadas a los huecos p de la BV. Por último G_\uparrow y G_\downarrow son los términos de fotogeneración de electrones de la BC con espín $S_z = +1/2$ y $S_z = -1/2$ respectivamente. El número total de electrones y huecos fotogenerados por unidad de tiempo es $G = G_\uparrow + G_\downarrow$.

Podemos pasar de las ecuaciones de balance (2.1)–(2.6) al modelo de dos cargas [12, 25] si introducimos las siguientes cantidades

$$S_z = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2}, \quad (2.7)$$

$$S_{cz} = \frac{N_\uparrow - N_\downarrow}{2}, \quad (2.8)$$

$$\Delta G_z = \frac{G_\uparrow - G_\downarrow}{2}, \quad (2.9)$$

que definen las polarizaciones a lo largo de la línea de excitación óptica. Además considerando que la muestra es isotrópica, obtenemos el siguiente sistema de ecuaciones de balance [15, 25]

$$\dot{p} = -c_p N_2 p + G, \quad (2.10)$$

$$\dot{n} = -c_n(nN_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c) + G, \quad (2.11)$$

$$\dot{N}_1 = -c_n(nN_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c) + c_p N_2 p, \quad (2.12)$$

$$\dot{N}_2 = c_n(nN_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c) - c_p N_2 p, \quad (2.13)$$

$$\dot{\mathbf{S}} = -c_n(N_1 \mathbf{S} - n\mathbf{S}_c) - \frac{\mathbf{S}}{\tau_s} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S} + \Delta \mathbf{G}, \quad (2.14)$$

$$\dot{\mathbf{S}}_c = c_n(N_1 \mathbf{S} - n\mathbf{S}_c) - \frac{\mathbf{S}_c}{\tau_{sc}} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{S}_c. \quad (2.15)$$

En este modelo $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ representa la polarización del espín de los electrones en la BC y $\mathbf{S}_c = (S_{cx}, S_{cy}, S_{cz})$ la polarización del espín de los electrones ligados en las TP's. Los términos $c_n(nN_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c)$ y $c_n(N_1 \mathbf{S} - n\mathbf{S}_c)$ son los responsables de la captura dependiente de espín en las TP's con una tasa de recombinación c_n . La tasa de recombinación de electrones de la BC en las TP's incrementa cuando \mathbf{S} y \mathbf{S}_c son antiparalelos, y se desvanece cuando son paralelos. El término $c_p N_2$ corresponde a la recombinación independiente del espín de un electrón en una trampa en estado de singulete hacia la BV donde existe un hueco. Los efectos de campo magnético se incluyen a través de los términos $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}$ y $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{S}_c$ de precesión de espín. Aquí $\boldsymbol{\omega} = g\mu_B \mathbf{B}/\hbar$, $\boldsymbol{\Omega} = g_c\mu_B \mathbf{B}/\hbar$ donde μ_B es el magnetón de Bohr. Los factores giromagnéticos para los electrones en la BC y electrones ligados en las TP's toman los valores $g = +1$ y $g_c = +2$ respectivamente [20, 49]. Notamos que el modelo de dos cargas (2.11)–(2.15) es un sistema no lineal de diez ecuaciones diferenciales acopladas. La fotogeneración de electrones bajo excitación de onda continua [25] genera una polarización del espín en la BC dada por

$$\Delta \mathbf{G} = \frac{1}{2}(G_\uparrow - G_\downarrow) \hat{\mathbf{e}}, \quad (2.16)$$

donde el vector unitario $\hat{\mathbf{e}}$ indica la dirección del bombeo óptico.

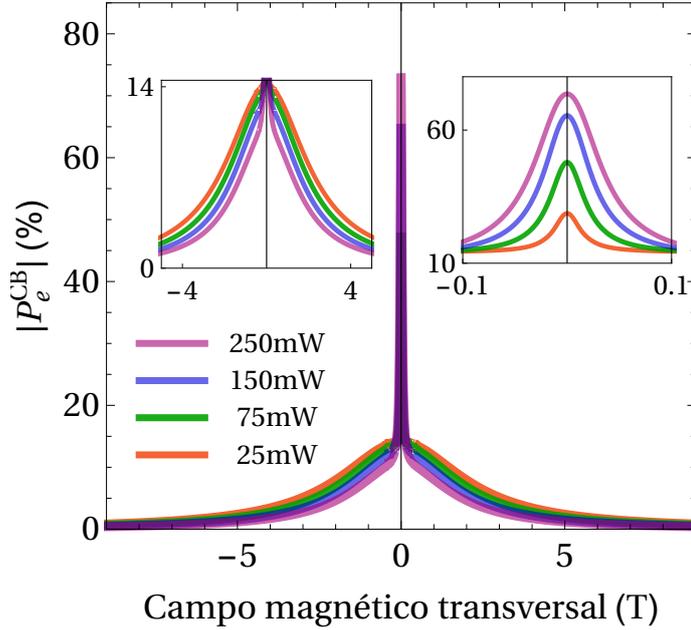


Figura 2.6: Resultados teóricos obtenidos del modelo de dos cargas, ecuaciones (2.10)–(2.15), en configuración de Voigt para valores de potencia 25, 75, 150 y 250 mW.

En la figura 2.6 mostramos la solución del sistema de ecuaciones (2.10)–(2.15) en configuración de Voigt. En esta solución empleamos el término de fotogeneración en CW dado por la ecuación (3.63), los parámetros del cuadro 3.1 y los valores de potencia de excitación de 25, 75, 150 y 250 mW. El comportamiento en cada valor de potencia reproduce cualitativamente el comportamiento experimental del efecto Hanle mostrado en la figura 1.2(a) del capítulo 1. Cada curva teórica esta formada por dos lorentzianas, la de mayor ancho corresponde a la despolarización del espín de los electrones en la BC y la de menor ancho corresponde a la despolarización del espín de los electrones ligados en las TP's.

En el caso de la configuración de Faraday, la dependencia del campo magnético longitudinal se suprime en el sistema de ecuaciones (2.10)–(2.15). Esto se debe a que en este arreglo experimental, la polarización del espín en la BC generada por la excitación óptica y el campo magnético se encuentran en la misma dirección y por tanto el término $\omega \times \mathbf{S}$ en la ecuación (2.14) es igual a cero. Lo mismo ocurre para los electrones ligados en las TP's, donde $\mathbf{\Omega} \times \mathbf{S}_c = 0$ en la ecuación (2.15). La solución de este caso se muestra en figura 4.1(a) (líneas punteadas) del capítulo 4.

Para estudiar el efecto de los centros de recombinación Ga^{3+} es necesario extender

el sistema de ecuaciones cinéticas (2.1)–(2.6) para incluir nuevos procesos de recombinación dependiente e independiente del espín. Tales procesos se basan principalmente en la captura y liberación de electrones del estado $4s^0$ de la configuración electrónica $[Ar]3d^{10}4s^04p^0$ de los centros Ga^{3+} . Estos procesos están comprendidos por el modelo de tres cargas [50]. En este caso el sistema de ecuaciones diferenciales que describen la población de estados en la dirección del bombeo óptico es dado por

$$\dot{p} = -c_b p \mathcal{N}_2 - c_a p (\mathcal{N}_\uparrow + \mathcal{N}_\downarrow) + G, \quad (2.17)$$

$$\dot{n}_\downarrow = -c_c \mathcal{N}_0 n_\downarrow - 2c_e n_\downarrow \mathcal{N}_\uparrow + G_\downarrow - \frac{n_\downarrow - n_\uparrow}{2\tau_s}, \quad (2.18)$$

$$\dot{n}_\uparrow = -c_c \mathcal{N}_0 n_\uparrow - 2c_e n_\uparrow \mathcal{N}_\downarrow + G_\uparrow - \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{2\tau_s}, \quad (2.19)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_0 = -c_c (n_\uparrow + n_\downarrow) \mathcal{N}_0 + c_a p (\mathcal{N}_\uparrow + \mathcal{N}_\downarrow), \quad (2.20)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_\downarrow = -2c_e n_\uparrow \mathcal{N}_\downarrow + \frac{c_b}{2} p \mathcal{N}_2 - \frac{\mathcal{N}_\downarrow - \mathcal{N}_\uparrow}{2\tau_{sc}}, \quad (2.21)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_\uparrow = -2c_e n_\downarrow \mathcal{N}_\uparrow + \frac{c_b}{2} p \mathcal{N}_2 - \frac{\mathcal{N}_\uparrow - \mathcal{N}_\downarrow}{2\tau_{sc}}, \quad (2.22)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_2 = 2c_e n_\uparrow \mathcal{N}_\downarrow + 2c_e n_\downarrow \mathcal{N}_\uparrow - c_b p \mathcal{N}_2, \quad (2.23)$$

Análogamente al sistema únicamente con Ga^{2+} , $n = n_\uparrow + n_\downarrow$ es el número total electrones en la BC, \mathcal{N}_0 es la cantidad de trampas Ga^{3+} que se encuentra en el estado $4s^0$, $\mathcal{N}_1 = \mathcal{N}_\uparrow + \mathcal{N}_\downarrow$ es el número de centros de recombinación que han capturado un electrón independiente de la orientación del espín y $\mathcal{N}_2 = \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}$ contabiliza a los centros en estado de singulete. Los coeficientes c_a , c_b , c_c y c_e describen las tasas de recombinación en los diferentes procesos en los centros Ga^{3+} . En la figura 2.7 ilustramos estas tasas de recombinación en cada caso.

Siguiendo un procedimiento similar al caso del modelo de dos cargas, pasamos de las ecuaciones de balance (2.17)–(2.23) al modelo de tres cargas. El sistema resultante consta de un conjunto de once ecuaciones diferenciales no lineales y altamente acopladas, dadas por

$$\dot{p} = -c_a p \mathcal{N}_1 - c_b p \mathcal{N}_2 + G, \quad (2.24)$$

$$\dot{n} = -c_c n \mathcal{N}_0 - c_e (n \mathcal{N}_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_q) + G, \quad (2.25)$$

$$\dot{\mathbf{S}} = -c_c \mathbf{S} \mathcal{N}_0 - c_e (\mathbf{S} \mathcal{N}_1 - n \mathbf{S}_q) - \frac{\mathbf{S}}{\tau_s} - \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S} + \Delta \mathbf{G}, \quad (2.26)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_1 = c_c n \mathcal{N}_0 - c_a p \mathcal{N}_1 + c_b p \mathcal{N}_2 - c_e (n \mathcal{N}_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_q), \quad (2.27)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_0 = -c_c n \mathcal{N}_2 + c_a p \mathcal{N}_1, \quad (2.28)$$

$$\dot{\mathbf{S}}_q = c_c \mathbf{S} \mathcal{N}_0 - c_a p \mathbf{S}_q + c_e (\mathbf{S} \mathcal{N}_1 - n \mathbf{S}_q) - \frac{\mathbf{S}_q}{\tau_{sc}} + \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{S}_q, \quad (2.29)$$

$$\dot{\mathcal{N}}_2 = -c_b p \mathcal{N}_2 + c_e (n \mathcal{N}_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_q). \quad (2.30)$$

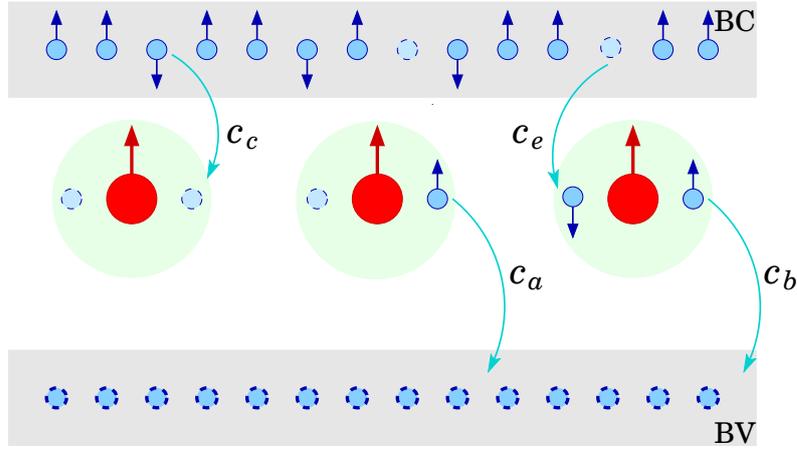


Figura 2.7: Esquema ilustrativo de las diferentes tasas de recombinación en los centros de recombinación Ga^{3+} .

En el sistema de ecuaciones anterior \mathbf{S}_q es la polarización del espín de los centros Ga^{3+} en el estado $4s^1$. Los términos de captura dependiente del espín en este caso son $c_e(\mathbf{S}\mathcal{N}_1 - n\mathbf{S}_q)$ y $c_e(n\mathcal{N}_1 - 4\mathbf{S}\cdot\mathbf{S}_q)$ y de captura independiente del espín es $c_c\mathbf{S}\mathcal{N}_0$. La recombinación independiente del espín de estos centros a la BV son dados por $c_a p\mathcal{N}_1$ y $c_b p\mathcal{N}_2$. Finalmente los términos $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}$ y $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{S}_q$ describen la precesión del espín ocasionado por un campo magnético externo en configuración de Voigt.

Nuevamente en configuración de Faraday, el campo magnético longitudinal se suprime del conjunto de ecuaciones (2.24)–(2.30) debido a que los elementos de precesión son iguales a cero. Así, es necesario incluir el efecto de los centros de recombinación Ga^{3+} de esta configuración experimental con el enfoque de ecuación maestra para el operador matriz de densidad.

ECUACIÓN MAESTRA PARA LA DINÁMICA DEL ESPÍN ELECTRÓN–NÚCLEO

3.1 Introducción

En este capítulo mostramos un modelo basado en la teoría de sistemas cuánticos abiertos [36] que nos permite describir la dinámica de polarización del espín electrón–núcleo en GaAsN. Este incluye los principales efectos físicos, tales como, el mecanismo de recombinación dependiente del espín, las interacciones Zeeman e hiperfina y los procesos de relajación del espín electrónico y nuclear. Este enfoque es capaz de reproducir las principales características experimentales en configuración de Faraday. Además, es capaz de describir el comportamiento de este semiconductor en configuraciones experimentales arbitrarias, es decir, al aplicar bombeo óptico y campo magnético en direcciones relativas arbitrarias. Los principales resultados de este capítulo se encuentran publicados en los artículos de investigación de las referencias [51–53].

3.2 Ecuación maestra

Para estudiar la dinámica del espín electrón–núcleo en este sistema empleamos la ecuación maestra para el operador matriz de densidad. Esta ecuación maestra es de

la forma [36]

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\hat{\rho}, \hat{H}] + \hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}). \quad (3.1)$$

En la expresión anterior, $\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}(t)$ es el operador matriz de densidad, \hat{H} es el hamiltoniano del sistema y $\hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho})$ es el disipador. Las interacciones internas de cada parte del sistema se encuentran en el hamiltoniano, por ejemplo, el efecto conjunto de la interacción Zeeman debido al campo magnético externo sobre los electrones y el acoplamiento en los centros Ga^{2+} del electrón ligado $S = 1/2$ y su núcleo $I = 3/2$ debido a la IHF. Las interacciones entre otras diferentes partes del sistema y de sus alrededores se contabilizan en el disipador. Estas últimas, como veremos más adelante, son debidas al campo electromagnético cuando el sistema es sometido a bombeo óptico, al mecanismo de recombinación dependiente e independiente del espín y a las fluctuaciones provenientes de los alrededores que afectan al espín electrónico y nuclear.

En este formalismo la mayor dificultad es modelar las interacciones del disipador. Con este propósito y como primer paso determinamos el espacio de estados del sistema. Así cuando la muestra es excitada ópticamente, los electrones fotogenerados ocupan los estados con proyección de espín $+\hbar/2$ o $-\hbar/2$ en la BC, entonces son necesarios dos niveles para estos electrones. Un sólo estado es necesario para los huecos no polarizados en BV que dejan los electrones al ser excitados por un fotón. En principio los huecos tienen polarización de espín, pero sus cortos tiempos de vida ($\tau < 1\text{ps}$) ocasionados por la degeneración de la BV permiten que la polarización del espín pueda ser despreciada [54]. Las trampas no apareadas poseen un electrón en cualquiera de los dos estados de espín con proyección $+\hbar/2$ y $-\hbar/2$, y que esta acoplado al núcleo por medio de la IHF: $\mathcal{A}\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_c$. Los núcleos a su vez poseen un espín total $3\hbar/2$, como resultado tenemos $2 \times 4 = 8$ estados para las TP's. En las trampas apareadas (TA's), los electrones ligados y aquellos que se han recombinado desde la BC forman un estado de singlete que no se acopla a los cuatro estados de espín nuclear. Por esta razón, las trampas apareadas requieren únicamente los cuatro estados del espín nuclear para describir su comportamiento. En resumen, tenemos: (i) un estado para huecos en BV, (ii) dos estados para electrones en la BC, (iii) ocho estados para las TP's y (iv) cuatro estados para las TA's. Por lo tanto, el espacio completo es generado por la siguiente base

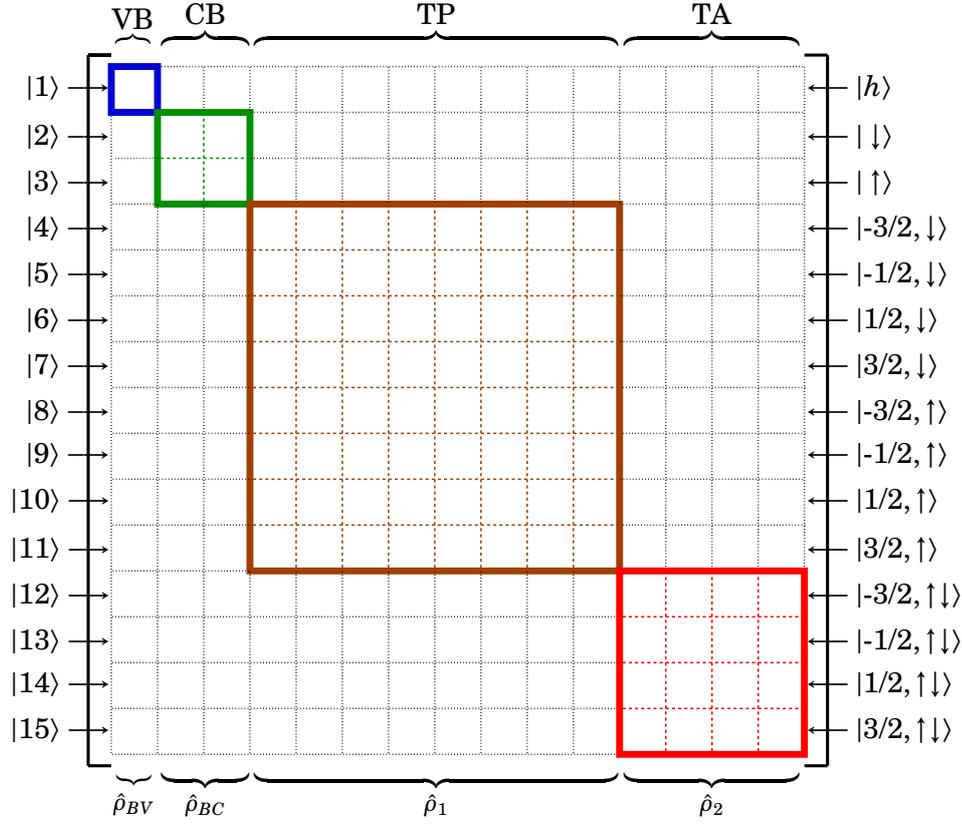


Figura 3.1: Bloques para la BV (azul), la BC (verde), TP (café) y TA (rojo). Estos bloques forman una matriz de dimensión 15×15 .

$$\mathcal{B} = \left\{ |1\rangle = |h\rangle, |2\rangle = |\downarrow\rangle, |3\rangle = |\uparrow\rangle, |4\rangle = |-3/2, \downarrow\rangle, |5\rangle = |-1/2, \downarrow\rangle, |6\rangle = |1/2, \downarrow\rangle, \right. \\ |7\rangle = |3/2, \downarrow\rangle, |8\rangle = |-3/2, \uparrow\rangle, |9\rangle = |-1/2, \uparrow\rangle, |10\rangle = |1/2, \uparrow\rangle, |11\rangle = |3/2, \uparrow\rangle, \\ \left. |12\rangle = |-3/2, \uparrow\downarrow\rangle, |13\rangle = |-1/2, \uparrow\downarrow\rangle, |14\rangle = |1/2, \uparrow\downarrow\rangle, |15\rangle = |3/2, \uparrow\downarrow\rangle \right\}. \quad (3.2)$$

Como veremos en las secciones 3.3 y 3.5, de la estructura del hamiltoniano \hat{H} y del disipador $\hat{\mathcal{D}}$ en la ecuación (3.1), es posible separar el espacio de este problema en cuatro bloques: El primero corresponde al estado de huecos $|h\rangle$ de la BV, el segundo a los estados $|\downarrow\rangle$ y $|\uparrow\rangle$ de los electrones en la BC, el tercero formado por los estados del $|-3/2, \downarrow\rangle$ a $|3/2, \uparrow\rangle$ que corresponden a las TP's y el cuarto comprendido por los estados del $|-3/2, \uparrow\downarrow\rangle$ a $|3/2, \uparrow\downarrow\rangle$ que describen a las TA's. Así, estos bloques forman una matriz de dimensión 15×15 como se muestra en la figura 3.1.

3.3 Hamiltoniano: Interacción de Zeeman e hiperfina

Como mencionamos anteriormente, el hamiltoniano en la ecuación maestra (3.1) contiene las interacciones internas de las componentes del sistema en la BV, la BC y las TP's. Para este problema en específico \hat{H} esta dado por

$$\hat{H} = \hbar\boldsymbol{\omega} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hbar\boldsymbol{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{S}}_c + \mathcal{A}\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_c. \quad (3.3)$$

El primer y segundo término en este hamiltoniano de espín corresponden a las interacciones Zeeman para los electrones libres en la BC y electrones ligados en las TP's. En ambos casos tenemos $\boldsymbol{\omega} = g\mu_B\mathbf{B}/\hbar$, $\boldsymbol{\Omega} = g_c\mu_B\mathbf{B}/\hbar$, donde \mathbf{B} es el campo magnético externo, μ_B es el magnetón de Bohr, g y g_c son los factores giromagnéticos de los electrones en la BC y de los electrones ligados [49], respectivamente. Los efectos de precesión del espín $\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{S}$ y $\boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{S}_c$ de las ecuaciones cinéticas del modelo de dos cargas (2.10)–(2.15) surgen de estas dos contribuciones [26].

El tercer término del lado derecho de (3.3) es el correspondiente a la interacción hiperfina. Este describe el acoplamiento de un electrón ligado y un núcleo en una TP. El parámetro \mathcal{A} es la constante hiperfina y puede tomar diferentes valores dependiendo de la concentración de los diferentes isótopos de Ga presentes en la muestra. En este trabajo tomamos el promedio ponderado de los valores de la constante hiperfina para los dos isótopos más abundantes en el GaAsN: $^{69}\text{Ga}^{2+}$ con 60% de abundancia y $^{71}\text{Ga}^{2+}$ con el 40% [14].

Los operadores de espín que describen las interacciones Zeeman e IHF en el hamiltoniano (3.3) son: $\hat{\mathbf{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z)$ para los electrones libres, $\hat{\mathbf{S}}_c = (\hat{S}_{cx}, \hat{S}_{cy}, \hat{S}_{cz})$ de los electrones ligados y $\hat{\mathbf{I}}_1 = (\hat{I}_{1x}, \hat{I}_{1y}, \hat{I}_{1z})$ para los núcleos. Cuando un electrón libre es capturado por una TP, respetando el principio de exclusión de Pauli, este forma un estado de singulete que puede ser descrito por los operadores de espín nuclear $\hat{\mathbf{I}}_2 = (\hat{I}_{2x}, \hat{I}_{2y}, \hat{I}_{2z})$ y que no interactúa con el campo magnético externo. Debido a esto, estos operadores no aparecen en el hamiltoniano de espín (3.3).

Otras interacciones del espín electrónico y nuclear con sus alrededores son despreciadas y no contribuyen en el hamiltoniano de espín. Por ejemplo, debido a la fuerte localización de la función de onda 4s, los electrones ligados en los centros paramagnéticos Ga^{2+} tienen una densidad de probabilidad del orden de $|\psi_{4s}|^2 = 72.7 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ [14] lo que provoca un alto valor de la constante hiperfina $\mathcal{A} \approx 8.5 \text{ eV}$ y acopla fuertemente al electrón ligado con su correspondiente núcleo en una TP. Los electrones de la BC, interactúan muy débilmente con sus núcleos vecinos. La densidad de probabilidad de estos electrones es $|\psi_{\text{BC}}|^2 \approx 1/V = 1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, donde V el volumen de la muestra. Por lo tanto, la IHF entre los electrones de la BC y sus núcleos vecinos

puede ser despreciada. Por otro lado, la polarización de espín nuclear de los átomos huésped¹, que son vecinos de los centros de recombinación Ga^{2+} , también debe ser descartada. Esto último se debe a que en caso contrario, esta polarización provocaría un cambio notable en las líneas de resonancia del espín de electrones que son detectadas ópticamente, sin embargo, esto no ha sido observado en experimentos de alta resolución [14, 22]. La dinámica de polarización de los núcleos de estos átomos como una fuente para el campo magnético tipo Overhauser también debe ser excluida del modelo. Si existiera dicha contribución entonces se observaría un máximo adicional y un desplazamiento respecto a campo cero en la curva Hanle [55–57].

3.4 Base de operadores

A pesar de que el modelo de dos cargas ha sido muy exitoso explicando algunas de las principales observaciones experimentales sobre la intensidad de la PL y el grado de polarización del espín en GaAsN bajo bombeo óptico de luz circularmente polarizada, ha fallado en reproducir el comportamiento como función de un campo magnético en configuración de Faraday. Este enfoque no considera la IHF entre los electrones ligados y los correspondientes núcleos en las TP's. Para introducir la IHF en el modelo de dos cargas se requiere definir un espacio de operadores hermitianos y posteriormente, con ayuda de estos, expresar el operador matriz de densidad y el disipador de la ecuación maestra (3.1).

En ausencia de IHF las variables relevantes son: el número de huecos p en BV, el número de electrones n y sus componentes del espín \mathbf{S} en la BC, el número de TP's N_1 , el espín \mathbf{S}_c de sus electrones ligados y el número de trampas apareadas N_2 . El espacio de operadores cuánticos correspondiente a estos observables es

$$\mathcal{V} = \{\hat{p}, \hat{n}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{N}_1, \hat{\mathbf{S}}_c, \hat{N}_2\}. \quad (3.4)$$

Estos generadores cuánticos poseen un álgebra de Lie de dimensión finita ante la conmutación [52, 53]. Es decir,

$$[\hat{p}, \hat{\mathcal{V}}_q] = [\hat{n}, \hat{\mathcal{V}}_q] = [\hat{N}_1, \hat{\mathcal{V}}_q] = [\hat{N}_2, \hat{\mathcal{V}}_q] = 0, \quad (3.5)$$

donde $\hat{\mathcal{V}}_q$ es un miembro de \mathcal{V} . Los operadores de espín cumplen las reglas de conmutación habituales de momento angular [58],

¹Aquí nos referimos a átomos en GaAsN que no son centros paramagnéticos Ga^{2+} .

$$[\hat{S}_i, \hat{S}_j] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{S}_k, \quad [\hat{S}_{c_i}, \hat{S}_{c_j}] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{S}_{c_k}, \quad [\hat{S}_i, \hat{S}_{c_j}] = 0, \quad (3.6)$$

donde los subíndices $i, j = 1, 2, 3$ corresponden a las componentes x, y o z .

El primer paso para estudiar el efecto de la IHF es incluir el espín nuclear $\hat{\mathbf{I}}_1$ de las TP's en la base (3.4). Estos operadores no alteran el álgebra ya que siguen las reglas de conmutación del momento angular

$$[\hat{I}_{1_i}, \hat{I}_{1_j}] = i \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{I}_{1_k}, \quad [\hat{I}_{1_i}, \hat{S}_j] = [\hat{I}_{1_i}, \hat{S}_{c_j}] = 0. \quad (3.7)$$

Sin embargo, la estructura de la interacción IHF dada por $\mathcal{A} \hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_c$ rompe con el álgebra anteriormente descrita y la amplía a un mayor número de operadores. En otras palabras, el hecho de que la interacción IHF se represente como un producto de operadores de espín de electrones ligados y núcleos ocasiona que los conmutadores

$$\begin{aligned} [\hat{S}_{c_i}, \hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_c] &= i \overbrace{\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{I}_{1_j} \hat{S}_{c_k}}^{\text{Operador}}, \\ [\hat{I}_{1_i}, \hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{S}}_c] &= i \underbrace{\sum_{j,k=1}^3 \epsilon_{ijk} \hat{S}_{c_j} \hat{I}_{1_k}}_{\text{Operador}}, \end{aligned} \quad (3.8)$$

den lugar a nuevos operadores que no pueden ser expresados sólo en términos del espín de los electrones ligados o del núcleos. Esto representa la principal dificultad para incluir el efecto de la interacción IHF. Por este motivo, es necesario ampliar la base de operadores de tal forma que su álgebra sea cerrada ante la conmutación con el término de la IHF.

En principio una propuesta puede ser el conjunto de matrices hermitianas linealmente independiente de dimensión 15×15 , definidas a partir de la base (3.2). Sin embargo, la estructura de la matriz de densidad se simplifica considerablemente asumiendo que las cuatro componentes del sistema, BV, BC, TP y TA, están interconectados solamente por el disipador. Esta suposición es razonable si estos espacios están acoplados exclusivamente por los procesos de excitación o recombinación. Así, podemos representar al operador de la matriz de densidad en la siguiente forma

diagonal por bloques

$$\hat{\rho} \doteq \begin{pmatrix} \hat{\rho}_{\text{BV}_{1 \times 1}} & 0_{1 \times 2} & 0_{1 \times 8} & 0_{1 \times 4} \\ 0_{2 \times 1} & \hat{\rho}_{\text{BC}_{2 \times 2}} & 0_{2 \times 8} & 0_{2 \times 4} \\ 0_{8 \times 1} & 0_{8 \times 2} & \hat{\rho}_{18 \times 8} & 0_{8 \times 4} \\ 0_{4 \times 1} & 0_{4 \times 2} & 0_{4 \times 8} & \hat{\rho}_{24 \times 4} \end{pmatrix}_{15 \times 15},$$

$$= \hat{\rho}_{\text{BV}_{1 \times 1}} \oplus \hat{\rho}_{\text{BC}_{2 \times 2}} \oplus \hat{\rho}_{18 \times 8} \oplus \hat{\rho}_{24 \times 4}, \quad (3.9)$$

donde comparando con la figura 3.1, $\hat{\rho}_{\text{BV}}$, $\hat{\rho}_{\text{CB}}$, $\hat{\rho}_1$ y $\hat{\rho}_2$ son las matrices parciales de densidad para huecos en BV, electrones fotogenerados en CB, electrones ligados-núcleos en las TP's, y de electrones en estado de singulete con su correspondiente núcleo en las TA's.

De esta forma, necesitamos un espacio vectorial de 85 operadores hermitianos para estos cuatro bloques diagonales de (3.9), es decir,

$$\Lambda = \{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_{85}\}, \quad (3.10)$$

donde cada $\hat{\lambda}_q$ representa una matriz de dimensión 15×15 . El conjunto de estos generadores (3.10) están definidos en el espacio de Liouville [36], a saber, un espacio de Hilbert-Schmit de *operadores hermitianos y ortogonales* definido por el producto interno

$$\langle \hat{\lambda}_i, \hat{\lambda}_j \rangle \equiv \text{Tr} [\hat{\lambda}_i^\dagger \hat{\lambda}_j] = \text{Tr} [\hat{\lambda}_i \hat{\lambda}_j] = \delta_{i,j} \text{Tr} [\hat{\lambda}_i^2], \quad (3.11)$$

lo anterior fija un producto escalar respecto a la traza para dos elementos cualquiera de (3.10).

Una elección conveniente para definir este conjunto de operadores (3.10), es usar los generadores de los grupos unitarios $U(1)$, $U(2)$, $U(8)$ y $U(4)$. Así, la forma explícita de este conjunto de generadores cuánticos esta dado por

$$\Lambda = \{\hat{p}, \hat{S}_i, \hat{U}_{k,j,i}, \hat{V}_{j,i}\}, \quad i, j, k = 0, 1, 2, 3, \quad (3.12)$$

donde \hat{p} , \hat{S}_i , $\hat{U}_{k,j,i}$, y $\hat{V}_{j,i}$ son los operadores hermitianos para los bloques de BV, BC, TP y TA respectivamente.

Por ejemplo, en el caso de los huecos en BV el generador asociado a este espacio es

$$\hat{p} \doteq \begin{pmatrix} \hat{1}_{1 \times 1} & 0_{1 \times 2} & 0_{1 \times 8} & 0_{1 \times 4} \\ 0_{2 \times 1} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 8} & 0_{2 \times 4} \\ 0_{8 \times 1} & 0_{8 \times 2} & 0_{8 \times 8} & 0_{8 \times 4} \\ 0_{4 \times 1} & 0_{4 \times 2} & 0_{4 \times 8} & 0_{4 \times 4} \end{pmatrix},$$

$$= \hat{1}_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}. \quad (3.13)$$

Los operadores que generan el espacio del bloque de la BC son expresados de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\hat{S}_i &\doteq \begin{pmatrix} 0_{1 \times 1} & 0_{1 \times 2} & 0_{1 \times 8} & 0_{1 \times 4} \\ 0_{2 \times 1} & \hat{s}_i & 0_{2 \times 8} & 0_{2 \times 4} \\ 0_{8 \times 1} & 0_{8 \times 2} & 0_{8 \times 8} & 0_{8 \times 4} \\ 0_{4 \times 1} & 0_{4 \times 2} & 0_{4 \times 8} & 0_{4 \times 4} \end{pmatrix}, \\ &= 0_{1 \times 1} \oplus (\hat{s}_i)_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad i = 0, 1, 2, 3,\end{aligned}\quad (3.14)$$

donde el operador del número de electrones en la BC es dado por $\hat{n} = \hat{S}_0$ y \hat{S}_i con $i = 1, 2, 3$, las correspondientes componentes de espín. Los operadores \hat{s}_i en (3.14) están definidos como

$$\hat{s}_0 = \hat{1}, \quad \hat{s}_1 = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_1, \quad \hat{s}_2 = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_2, \quad \hat{s}_3 = \frac{1}{2}\hat{\sigma}_3, \quad (3.15)$$

con $\hat{1}$ una matriz identidad de dimensión 2×2 y $\hat{\sigma}_i$ las matrices de Pauli [58].

Los operadores hermitianos (3.15) satisfacen la siguiente regla de conmutación

$$[\hat{s}_i, \hat{s}_j] = i \sum_{k=0}^3 \mathcal{C}_{ijk} \hat{s}_k, \quad (3.16)$$

donde \mathcal{C}_{ijk} son las constantes de estructura del álgebra de Lie [52, 53, 59] y tienen un valor $\mathcal{C}_{ijk} = 0$ si $i, j = 0$ y $\mathcal{C}_{ijk} = \epsilon_{ijk}$ para $i, j = 1, 2, 3$, con ϵ_{ijk} el tensor de Levi-Civita.

Usando estos operadores (3.15), podemos encontrar el bloque de generadores cuánticos para las TP's de la siguiente manera

$$\begin{aligned}\hat{U}_{k,j,i} &\doteq \begin{pmatrix} 0_{1 \times 1} & 0_{1 \times 2} & 0_{1 \times 8} & 0_{1 \times 4} \\ 0_{2 \times 1} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 8} & 0_{2 \times 4} \\ 0_{8 \times 1} & 0_{8 \times 2} & \hat{s}_k \otimes \hat{s}_j \otimes \hat{s}_i & 0_{8 \times 4} \\ 0_{4 \times 1} & 0_{4 \times 2} & 0_{4 \times 8} & 0_{4 \times 4} \end{pmatrix}, \\ &= 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus (\hat{s}_k \otimes \hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad k, j, i = 0, 1, 2, 3,\end{aligned}\quad (3.17)$$

y en el caso de las TA's el bloque es definido como

$$\begin{aligned}\hat{V}_{j,i} &\doteq \begin{pmatrix} 0_{1 \times 1} & 0_{1 \times 2} & 0_{1 \times 8} & 0_{1 \times 4} \\ 0_{2 \times 1} & 0_{2 \times 2} & 0_{2 \times 8} & 0_{2 \times 4} \\ 0_{8 \times 1} & 0_{8 \times 2} & 0_{8 \times 8} & 0_{8 \times 4} \\ 0_{4 \times 1} & 0_{4 \times 2} & 0_{4 \times 8} & \hat{s}_j \otimes \hat{s}_i \end{pmatrix}, \\ &= 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus (\hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{4 \times 4}, \quad j, i = 0, 1, 2, 3.\end{aligned}\quad (3.18)$$

En correspondencia con la base de operadores del modelo de dos cargas (3.4), en este nuevo esquema de generadores cuánticos (3.14), (3.17) y (3.18), el operador

del número de TP's es $\hat{N}_1 = \hat{U}_{0,0,0}$ y para TA's es $\hat{N}_2 = \hat{V}_{0,0}$. De forma análoga los operadores de espín en la BC son $\hat{S}_x = \hat{S}_1$, $\hat{S}_y = \hat{S}_2$ y $\hat{S}_z = \hat{S}_3$. Los operadores de espín de los electrones ligados en las TP's son $\hat{S}_{cx} = \hat{U}_{1,0,0}$, $\hat{S}_{cy} = \hat{U}_{2,0,0}$ y $\hat{S}_{cz} = \hat{U}_{3,0,0}$. Y por último, los operadores de espín nuclear para las trampas desocupadas \hat{I}_1 y ocupadas \hat{I}_2 son

$$\hat{I}_1 = \sum_{j,i=0}^3 \frac{\text{Tr}[\hat{I}_1 \hat{U}_{0,j,i}]}{\text{Tr}[\hat{U}_{0,j,i} \hat{U}_{0,j,i}]} = \mathbf{M} \hat{U}, \quad (3.19)$$

$$\hat{I}_2 = \sum_{j,i=0}^3 \frac{\text{Tr}[\hat{I}_2 \hat{V}_{j,i}]}{\text{Tr}[\hat{V}_{j,i} \hat{V}_{j,i}]} = \mathbf{M} \hat{V}, \quad (3.20)$$

donde

$$\hat{U}^\top = (\hat{U}_{0,0,1}, \hat{U}_{0,1,1}, \hat{U}_{0,2,2}, \hat{U}_{0,0,2}, \hat{U}_{0,1,2}, \hat{U}_{0,2,1}, \hat{U}_{0,0,3}, \hat{U}_{0,3,0}), \quad (3.21)$$

$$\hat{V}^\top = (\hat{V}_{0,1}, \hat{V}_{1,1}, \hat{V}_{2,2}, \hat{V}_{0,2}, \hat{V}_{1,2}, \hat{V}_{2,1}, \hat{V}_{0,3}, \hat{V}_{3,0}), \quad (3.22)$$

y

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 2 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & -2 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

En las relaciones (3.19) y (3.20) hemos usado el hecho de que cualquier operador \hat{O} es expresado como una combinación lineal de elementos de (3.12) de la siguiente manera

$$\hat{O} = \sum_{q=1}^{85} \frac{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q \hat{O}]}{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q, \quad (3.24)$$

esta expresión es una consecuencia de la propiedad de productor interno (3.11) de la base de generadores (3.12).

3.5 Matriz de densidad y disipador

En esta parte nos enfocamos en definir el operador matriz de densidad $\hat{\rho}$ y el disipador $\hat{\mathcal{D}}$ de la ecuación maestra (3.1). El operador matriz de densidad contiene las contribuciones de los *subensembles*: huecos en BV, electrones en la BC, electrones–núcleos en las TP's y electrones en estado de singulete con su correspondientes núcleo en las TA's. Por otra parte, el disipador está formado por los mecanismos de relajación de espín, procesos de recombinación dependiente e independiente del espín y fotogeneración de electrones–huecos. Los últimos dos mecanismos conectan a los *subensembles* y esta característica simplifica el número de operadores cuánticos en este problema.

3.5.1 Operador matriz de densidad

Ahora definimos el operador matriz de densidad. En la sección anterior discutimos que en ausencia de IHF las variables relevantes son p , n , \mathbf{S} , N_1 , \mathbf{S}_c y N_2 . En este enfoque, estas observables físicas son *promedios estadísticos cuánticos* de los correspondientes operadores de la base (3.4), es decir, $n = \text{Tr}[\hat{n}\hat{\rho}]$, $\mathbf{S} = \text{Tr}[\hat{\mathbf{S}}\hat{\rho}]$, $N_1 = \text{Tr}[\hat{N}_1\hat{\rho}]$, $\mathbf{S}_c = \text{Tr}[\hat{\mathbf{S}}_c\hat{\rho}]$, $N_2 = \text{Tr}[\hat{N}_2\hat{\rho}]$. De esto último, se infiere que existe una relación entre el valor de expectación de un operador hermitiano \hat{O} y la definición del producto interno (3.11) como sigue

$$O = \langle \hat{O}, \hat{\rho} \rangle = \text{Tr}[\hat{O}\hat{\rho}]. \quad (3.25)$$

En el caso de los generadores de la base Λ , los correspondientes promedios estadísticos cuánticos son dados por

$$\lambda_q = \text{Tr}[\hat{\lambda}_q\hat{\rho}]. \quad (3.26)$$

Así de la base (3.12), su correspondiente promedio estadístico cuántico (3.26) y de la forma matricial por bloques (3.9) podemos expresar la matriz de densidad como una combinación lineal de la forma [39]

$$\hat{\rho} = \sum_{q=1}^{85} \frac{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q\hat{\rho}]}{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q = \sum_{q=1}^{85} \frac{\lambda_q}{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q. \quad (3.27)$$

En la expresión anterior $\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]$ corresponde a la normalización de cada uno de los elementos de Λ . Notamos que la elección de generadores hermitianos $\hat{\lambda}_q$ en Λ asegura que la matriz de densidad cumpla

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}^\dagger, \quad (3.28)$$

que es una de las propiedades fundamentales de este operador [58]. Además es importante señalar que la evolución temporal del operador (3.27) es dada por la ecuación maestra (3.1), lo que implica que $\hat{\rho} \equiv \hat{\rho}(t)$ y por lo tanto $\lambda_q \equiv \lambda_q(t)$.

3.5.2 Disipador

Como mencionamos anteriormente, el disipador $\hat{\mathcal{D}}$ contiene las interacciones entre BV, BC, TP, TA, y de los alrededores que afectan a cada una de estos *subensembles*. Para este enfoque, podemos dividir este operador en seis partes

$$\hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}) = \hat{\mathcal{G}} + \hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}} + \hat{\mathcal{D}}_{\text{S}} + \hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}} + \hat{\mathcal{D}}_1 + \hat{\mathcal{D}}_2. \quad (3.29)$$

El primer término $\hat{\mathcal{G}}$ en la expresión anterior, corresponde a la fotogeneración de huecos en la BV y de electrones en la BC. La captura selectiva de los electrones

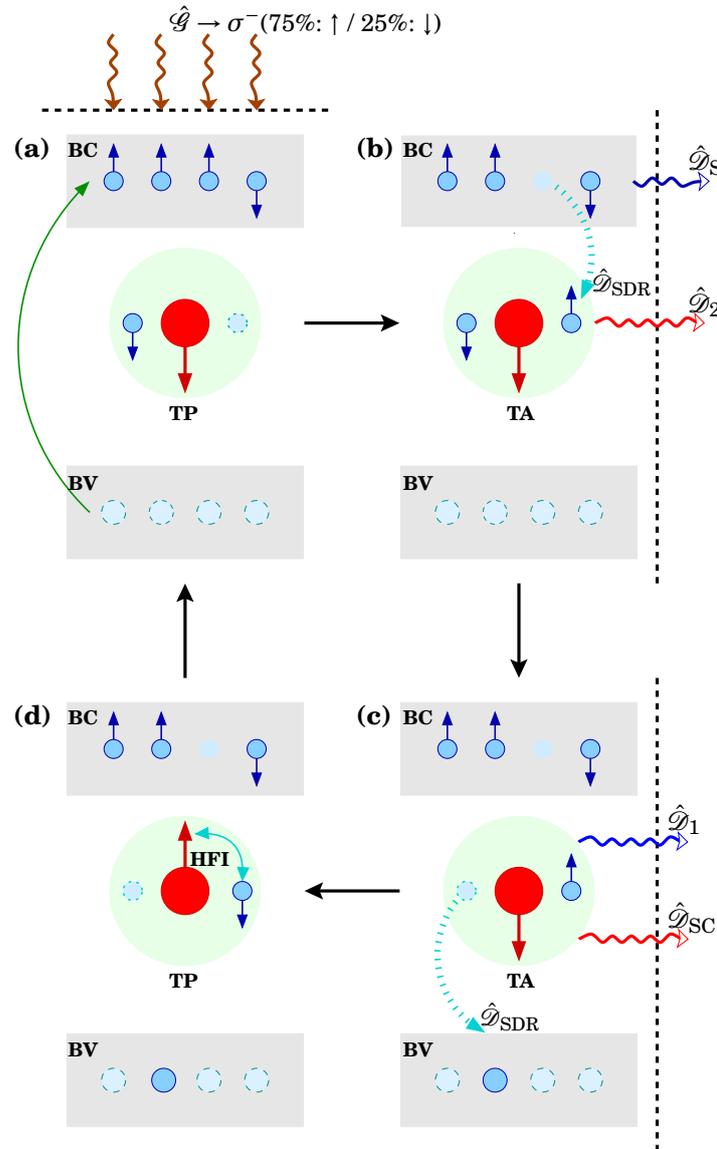


Figura 3.2: Diagrama esquemático de la transferencia de espín en GaAsN. (a) De las reglas de selección para GaAs se fotogeneran cuatro huecos despolarizados en la BV, tres electrones con espín $S_z = +1/2$ y uno con $S_z = -1/2$ en la BC con luz 100% circularmente polarizada hacia la izquierda. (b) Una TP cuyo electrón ligado posee un espín opuesto a los de la BC, captura un electrón formando un estado de singulete. Esto genera una transferencia de momento de la BC hacia la TP. Simultáneamente existe una relajación del espín nuclear \hat{S} en la TA y electrónico \hat{S}_{SDR} en la BC. Esto produce una pérdida de momento angular hacia los alrededores. (c) Posteriormente uno de los electrones en estado de singulete se recombina a la BV independiente de su valor de espín. En este punto y de forma similar existe una pérdida de espín debido a la relajación del espín nuclear \hat{S}_1 y electrónico \hat{S}_{SC} en la TP. (d) Por último, el electrón ligado transfiere momento angular al núcleo por medio de una serie de flip-flops debidas a la IHF. De (d) a (a) la TP captura otro electrón y el ciclo se repite nuevamente.

en la BC hacia las TP's dependiente de su orientación de espín y posteriormente de su recombinación independiente del espín hacia la BV esta descrito por $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}$. Los términos $\hat{\mathcal{D}}_{\text{S}}$ y $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}$ contabilizan la relajación del espín electrónico en la BC y en las TP's respectivamente. Por último, la relajación del espín nuclear en las TP's y TA's son introducidos por los disipadores $\hat{\mathcal{D}}_1$ y $\hat{\mathcal{D}}_2$.

En la figura 3.2 ejemplificamos el proceso de generación y trasferencia de espín entre las diferentes partes del sistema. En este esquema incluimos los elementos del disipador (3.29) y el intercambio momento angular electrón–núcleo debido a la IHF que se incluye en el hamiltoniano (3.3).

El disipador de fotogeneración de huecos y electrones $\hat{\mathcal{G}}$, está es dado por la expresión

$$\hat{\mathcal{G}} = (G_{\uparrow} + G_{\downarrow})(\hat{p} + \hat{n}) + (G_{\uparrow} - G_{\downarrow})\hat{e} \cdot \hat{\mathbf{S}}, \quad (3.30)$$

donde G_{\uparrow} y G_{\downarrow} son las tasas de generación de electrones con espín hacia arriba y espín hacia abajo correspondientemente. De esta manera, la suma $G_{\uparrow} + G_{\downarrow}$ introduce el número total de huecos–electrones generados y la resta $G_{\uparrow} - G_{\downarrow}$ representa la polarización generada en la BC. El vector unitario \hat{e} indica la dirección de la luz incidente sobre la muestra.

En el caso del disipador $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}$, éste posee una expresión similar al operador matriz de densidad (3.27) y esta definido como

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}} = \sum_{q=1}^{85} \frac{C[\hat{\lambda}_q]}{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q, \quad (3.31)$$

donde los coeficientes

$$C[\hat{\lambda}_q] = \text{Tr}[\hat{\lambda}_q \hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}], \quad (3.32)$$

introducen todos los procesos de recombinación dependiente e independiente del espín.

Para determinar estos coeficientes (3.32) empleamos el modelo de dos cargas [12, 25] enunciado en la sección 2.4 y los correspondientemente operadores de este sistema (3.12). Al insertar (3.31) en la ecuación maestra, multiplicar por \hat{n} , \hat{p} , \hat{N}_1 , \hat{N}_2 , $\hat{\mathbf{S}}$ o $\hat{\mathbf{S}}_c$ y tomar la traza, obtenemos

$$C[\hat{p}] = -c_p p N_2, \quad (3.33)$$

$$C[\hat{n}] = -c_n (n N_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c), \quad (3.34)$$

$$C[\hat{\mathbf{S}}] = -c_n (\mathbf{S} N_1 - \mathbf{S}_c n), \quad (3.35)$$

$$C[\hat{N}_1] = c_p N_2 p - c_n (n N_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c), \quad (3.36)$$

$$C[\hat{\mathbf{S}}_c] = -c_n (\mathbf{S}_c n - \mathbf{S} N_1), \quad (3.37)$$

$$C[\hat{N}_2] = -c_p N_2 p + c_n (n N_1 - 4\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}_c), \quad (3.38)$$

donde hemos tomado únicamente los términos que corresponden a los procesos de recombinación del modelo de dos cargas.

A las ecuaciones (3.33)–(3.38) les corresponden únicamente 10 coeficientes de los 85 que se necesitan para determinar completamente el disipador (3.31). Para encontrar los restantes, imponemos que el medio sea isotrópico. Esto implica que la ecuación maestra (3.1) debe ser invariante bajo rotaciones del espacio. Debido a esta propiedad, el conjunto completo de coeficientes para $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}$ es

$$C[\hat{p}] = -c_p p V_{0,0}, \quad (3.39)$$

$$C[\hat{n}] = -c_n \left(S_0 U_{0,0,0} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,0,0} \right), \quad (3.40)$$

$$C[\hat{S}_k] = -c_n (S_k U_{0,0,0} - S_0 U_{k,0,0}), \quad (3.41)$$

$$C[\hat{U}_{0,j,i}] = c_p p V_{j,i} - c_n \left(S_0 U_{0,j,i} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i} \right), \quad (3.42)$$

$$C[\hat{U}_{k,j,i}] = -c_n (S_0 U_{k,j,i} - S_k U_{0,j,i}), \quad (3.43)$$

$$C[\hat{V}_{j,i}] = -c_p p V_{j,i} + c_n \left(S_0 U_{0,j,i} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i} \right), \quad (3.44)$$

donde $i, j = 0, 1, 2, 3$ y $k = 1, 2, 3$. En el apéndice B explicamos con más a detalle la obtención de este sistema de ecuaciones de balance.

Los siguientes elementos a estudiar en el disipador (3.29) son los términos que introducen los procesos de relajación de espín de los electrones $\hat{\mathcal{D}}_{\text{S}}$ en la BC y de relajación de los electrones ligados $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}$ en las trampas desocupadas.

Se sabe que en los semiconductores con estructura cristalina tipo zinc–blenda², el principal proceso de relajación de espín en la BC es debido al mecanismo de Dyakonov–Perel [60]. Este consiste en un desdoblamiento de los niveles de energía de la interacción espín–órbita que es equivalente a un campo magnético aleatorio que afecta al espín del electrón. Debido a esto, existe una precesión del espín alrededor de dicho campo aleatorio con una frecuencia de Larmor proporcional a la magnitud del desdoblamiento de energía [61]. El efecto de este mecanismo se contabiliza con una relajación sobre el espín de los electrones en la BC y que introducimos en nuestro modelo de la siguiente manera

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{S}} = -\frac{1}{\tau_s} \sum_{q=3}^5 \frac{\lambda_q}{\text{Tr}[\lambda_q^2]} \hat{\lambda}_q = -\frac{2}{\tau_s} \sum_{i=1}^3 S_i \hat{S}_i, \quad (3.45)$$

donde τ_s es el tiempo de relajación del espín en la BC.

²Aproximadamente el 96% de toda su estructura cristalina del GaAsN es del tipo zinc–blenda.

En el caso de la relajación del espín de los electrones ligados de las TP's, utilizamos el mecanismo fenomenológico introducido en la Ref. [27] y esta dado por

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}} = -\frac{1}{\tau_{sc}} \sum_{k=1}^3 \sum_{j,i=0}^3 \frac{U_{k,j,i}}{\text{Tr}[\hat{U}_{k,j,i}^2]} \hat{U}_{k,j,i}. \quad (3.46)$$

donde τ_{sc} representa el tiempo de relación del espín en una trampa desocupada. A pesar de que el origen de dicho mecanismo es todavía desconocido, este puede entenderse como la interacción del espín electrónico con un campo magnético efectivo aleatorio generado por el medio. Una característica importante de los disipadores (3.45) y (3.46), es que dan origen a los términos \mathbf{S}/τ_s y \mathbf{S}_c/τ_{sc} de relajación de espín en el modelo de dos cargas (2.10)–(2.15).

Ahora nos enfocamos en los mecanismos de relajación de espín nuclear (NSR, Nuclear Spin Relaxation por sus siglas en Inglés) tanto para las trampas desocupadas como para las ocupadas. En particular, revisamos tres posibles mecanismos de NSR: no-selectivo; dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico. En el caso de los mecanismos tipo dipolar y cuadrupolar empleamos la teoría de Wangness–Bloch–Redfield, que revisamos en el apéndice C.

Como primer caso estudiamos el mecanismo fenomenológico llamado no-selectivo introducido en la Ref. [27]. Inicialmente es introducido para incluir relajación del espín nuclear en centros de recombinación donde I es arbitrario y posteriormente empleado en el caso particular de un sistema con $I = 1/2$. La forma particular de este mecanismo introduce relajación en todo término relacionado con el espín nuclear en las trampas desocupadas y ocupadas. En el caso de $I = 3/2$, los disipadores no-selectivos toman la forma

$$(\hat{\mathcal{D}}_1)_{s,m;s',m'} = -\frac{1}{\tau_{n1}} \left(\rho_{1;s,m;s',m'} - \frac{\delta_{m,m'}}{4} \sum_{m''=-3/2}^{3/2} \rho_{1;s,m'';s',m''} \right), \quad (3.47)$$

para las trampas desocupadas y

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{m,m'} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\rho_{2;m,m'} - \frac{\delta_{m,m'}}{4} \sum_{m''=-3/2}^{3/2} \rho_{2;m'',m''} \right), \quad (3.48)$$

para las trampas ocupadas. Los índices $s = -1/2, 1/2$ y $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ están relacionados con los estados del espín del electrón ligado y del núcleo como se muestran en la figura 3.1. Los tiempos τ_{n1} y τ_{n2} son los tiempos de relajación del núcleo cuando su trampa posee un sólo electrón ligado (ver figura 3.2(c)) o dos electrones en estado de singulete (ver figura 3.2(b)).

Los disipadores no-selectivos (3.47) y (3.48) son altamente simétricos y reproducen correctamente el aumento de la polarización en configuración de Faraday como función

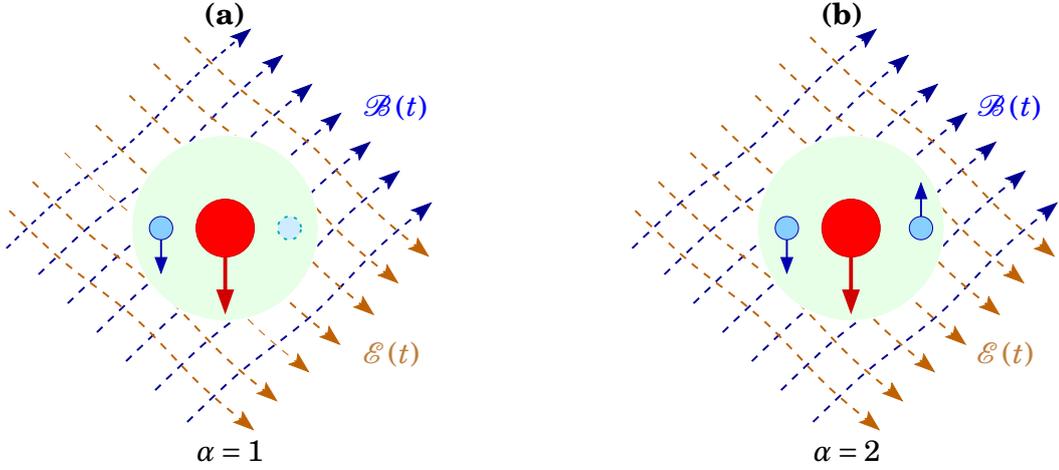


Figura 3.3: Esquema ilustrativo de las fluctuaciones del campo magnético (azul) y eléctrico (cafe) para: (a) una trampa desocupada y (b) una trampa ocupada.

de B_z . Sin embargo, no dan lugar a un campo tipo Overhauser y por lo tanto no existe un desplazamiento del mínimo en las curvas de polarización del espín o de la intensidad de la PL. Esto último indica que es de suma importancia estudiar otros mecanismos de NSR que describan ambos efectos.

De lo anterior, consideramos un segundo mecanismo NSR debido a la interacción dipolar entre un núcleo y un campo magnético fluctuante producido por los núcleos vecinos de Ga^{2+} [33, 62]. El hamiltoniano que describe esta interacción se muestra en el apéndice D.1 y es de la forma

$$\hat{H}_{D_\alpha}(t) = \sum_{r=-1}^1 \mathcal{F}^{*(1,r)}(t) \hat{T}_\alpha^{(1,r)}, \quad \alpha = 1, 2, \quad (3.49)$$

donde $\hat{T}_\alpha^{(k,r)}$ son los tensores esféricos irreducibles de rango $k = 1$ (ecs. (D.3)–(D.4)) con $\alpha = 1$ para las trampas desocupadas y $\alpha = 2$ en el caso de trampas ocupadas. Las funciones $\mathcal{F}^{(1,r)}(t)$ (ecs. (D.5)–(D.6)) están relacionadas con las fluctuaciones del campo magnético como se ilustra en la figura 3.3.

Usando el hamiltoniano (3.49) y la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield del apéndice C, encontramos que el disipador nuclear (C.21) debido a contribuciones del tipo dipolar magnético es de la forma

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}_\alpha &= -\frac{1}{3\tau_{n\alpha}} \sum_{r=-1}^1 \left[\hat{T}_\alpha^{\dagger(1,r)}, \left[\hat{T}_\alpha^{(1,r)}, \hat{\rho}(t) \right] \right], \\ &= -\frac{1}{3\tau_{n\alpha}} \sum_{i=x,y,z} \left[\hat{I}_{\alpha i}, \left[\hat{I}_{\alpha i}, \hat{\rho}(t) \right] \right], \quad \alpha = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.50)$$

donde $\hat{I}_{\alpha i}$ son las componentes del espín nuclear y $\tau_{n\alpha}$ (ver ecuación (C.19)) es el tiempo de relajación nuclear de la interacción dipolar magnética en las trampas desocupadas ($\alpha = 1$) y ocupadas ($\alpha = 2$). La forma explícita de los elementos de matriz del disipador dipolar magnético para las TP's y TA's son mostrados en el apéndice D.3.

Finalmente estudiamos un tercer mecanismo de NSR, que se origina por las posibles fluctuaciones del gradiente de un campo eléctrico del tipo cuadrupolar [33, 35, 62]. El hamiltoniano de esta interacción se presenta en el apéndice D.2 y es de la forma

$$\hat{H}_{Q\alpha}(t) = \sum_{r=-2}^2 \mathcal{F}^{*(2,r)}(t) \hat{T}_{\alpha}^{(2,r)}, \quad \alpha = 1, 2. \quad (3.51)$$

Similar al caso dipolar magnético, los operadores $\hat{T}_{\alpha}^{(k,r)}$ son tensores esféricos irreducibles de rango $k = 2$ (ecs. (D.10)–(D.12)) para las trampas desocupadas u ocupadas. En este caso $\mathcal{F}^{(2,r)}(t)$ se relacionan con las fluctuaciones del gradiente del campo eléctrico (ecs. (D.13)–(D.15)) como se muestra en la figura 3.3.

El disipador nuclear debido a la interacción cuadrupolar eléctrica definido por el hamiltoniano (3.51) y la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield (apéndice C) es

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{D}}_{\alpha} &= -\frac{1}{2\tau_{n\alpha}} \sum_{r=-2}^2 \left[\hat{T}_{\alpha}^{\dagger(2,r)}, \left[\hat{T}_{\alpha}^{(2,r)}, \hat{\rho}(t) \right] \right], \\ &= -\frac{1}{2\tau_{n\alpha}} \sum_{i=1}^5 \left[\hat{Q}_{\alpha i}, \left[\hat{Q}_{\alpha i}, \hat{\rho}(t) \right] \right], \quad \alpha = 1, 2, \end{aligned} \quad (3.52)$$

donde

$$\hat{Q}_{\alpha 1} = \frac{1}{6} \left(2\hat{I}_{\alpha z}^2 - \hat{I}_{\alpha y}^2 - \hat{I}_{\alpha x}^2 \right), \quad (3.53)$$

$$\hat{Q}_{\alpha 2} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\hat{I}_{\alpha x} \hat{I}_{\alpha z} + \hat{I}_{\alpha z} \hat{I}_{\alpha x} \right), \quad (3.54)$$

$$\hat{Q}_{\alpha 3} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\hat{I}_{\alpha y} \hat{I}_{\alpha z} + \hat{I}_{\alpha z} \hat{I}_{\alpha y} \right), \quad (3.55)$$

$$\hat{Q}_{\alpha 4} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\hat{I}_{\alpha x}^2 - \hat{I}_{\alpha y}^2 \right), \quad (3.56)$$

$$\hat{Q}_{\alpha 5} = \frac{1}{2\sqrt{3}} \left(\hat{I}_{\alpha x} \hat{I}_{\alpha y} + \hat{I}_{\alpha y} \hat{I}_{\alpha x} \right), \quad (3.57)$$

son operadores hermitianos relacionados con los $\hat{T}_{\alpha}^{(k,r)}$ y $\tau_{n\alpha}$ es el tiempo de relajación nuclear (C.19). Similarmente, la forma explícita de los elementos de matriz del disipador cuadrupolar eléctrico (3.52) para las TP's y TA's son mostrados en el apéndice D.4.

Para finalizar esta sección, proponemos un enfoque adicional para abordar los mecanismos de relajación del espín electrónico $\hat{\mathcal{D}}_S$ y $\hat{\mathcal{D}}_{SC}$. En la BC este mecanismo

es debido a un campo magnético aleatorio que proviene del desdoblamiento de los niveles de energía de la interacción espín-órbita y que es de tipo dipolar magnético. De lo anterior usando la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield, el disipador para la relajación del espín es

$$\hat{\mathcal{D}}_S = -\frac{1}{2\tau_s} \sum_{i=x,y,z} [\hat{S}_i, [\hat{S}_i, \hat{\rho}(t)]] \quad (3.58)$$

donde \hat{S}_i son los operadores de espín y τ_s el tiempo de relajación del espín en la BC debido al mecanismo dipolar magnético.

En el caso de las TP's, el campo magnético dipolar generado por las trampas vecinas producen, de forma similar al caso nuclear, una relajación en el espín de los electrones ligados. Entonces $\hat{\mathcal{D}}_{SC}$ tiene la forma

$$\hat{\mathcal{D}}_{SC} = -\frac{1}{2\tau_{sc}} \sum_{i=x,y,z} [\hat{S}_{ci}, [\hat{S}_{ci}, \hat{\rho}(t)]] \quad (3.59)$$

con $\hat{S}_{cx} = \hat{U}_{1,0,0}$, $\hat{S}_{cy} = \hat{U}_{2,0,0}$, $\hat{S}_{cz} = \hat{U}_{3,0,0}$ y τ_{sc} el tiempo de relajación del espín en las TP's producido por un campo magnético dipolar.

Se puede demostrar que las expresiones (3.58) y (3.59) pueden ser llevadas a la forma (3.45)–(3.46) empleando la definición del operador $\hat{\rho}$ y desarrollando el doble conmutador. Con esto hemos dado un posible origen a la relajación del espín del electrón en las trampas desocupadas.

3.6 Ecuaciones cinéticas y régimen de onda continua

Con el fin de extraer información de la ecuación maestra (3.1), construimos un sistema de ecuaciones cinéticas. En lugar de resolver directamente las ecuaciones diferenciales que surgen de los elementos de (3.1), resolvemos las ecuaciones diferenciales para los promedios estadísticos cuánticos de los elementos de los generadores Λ . Con este fin, multiplicamos de ambos lados de la ecuación maestra por cada generador $\hat{\lambda}_q$ de la base (3.12) y posteriormente tomamos la traza, esto es

$$\begin{aligned} \dot{\lambda}_q &= \text{Tr} \left[\hat{\lambda}_q \frac{d\hat{\rho}}{dt} \right] = \text{Tr} \left\{ \frac{i}{\hbar} \hat{\lambda}_q [\hat{\rho}, \hat{H}] + \hat{\lambda}_q \hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}) \right\} \\ &= F_q(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n, t), \quad q = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (3.60)$$

con esto generamos un sistema de $n = 85$ ecuaciones diferenciales de primer orden no-lineales y altamente acopladas.

A diferencia del modelo de dos cargas que sólo considera el mecanismo de SDR, la interacción Zeeman y la relajación del espín electrónico en la BC y TP's; este nuevo sistema de ecuaciones (3.60) toma en cuenta estos procesos y los efectos de la IHF y los mecanismos de NSR. Así, para estudiar la dinámica de electrones y núcleos necesitamos resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales (3.60). Los observables físicos relevantes son obtenidos de la solución de las funciones $\lambda_q \equiv \lambda_q(t)$, que a su vez son promedios estadísticos cuánticos.

En la solución de este conjunto de ecuaciones asumimos que antes de la excitación óptica, en $t = 0$, las trampas desocupadas están completamente despolarizadas en el espín electrónico y nuclear. De igual forma no existe ningún electrón–hueco generado en la BC y la BV. Por lo tanto, las condiciones iniciales para (3.60) son

$$N_1(0) = \lambda_6(0) = N_c, \quad (3.61)$$

$$\lambda_q(0) = 0 \quad \text{para } q \neq 6, \quad (3.62)$$

donde N_c es el número total de trampas paramagnéticas Ga^{2+} . Notamos que estas condiciones iniciales también implican que a este tiempo no existen trampas apareadas, es decir, $N_2(0) = \lambda_{70}(0) = 0$.

De forma similar en la solución de (3.60), empleamos el régimen de onda continua en la generación de huecos en la BV y de electrones con espín \uparrow o espín \downarrow en la BC. La expresión que describe la fotogeneración [26] es

$$G_{\uparrow,\downarrow} = WG_0 \frac{1 \pm P_i}{2} \left\{ \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{t-t_0}{\sigma}\right) \right] \right\}, \quad (3.63)$$

donde W es la potencia del láser y el factor $G_0 = 2.875 \times 10^{23} \text{ mW}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ da la relación entre la tasa de generación de electrones–huecos respecto a la potencia [27]. El encendido del láser esta modelado por una tangente hiperbólica para simular el efecto de una función escalón, el parámetro $\sigma = 10 \text{ ps}$ representa el ancho del escalón y $t_0 = 100 \text{ ps}$ da el tiempo de inicio del encendido del láser. El parámetro P_i modula el grado de polarización de la excitación óptica. En el caso de $P_i = 0$ se genera luz linealmente y si $P_i \neq 0$ entonces produce luz circularmente polarizada. Se ha reportado que bajo luz circularmente polarizada, el valor de P_i depende fuertemente de la concentración de Nitrógeno y de la energía de excitación sobre la muestra [63]. Por ejemplo con un 2.1% de N ($\text{GaAs}_{0.979}\text{N}_{0.021}$) y una energía de excitación ($\hbar\omega_{\text{exc}}$) entre los valores 1.393 eV y 1.312 eV, el valor de $|P_i|$ puede encontrarse en el intervalo [0.08, 0.24] [20]. En esta tesis, usamos los valores de $P_i = -0.15$ para luz circularmente polarizada hacia la derecha (σ^+) y $P_i = +0.15$ para circularmente

Parámetro	Símbolo	Valor	Unidades
Constante hiperfina	\mathcal{A}	6.9×10^{-2}	cm^{-1}
	\mathcal{A}	8.5	μeV
Constante de Planck	\hbar	$1,054 \times 10^{-34}$	J s
	\hbar	$6,582 \times 10^{-16}$	eV s
Magnetón de Bohr	μ_g	9.274×10^{-24}	J T^{-1}
	μ_g	5.788×10^{-5}	eV T^{-1}
Factor giromagnético de electrones en la BC	g	+1	
Factor giromagnético de electrones en las TP's	g_c	+2	
Número total de trampas de Ga	N_c	3×10^{15}	cm^{-3}
Tiempo de vida de huecos en la BV	$\tau_h = 1/c_p N_c$	12	ps
Tiempo de vida de electrones en la BC	$\tau^* = 1/c_n N_c$	4.4	ps
Tiempo de relajación del espín de los electrones en la BC	τ_s	110	ps
Tiempo de relajación del espín de los electrones en las TP's	τ_{sc}	1700	ps

Cuadro 3.1: Valores de los parámetros físicos para la solución del sistema de ecuaciones (3.60) [20, 26, 47].

polarizada hacia la izquierda (σ^-). Finalmente con la expresión (3.63) y los valores mencionados anteriormente, queda definido el disipador de fotogeneración $\hat{\mathcal{G}}$ de la expresión (3.30).

Otros parámetros para la solución del sistema ecuaciones cinéticas son mostrados en el cuadro (3.1). Estos son estimados a partir de resultados experimentales reportados en las referencias [11, 12, 20, 24]. En el caso de los núcleos de las trampas desocupadas, el valor de la constante hiperfina \mathcal{A} corresponde al promedio ponderado de los dos isótopos más estables de los átomos ^{69}Ga y ^{71}Ga [20, 26, 47]. Los tiempos de relajación nuclear τ_{n1} y τ_{n2} no son reportados para este cuadro. En el capítulo 4, estos son determinados comparando la solución numérica de este trabajo y datos experimentales reportados previamente. Por último, es importante señalar que las mediciones experimentales sobre la muestra se realizan en el supuesto que las poblaciones de electrones en la BC, trampas desocupadas, trampas ocupadas, huecos en la BV y las correspondientes polarizaciones en el espín han alcanzado un estado estacionario. Esto significa que las mediciones en la intensidad de PL y en el grado de polarización del espín de la BC son constantes en el tiempo. Debido a esto, en esta tesis resolvemos el sistema de ecuaciones diferenciales (3.60) en el intervalo de tiempo $t \in [0, 200]$ ns y que es un lapso de tiempo suficientemente largo para conseguir que el sistema pueda conseguir estas condiciones de estado estacionario.

CONFIGURACIÓN DE FARADAY Y RELAJACIÓN DE ESPÍN NUCLEAR

4.1 Introducción

En este capítulo empleamos el modelo teórico desarrollado anteriormente para examinar la relevancia de la IHF y de los procesos de relajación de espín nuclear bajo el régimen de excitación de onda continua. Primero, comparamos los mecanismos de relajación de espín nuclear: no-selectivo; dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico. Posteriormente, con ayuda de resultados experimentales, proponemos un esquema teórico para encontrar un intervalo para los tiempos de relajación del espín nuclear que valida la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield. Y por último, realizamos un estudio teórico del comportamiento de la razón SDR_r y de las polarizaciones electrónica–nuclear en los centros de recombinación Ga^{2+} .

4.2 Mecanismos de relajación de espín nuclear

Las dos principales características detrás de la IHF son: (i) el aumento en las curvas de la intensidad de la PL (J) y del grado de polarización del espín (P_e^{BC}) [20–22, 26, 27], y (ii) la existencia de un campo magnético tipo Overhauser [19, 20, 26]. Ambas propiedades son observadas en configuración de Faraday, esto es, bajo luz

circularmente polarizada y campo magnético longitudinal (ver figuras 1.2(b)–(c)). Más específicamente, en la primera característica el comportamiento de $J(B_z)$ y $P_e^{\text{BC}}(B_z)$ muestran un mínimo desplazado con respecto a $B_z = 0$. Cuando el valor de $|B_z|$ aumenta, $J(B_z)$ y $P_e^{\text{BC}}(B_z)$ poseen un punto de inflexión en aproximadamente $|B_z| = \mathcal{A}/\mu_B g_c \approx 73 \text{ mT}$ que corresponde al valor en que las energías Zeeman e IHF son comparables en magnitud. Posteriormente para $B_z > 73 \text{ mT}$, la IHF es excedida por la interacción Zeeman y en este caso el espín de los electrones ligados es desacoplado del espín nuclear en los Ga^{2+} . Finalmente ambas curvas se saturan en valores grandes del campo magnético donde la interacción Zeeman domina completamente sobre la IHF. Este comportamiento, se muestra como una curva tipo lorentziana invertida en el grado de polarización del espín y en la intensidad de la PL bajo luz circularmente polarizada.

La siguiente característica experimental es el desplazamiento del mínimo en $J(B_z)$ y $P_e^{\text{BC}}(B_z)$ respecto a $B_z = 0$, y que apunta a la existencia de un campo magnético tipo Overhauser [19]. Este desplazamiento puede ser positivo o negativo y esto depende si la luz es circularmente polarizada hacia a la derecha o circularmente polarizada hacia la izquierda. Por lo tanto, bajo excitación σ^- o σ^+ el mínimo se localiza en $B_z = B_{\text{efec}} < 0$ o $B_z = B_{\text{efec}} > 0$, respectivamente. Además, los resultados experimentales muestran que este campo magnético B_{efec} aumenta como función de la potencia de excitación W hasta que aparentemente se satura en aproximadamente 25 mT.

Nos concentramos en estas dos importantes características para estudiar la influencia de la IHF y de los tres mecanismos de relajación de espín nuclear: no-selectivo; dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico que introducimos en la sección 3.5. Para este fin, calculamos el grado de polarización del espín en la BC y de la intensidad de PL como

$$P_e^{\text{BC}} = 2 \frac{S_3(t)}{S_0(t)} \Big|_{t=t_{\text{es}}}, \quad (4.1)$$

$$J = c_r p(t) S_0(t) \Big|_{t=t_{\text{es}}}, \quad (4.2)$$

donde c_r ($\approx 3c_p/20$) es el coeficiente de recombinación bimolecular [26]. En las expresiones anteriores, P_e^{BC} y J son evaluadas en $t_{\text{es}} = 200 \text{ ns}$ que es un tiempo suficientemente grande para que el sistema alcance el estado estacionario.

En la figuras 4.1 y 4.2 presentamos el comportamiento de las relaciones (4.1) y (4.2) como función del campo magnético longitudinal B_z y para diferentes valores de la potencia de excitación. En este caso hemos elegido los tiempos de relajación de espín nuclear $\tau_{n1} = 2312 \text{ ps}$ y $\tau_{n2} = 663 \text{ ps}$ que dan el mejor comportamiento cuantitativo

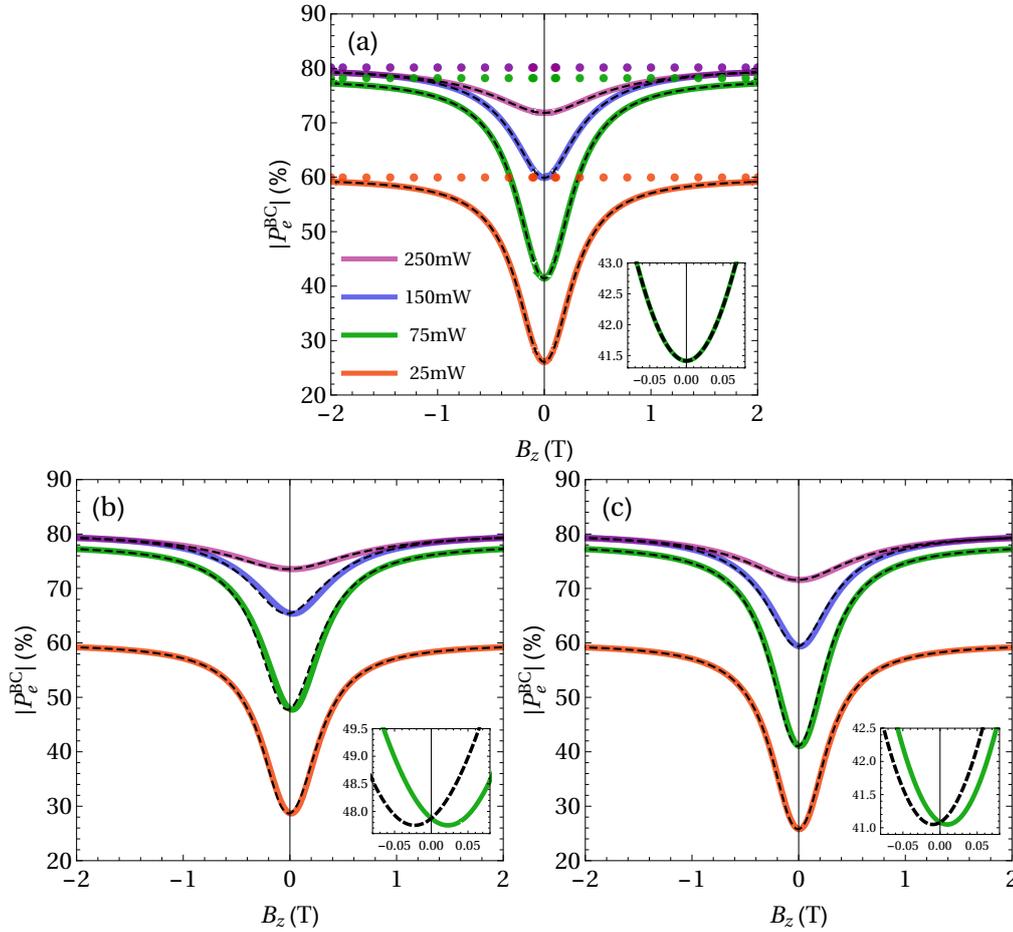


Figura 4.1: Grado de polarización circular $P_e^{BC}(B_z)$ en configuración de Faraday para las potencias de excitación $W = 25, 75, 150$ y 250 mW. Estos resultados son para los mecanismos: (a) no-selectivo, (b) dipolar magnético y (c) cuadrupolar eléctrico de relajación del espín nuclear, bajo luz σ^+ (líneas continuas) y σ^- (líneas discontinuas). En cada caso se muestra una amplificación del desplazamiento del mínimo de P_e^{BC} para $W = 75$ mW que es debido al campo magnético tipo Overhauser. Los tiempos de relajación nuclear para estas curvas son $\tau_{n1} = 2312$ ps y $\tau_{n2} = 663$ ps.

respecto al experimento. Justificamos la obtención de estos tiempos en la siguiente sección.

En particular, en la figura 4.1(a) presentamos el comportamiento de $P_e^{BC}(B_z)$ en ausencia de mecanismos relajación del espín nuclear (líneas horizontales punteadas), esto es, $\hat{\mathcal{D}}_1 = \hat{\mathcal{D}}_2 = 0$. Mostramos que a pesar de existir el efecto de IHF, la ausencia de procesos NSR borra completamente los efectos del aumento de filtro de espín y

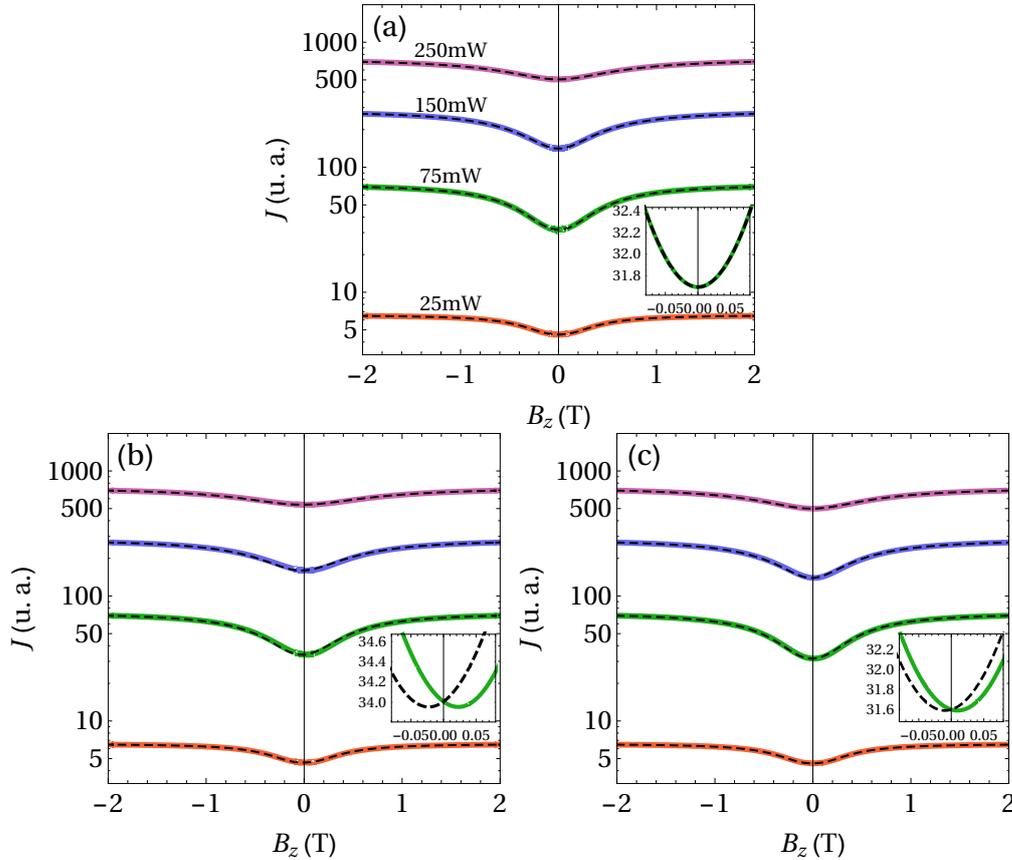


Figura 4.2: Intensidad de la PL $J(B_z)$ en configuración de Faraday para las potencias de excitación $W = 25, 75, 150$ y 250 mW. Estos resultados son para los mecanismos: (a) no-selectivo, (b) dipolar magnético y (c) cuadrupolar eléctrico de relajación del espín nuclear, bajo luz σ^+ (líneas continuas) y σ^- (líneas discontinuas). En cada caso se muestra una amplificación del desplazamiento del mínimo de J para $W = 75$ mW que es debido al campo magnético tipo Overhauser. Los tiempos de relajación nuclear para estas curvas son $\tau_{n1} = 2312$ ps y $\tau_{n2} = 663$ ps.

del campo magnético tipo Overhauser. Este resultado coincide con el obtenido por el modelo de dos cargas (2.10)–(2.15) que no incluye el efecto de la IHF. Por lo tanto con el fin de observar el efecto de la IHF, es esencial contar con estos mecanismos de relajación de espín.

En las figuras 4.1(a) y 4.2(a) presentamos el comportamiento del mecanismo no-selectivo para P_e^{BC} y J , respectivamente. Como podemos observar, este mecanismo reproduce correctamente el aumento en cada curva debido al efecto del filtro de espín sin embargo, no produce el efecto del campo magnético tipo Overhauser, es decir,

$B_{\text{efec}} = 0$. Como puede notarse en la ampliación de ambas gráficas para el caso de $W = 75 \text{ mW}$ y bajo luz circularmente polarizada hacia la izquierda y derecha. Esto confirma que la forma de este mecanismo es demasiado simétrico y por lo tanto debe ser descartado como disipador de NSR en la ecuación maestra (3.1).

Finalmente, mostramos las características de los mecanismos dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico en las figuras 4.1(b)–4.2(b) y 4.1(c)–4.2(c), respectivamente. Contrario al caso no-selectivo, estos mecanismos producen un campo magnético tipo Overhauser, es decir, $B_{\text{efec}} \neq 0$. Esto puede ser observado en las figuras 4.1(b)–4.1(c) para el grado de polarización del espín en la BC y 4.2(b)–4.2(c) para la intensidad de la PL. También ambos mecanismos reproducen correctamente el aumento del valor de P_e^{BC} y J al incrementar el valor B_z . En la siguiente sección estudiamos las diferencias entre estos dos mecanismos de NSR.

4.3 Tiempos de relajación del espín nuclear

A pesar de que los mecanismos de relajación de espín dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico reproducen correctamente las principales características en configuración de Faraday (ver figuras experimentales 1.2(b)–(c)) como es el caso del aumento de P_e^{BC} , J como función de B_z y el desplazamiento del mínimo debido a un campo magnético tipo Overhauser, sólo el mecanismo dipolar es capaz de empatar con los principales resultados experimentales. En lo siguiente, realizamos un análisis teórico–experimental para descartar al mecanismo cuadrupolar eléctrico como disipador de NSR en el modelo de la ecuación maestra (3.1).

Con este fin definimos dos cantidades, que igual que B_{efec} , dependen fuertemente del mecanismo de relajación de espín nuclear. Tales propiedades están relacionadas con la profundidad de las curvas tipo lorentzianas de P_e^{BC} y J en función de B_z [27]. Así estas nuevas relaciones son expresadas como

$$\xi = \frac{P_\infty}{P_0}, \quad \zeta = \frac{J_\infty}{J_0}, \quad (4.3)$$

donde $P_\infty = \lim_{B_z \rightarrow \infty} P_e^{\text{BC}}(B_z)$ y $J_\infty = \lim_{B_z \rightarrow \infty} J(B_z)$ representan los valores de saturación de las curvas lorentzianas para el grado de polarización del espín y de la intensidad de la PL. De forma similar, $P_0 = P_e^{\text{BC}}(B_z = 0)$ y $J_0 = J(B_z = 0)$ representan los valores de ambas curvas próximas a su valor mínimo en $B_z = B_{\text{efec}}$.

Para distinguir cuál de dos los mecanismos es el dominante, comparamos los resultados teóricos obtenidos de las expresiones (4.1), (4.2) y (4.3) con los correspondientes

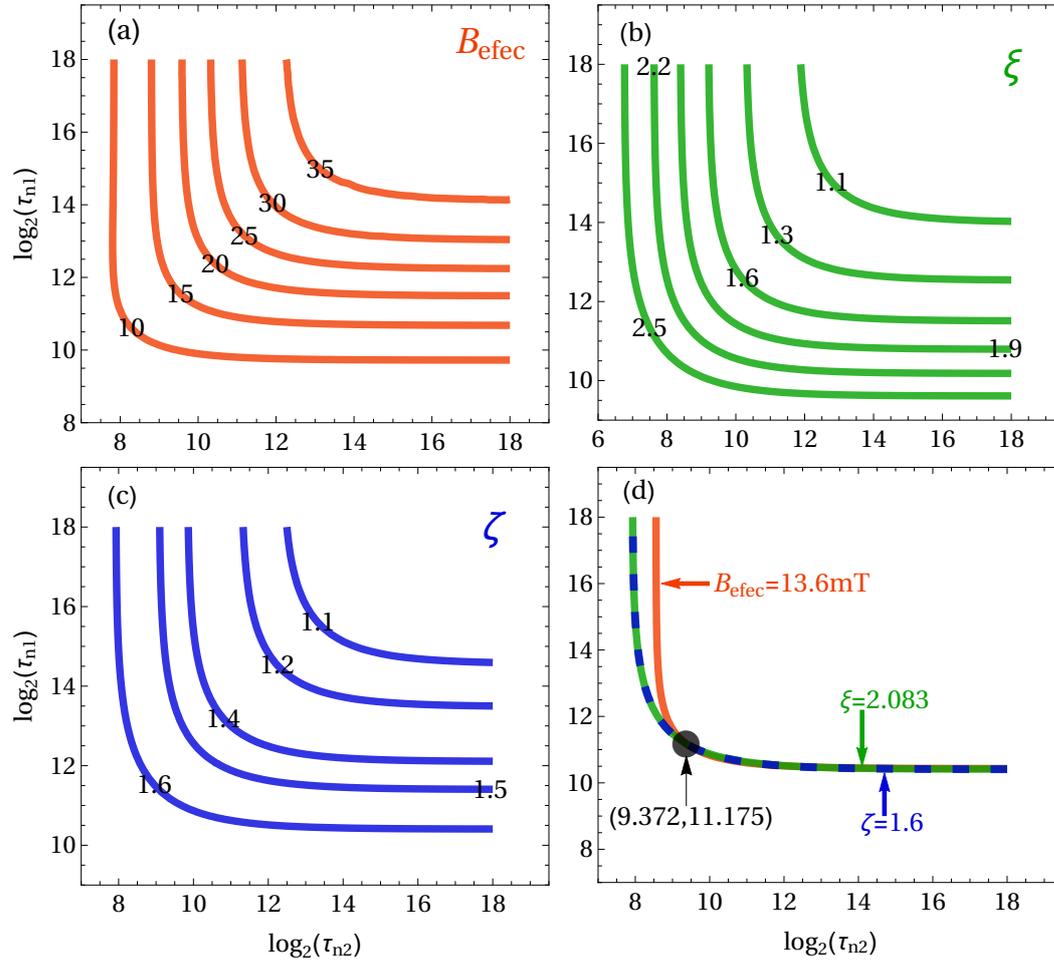


Figura 4.3: Isolíneas del mecanismo dipolar magnético para (a) el campo magnético tipo Overhauser B_{efec} , profundidades (b) $\xi = P_{\infty}/P_0$ y (c) $\zeta = J_{\infty}/J_0$ a una potencia de $W = 32 \text{ mW}$. Las isolíneas teóricas para valores experimentales $B_{efec} = 13.6 \text{ mT}$, $\xi = 2.083$ y $\zeta = 1.6$ [19, 20, 27] son mostradas en (d). Estas tres líneas se cruzan en el punto marcado en color gris con $\tau_{n1} = 2^{11.175} \text{ ps} = 2312 \text{ ps}$ y $\tau_{n2} = 2^{9.372} \text{ ps} = 663 \text{ ps}$.

valores experimentales de B_{efec} , ξ y ζ reportados en las referencias [19, 20, 27]. En este caso empleamos el modelo de la ecuación maestra junto con los parámetros del cuadro (3.1) para variar los valores de potencia de excitación y los tiempos de relajación de espín nuclear τ_{n1} y τ_{n2} . Con esto obtenemos los valores del campo magnético tipo Overhauser B_{efec} , los mínimos P_0 y J_0 , y los máximos P_{∞} y J_{∞} .

Así para el mecanismo dipolar magnético, en la figuras 4.3(a)–4.3(c) mostramos una familia de isolíneas de B_{efec} , ξ y ζ como función de los tiempos de re-

lajación del espín nuclear en escala logarítmica (base dos) y con potencia fija de $W = 32 \text{ mW}$. De este grupo seleccionamos aquellas que satisfacen los valores experimentales en aproximadamente $B_{\text{efec}} = 13.6 \text{ mT}$, $\xi = 2.083$ y $\zeta = 1.6$ para $W = 32 \text{ mW}$ [20], como mostramos en la figura 4.3(d). Estas curvas se intersectan en el punto $(\log_2 \tau_{n2}, \log_2 \tau_{n1}) = (9.372, 11.175)$ que corresponden a los valores de tiempo relajación $\tau_{n1} = 2^{11.175} \text{ ps} = 2312 \text{ ps}$ y $\tau_{n2} = 2^{9.372} \text{ ps} = 663 \text{ ps}$. De esta manera, este procedimiento nos permite estimar los valores de estos tiempos de relajación del espín nuclear a una potencia dada. Podemos obtener otros puntos de intersección para B_{efec} , ξ y ζ variando el valor de W y comparándolos con los resultados experimentales reportados en las referencias [19, 20, 27]. Con ayuda de estos puntos, podemos encontrar que el rango del tiempo de relajación del espín nuclear es $2000 \text{ ps} < \tau_{n1} < 8000 \text{ ps}$ para las trampas con un electrón ligado y $400 \text{ ps} < \tau_{n2} < 700 \text{ ps}$ para las trampas con dos electrones en estado de singulete.

El mejor ajuste cuantitativo respecto al comportamiento experimental se da usando los tiempos $\tau_{n1} = 2312 \text{ ps}$ y $\tau_{n2} = 663 \text{ ps}$. Así, en las figuras 4.4(a)–4.4(d) estudiamos el comportamiento de B_{efec} , ξ y ζ como función de la potencia W . En la figura 4.4(a) mostramos el campo magnético B_{efec} obtenido a partir del mínimo de $P_e^{\text{CB}}(B_z)$ y en la figura 4.4(c) presentamos de forma similar a B_{efec} extraído de $J(B_z)$. De estas dos gráficas podemos observar que el campo magnético tipo Overhauser de la solución numérica en ambos casos es casi idéntico al comportamiento experimental. Sin embargo la pequeña diferencia radica en que en el caso experimental, B_{efec} alcanza aparentemente un valor de saturación de 25 mT en una potencia de aproximadamente 100 mW [19]. En el caso teórico, B_{efec} alcanza un valor máximo de aproximadamente 26 mT y posteriormente decae en valores de potencia mayores de 150 mW .

El comportamiento de las relaciones ξ y ζ , es mostrado en las figuras 4.4(b) y 4.4(d). El caso teórico describe un correcto comportamiento cuantitativo respecto a los resultados experimentales [20]. En ambas cantidades, en el rango de potencia $0 \leq W_\xi \leq 30 \text{ mW}$ y $0 \leq W_\zeta \leq 90 \text{ mW}$, su valor aumenta al incrementar el valor W . Posteriormente, ambas alcanzan un máximo en los puntos $(W_\xi^{\text{max}} \sim 30 \text{ mW}, \xi^{\text{max}} \sim 2.17)$ y $(W_\zeta^{\text{max}} \sim 90 \text{ mW}, \zeta^{\text{max}} \sim 2.02)$. Ambos puntos indican el valor de W donde el efecto de filtro del espín electrónico de la BC hacia las trampas desocupadas tiene mayor eficiencia y mayor valor de la PL con electrones polarizados en el espín desde la BC a la BV, respectivamente. Finalmente para valores mayores de potencia $W_\xi > 30 \text{ mW}$ y $W_\zeta > 90 \text{ mW}$, ambas cantidades decaen exponencialmente lo que indica que el efecto de filtrado de espín se desvanece y existe un valor menor de electrones polarizados en el espín desde la BC a la BV. A pesar de que ξ y ζ poseen un buen

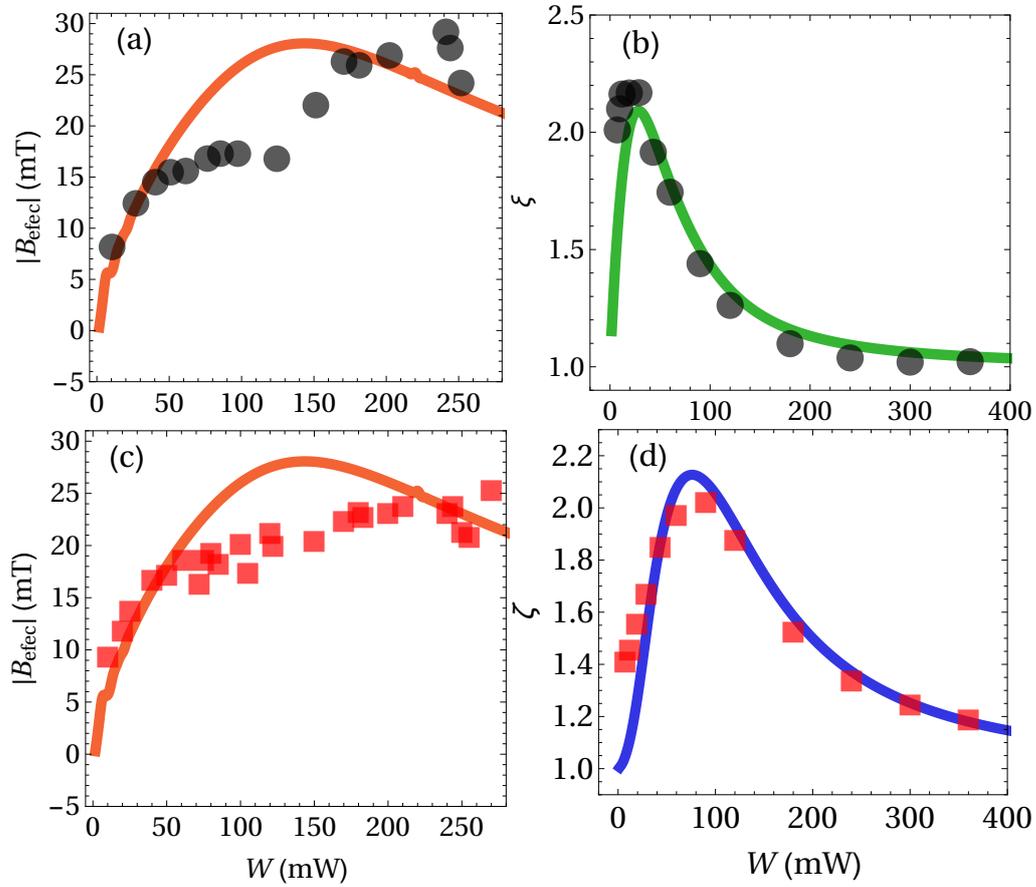


Figura 4.4: Campo magnético B_{efec} , ξ y ζ como función de la potencia W empleando el mecanismo dipolar, con $\tau_{n1} = 2312$ ps y $\tau_{n2} = 663$ ps. En (a), los puntos corresponden a datos experimentales de B_{efec} obtenidos de la curva $P_e^{\text{CB}}(B_z)$ y la línea continua corresponde a la simulación teórica. En (b), presentamos el comportamiento experimental (puntos) y teórico (línea continua) de ξ . El desplazamiento del mínimo de $J(B_z)$ para los valores experimentales (cuadros) y teóricos (línea continua) es mostrado en (c). En (d), presentamos el análisis experimental (cuadros) [19, 20, 27] y teórico (línea continua) de ζ .

comportamiento teórico, en el capítulo 5 mostramos que al incorporar pequeñas cantidades de centros de recombinación Ga^{3+} , estas curvas se ajustan fuertemente a los valores experimentales.

Ahora analizamos el comportamiento del mecanismo NSR cuadrupolar eléctrico y realizamos el mismo estudio que en el caso dipolar magnético. En la figura 4.5(a) mostramos las isolíneas de los valores experimentales $B_{\text{efec}} = 13.6$ mT, $\xi = 2.083$ y

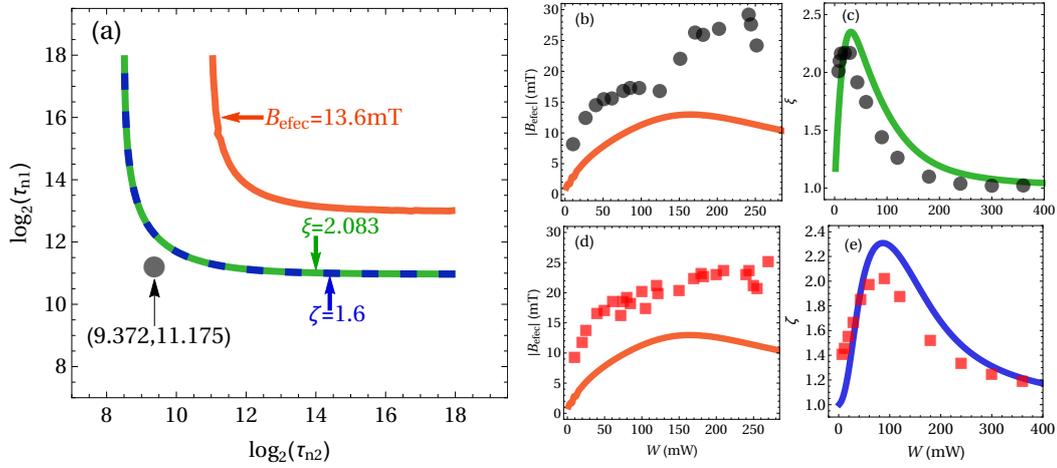


Figura 4.5: (a) Isolíneas del mecanismo cuadrupolar eléctrico para B_{efec} , $\xi = P_{\infty}/P_0$ y $\zeta = J_{\infty}/J_0$ a una potencia fija de $W = 32\text{mW}$. Estas isolíneas corresponden a los valores experimentales $B_{\text{efec}} = 13.6\text{mT}$, $\xi = 2.083$ y $\zeta = 1.6$ [19, 20, 27]. En (b)–(e) mostramos B_{efec} , ξ y ζ como función de la potencia de excitación W . En (b), los puntos corresponden a datos experimentales de B_{efec} para la curva $P_e^{\text{CB}}(B_z)$ y la línea corresponde a la simulación teórica. En (c), presentamos el comportamiento experimental (puntos) y teórico (línea continua) de ξ . El desplazamiento del mínimo de $J(B_z)$ para los valores experimentales (cuadros) y teóricos (línea continua) es mostrado en (d). En (e), presentamos el análisis experimental (cuadros) y teórico (línea continua) de ζ .

$\zeta = 1.6$ [19, 20, 27] para una potencia de 32mW . En esta figura podemos observar que la isolínea de la simulación del campo magnético tipo Overhauser B_{efec} no se interseca con las correspondientes ξ y ζ , por lo tanto no podemos establecer los valores de los tiempos de relajación del espín nuclear. Incluso aunque no se cruzan entre sí, hemos marcado el punto donde se localiza el valor de los tiempos $\tau_{n1} = 2^{11.175}\text{ps} = 2312\text{ps}$ y $\tau_{n2} = 2^{9.372}\text{ps} = 663\text{ps}$, que dan el mejor ajuste teórico–experimental en el caso dipolar magnético. Es importante señalar que este mismo comportamiento se repite para diferentes valores de la potencia en este mecanismo NSR y no podemos generar un intervalo de tiempo para τ_{n1} y τ_{n2} .

Finalmente, sólo para ejemplificar el comportamiento del disipador cuadrupolar eléctrico, en las figuras 4.5(b)–4.5(e) mostramos B_{efec} , ξ y ζ , como función de la potencia para $\tau_{n1} = 2312\text{ps}$, $\tau_{n2} = 663\text{ps}$. En las figuras 4.5(b) y 4.5(d) podemos apreciar que el valor teórico (línea continua) del campo magnético tipo Overhauser en $P_e^{\text{CB}}(B_z)$ y $J(B_z)$ es menor respecto al valor experimental (puntos–cuadros). Por el contrario, los

valores teóricos de ξ y ζ tienden a ser mayores que los experimentales. Debido a este comportamiento, el disipador cuadrupolar eléctrico es descartado como mecanismo de relajación de espín nuclear.

Para finalizar esta sección, es importante verificar que los rangos de tiempos $2000 \text{ ps} < \tau_{n1} < 8000 \text{ ps}$ y $400 \text{ ps} < \tau_{n2} < 700 \text{ ps}$ obtenidos para el NSR dipolar magnético satisfacen la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield, esto es, que cumple con la ecuación (C.22) de condición de reducción de movimiento expuesta en el apéndice C. De esta manera, el hamiltoniano del sistema H_S contiene principalmente a las interacciones de Zeeman e IHF y por lo tanto tiene un valor aproximado de $|H_S| = \hbar\omega_S \approx 10 \mu\text{eV}$. Por otra parte, el hamiltoniano que corresponde a la interacción dipolar entre núcleos vecinos de Ga^{2+} tiene un valor aproximado de $|H_I| = \hbar\omega_I \approx 0.4 - 0.6 \mu\text{eV}$. Así, de la condición (C.22) se tiene

$$\tau_c \ll \omega_I^{-1} \approx 1.14 - 1.84 \text{ ms.} \quad (4.4)$$

El tiempo de correlación τ_c es obtenido de (C.24)

$$\tau_c = \frac{1}{\tau_n \omega_S^2} \approx 1 \text{ ps,} \quad (4.5)$$

consecuentemente el rango de validez para la ecuación maestra (C.23) es

$$1 \text{ ps} \ll t \ll 1 \text{ ms.} \quad (4.6)$$

Este intervalo es consistente con los resultados obtenidos en esta sección.

4.4 Polarización del espín electrón–núcleo en Ga^{2+} y razón SDR

El comportamiento de $P_e^{\text{BC}}(B_z)$ y $J(B_z)$ nos permitió descartar al mecanismo NSR cuadrupolar eléctrico y establecer al mecanismo dipolar magnético como el más relevante. Además, nos permitió estudiar el comportamiento de la polarización del espín del electrón libre en la BC y de la intensidad de la PL en configuración de Faraday.

Ahora estudiamos el comportamiento de la polarización de los espines del electrón ligado y del correspondiente núcleo en los centros de Ga^{2+} . Además analizamos nuevamente el efecto de filtro de espín por medio de la razón SDR_r . Para este fin y de forma similar a las relaciones (4.1)–(4.2), definimos

$$P_e^{\text{TP}} = 2 \frac{S_{cz}(t)}{N_1(t)} \Big|_{t=t_{\text{es}}}, \quad (4.7)$$

$$P_{\text{nuc}}^{\text{TP}} = \frac{2}{3} \frac{I_{1z}(t) + I_{2z}(t)}{N_1(t) + N_2(t)} \Big|_{t=t_{\text{es}}}, \quad (4.8)$$

$$\text{SDR}_r = \frac{[p(t)n(t)]_{\pm}}{[p(t)n(t)]_X} \Big|_{t=t_{\text{es}}}, \quad (4.9)$$

donde $S_{cz} = U_{3,0,0}$, $N_1 = U_{0,0,0}$, $N_2 = V_{0,0}$, $I_{1z} = U_{0,0,3} + 2U_{0,3,0}$, $I_{2z} = V_{0,3} + 2V_{3,0}$ y $n = S_0$. En la expresión (4.9), $J_{\pm}/c_r = [p(t)n(t)]_{\pm}$ y $J_X/c_r = [p(t)n(t)]_X$ corresponden a las intensidades de la PL bajo luz circularmente polarizada (σ^{\pm}) y luz linealmente polarizada (σ^X).

La ecuación (4.7) describe el grado de polarización del espín de los electrones ligados y la expresión (4.8) es el grado de polarización nuclear total en las TP's y TA's. Finalmente, el cociente definido en (4.9) es un parámetro que nos permite detectar la recombinación dependiente del espín. En el caso en que la muestra es iluminada con luz circularmente polarizada las trampas se polarizan en el espín, aumenta el efecto del filtro de espín y consecuentemente el número de electrones en la BC en comparación con el caso de luz σ^X . En consecuencia aumenta la intensidad de la PL y la $\text{SDR}_r > 1$.

En la figura 4.6(a) mostramos el grado de polarización del espín para el electrón ligado en las TP's. El comportamiento es muy parecido al del espín del electrón libre en la BC [26], es decir, es una curva tipo lorentziana invertida desplazada respecto a $B_z = 0$ hacia la derecha empleando luz σ^+ y hacia la izquierda con luz σ^- . Además, ésta se satura para campos magnéticos $B_z > 1$ T. La razón de que P_e^{TP} tenga la misma conducta que P_e^{BC} , se debe a que el espín del electrón ligado adquiere la misma polarización del espín del electrón libre en la BC. De este modo, la mayoría de los electrones de la BC con una cierta proyección en espín no se recombinan hacia las TP's y esto aumenta el efecto de filtro de espín. Por otra parte, en la región cerca del mínimo de cada curva, la IHF es dominante y por lo tanto transfiere momento angular a su correspondiente núcleo, es decir, existe una pérdida de polarización del espín electrónico. Cuando se aplica un campo magnético externo mayor a $|B_z| \approx \mathcal{A}/\mu_B g_c$, la interacción Zeeman excede a la IHF y esta transferencia de momento se interrumpe, así el grado de polarización electrónica aumenta en las TP's al incrementar B_z .

En la figura 4.6(b) mostramos el grado de polarización del espín nuclear total como función de B_z . Esta cantidad incluye la contribución del grado de polarización

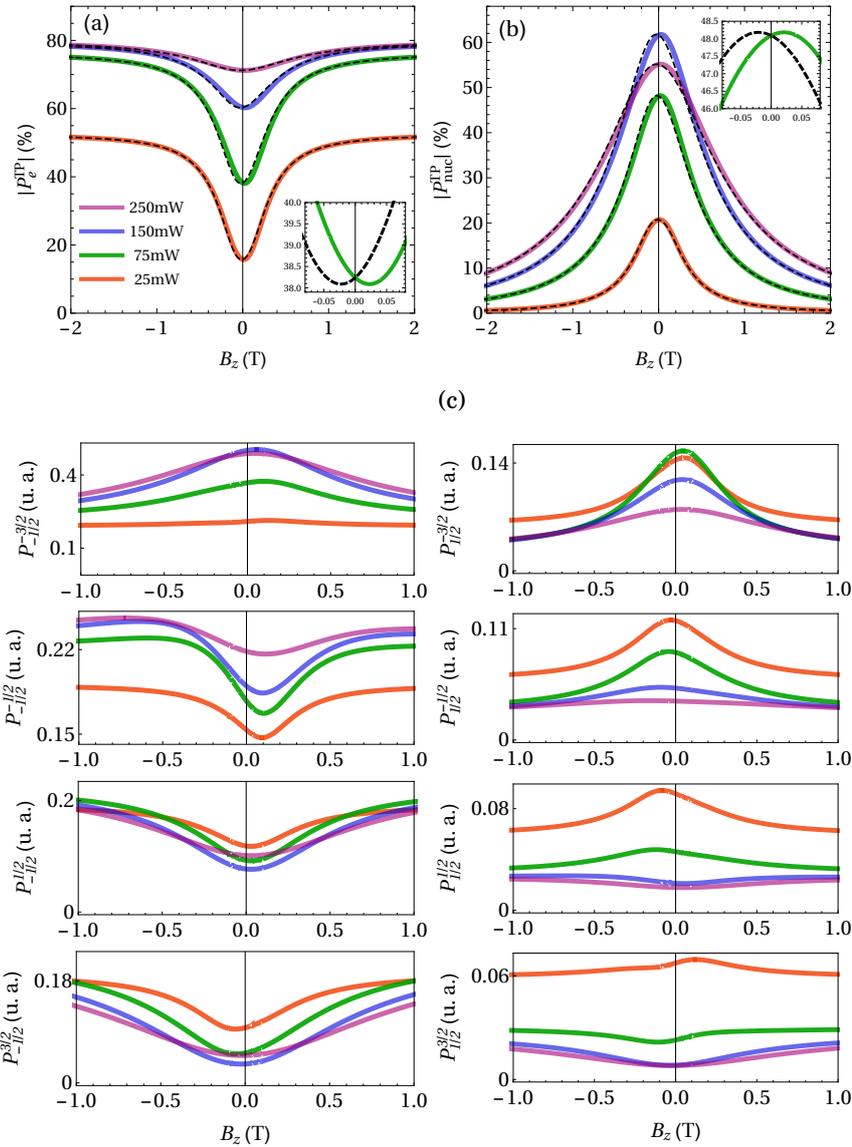


Figura 4.6: Grado de polarización circular del espín (a) para electrones ligados $P_e^{\text{TP}}(B_z)$ y (b) núcleos $P_{\text{nuc}}^{\text{TP}}(B_z)$ de los centros Ga^{2+} en configuración de Faraday. En ambos casos empleamos las potencias de excitación $W = 25, 75, 150$ y 250 mW, y bajo luz circularmente polarizada σ^+ (líneas continuas) y σ^- (líneas discontinuas). Además, mostramos una amplificación del desplazamiento del mínimo en P_e^{TP} y máximo en $P_{\text{nuc}}^{\text{TP}}$ para $W = 75$ mW producido por el campo magnético tipo Overhauser. En (c) mostramos la evolución de los estados de espín electrón–núcleo bajo campo magnético longitudinal y luz σ^+ .

del espín nuclear cuando los centros de recombinación Ga^{2+} poseen un electrón ligado y dos electrones en estado de singulete. El comportamiento de $P_{\text{nuc}}^{\text{TP}}$ es contrario a P_e^{TP} [26, 27]. Esta tiene la forma de una curva tipo lorentziana donde el máximo en cada valor de potencia corresponde a la mayor transferencia de momento angular del espín electrónico al nuclear por medio de la IHF. Por ejemplo si la muestra es sometida a luz σ^+ , existe una polarización electrónica con espín hacia abajo en la BC y las TP's, y por lo tanto el principal intercambio de espín electrón–núcleo en las TP's se da en los siguientes estados cuánticos

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{-1/2}^{-1/2} &\xrightarrow[J_z=-1]{\text{IHF}} \hat{P}_{1/2}^{-3/2}, \\
 \hat{P}_{-1/2}^{1/2} &\xrightarrow[J_z=0]{\text{IHF}} \hat{P}_{1/2}^{-1/2}, \\
 \hat{P}_{-1/2}^{3/2} &\xrightarrow[J_z=+1]{\text{IHF}} \hat{P}_{1/2}^{1/2},
 \end{aligned} \tag{4.10}$$

donde $\hat{P}_s^m = |m, s\rangle\langle m, s|$ es el operador de proyección de cada estado. Podemos apreciar esto en la figura [4.6 (c)], donde hemos calculado promedios estadísticos cuánticos

$$P_s^m(B_z) = \text{Tr}[\hat{P}_s^m \hat{\rho}]|_{t=t_{\text{es}}}, \tag{4.11}$$

como función del campo magnético en configuración de Faraday. Así los estados con $s = -1/2$ y $m = -1/2, 1/2, 3/2$ presentan una disminución y $s = 1/2$ con $m = -3/2, -1/2, 1/2$ un aumento en campos magnéticos $|B_z| \approx \pm \mathcal{A}/\mu_B g_c$, que es el valor de B_z donde las energías de Zeeman e IHF son comparables.

De forma similar, en la figura 4.6(b), el máximo de $P_{\text{nuc}}^{\text{TP}}(B_z)$ se encuentra desplazado respecto a $B_z = 0$ debido al campo magnético tipo Overhauser. Este se desplaza hacia la derecha ($B_{\text{efec}} > 0$) cuando la muestra es sometida a luz σ^+ y hacia la izquierda ($B_{\text{efec}} < 0$) empleando luz σ^- . Finalmente, cuando se incrementa B_z el acoplamiento electrón–núcleo se pierde y $P_{\text{nuc}}^{\text{TP}}$ tiende a cero debido que la energía Zeeman es mayor a la IHF.

Ahora estudiamos la razón de recombinación dependiente del espín SDR_r. En la figura 4.7 mostramos el comportamiento de la SDR_r como función del campo magnético en configuración de Faraday y de la potencia W . En la figura 4.7(a) mostramos el caso tridimensional de la SDR_r(B_z, W). Esta figura es formada por una familia de curvas en color azul que corresponden a la SDR_r como función del campo magnético y las correspondientes curvas en negro son un grupo de curvas como función de la potencia de excitación.

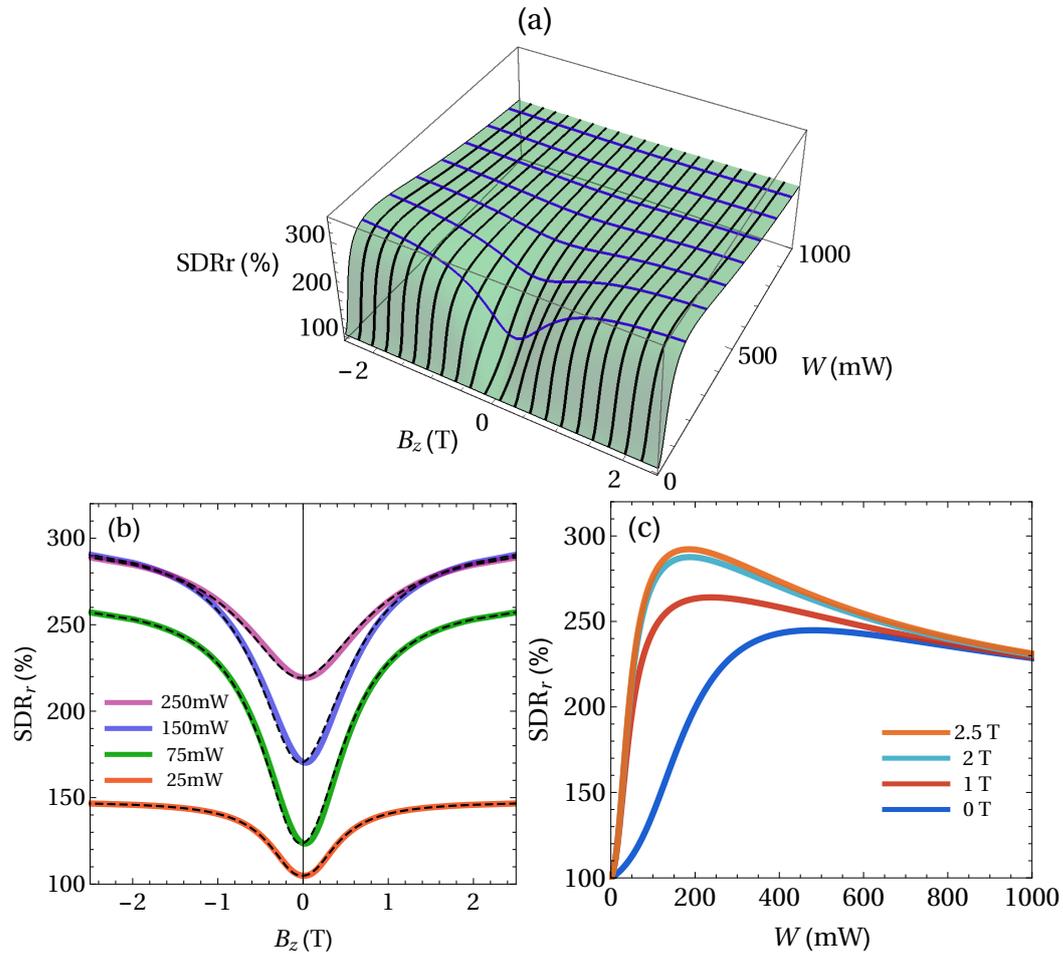


Figura 4.7: Razón de recombinación dependiente del espín como función del campo magnético y la potencia. En (a) mostramos el comportamiento de la SDR_r como función de la potencia y campo magnético longitudinal, bajo luz σ^- . En (b), presentamos el comportamiento como función de B_z , con luz σ^+ (línea continua) y luz σ^- (línea discontinua) y para las potencias $W = 25, 75, 150, 250$ mW. En (c) presentamos a la SDR_r como función de W , con luz σ^- y valores de campo magnético $B_z = 0, 1, 2, 2.5$ T.

De forma más general, en la figura 4.7(b) mostramos el estudio de la SDR_r como función del campo longitudinal B_z para los valores de potencia $W = 25, 75, 150, 250$ mW. Como fue reportado en la referencia [26], la razón de recombinación dependiente del espín en configuración de Faraday es similar al grado de polarización del espín P_e^{BC} , es decir, una curva tipo lorentziana que tiene un mínimo desplazado respecto a $B_z = 0$ y que aumenta su valor al incrementar el valor del campo magnético

externo. La posición del mínimo corresponde al campo magnético tipo Overhauser, con $B_{\text{efec}} > 0$ para luz σ^+ (líneas continuas) y $B_{\text{efec}} < 0$ para luz σ^- (líneas discontinuas).

En el caso de la figura 4.7(c) presentamos el caso independiente de la SDR_r como función de W y donde hemos empleado los valores de campo $B_z = 0, 1, 2, 2.5\text{T}$. En cada curva, la razón SDR_r posee las principales características reportadas en las referencias [25, 26], esto es, un aumento para valores de baja potencia ($W < 400\text{mW}$), posteriormente llega a un máximo para un valor de potencia crítica W_c y finalmente una disminución gradual en $W > 400\text{mW}$. El valor de la $\text{SDR}_r^{\text{max}}$ indica el valor de W_c con mayor eficiencia de filtro de espín, esto es, en este punto existe el mayor número de electrones de la BC con una orientación del espín definida. Además observamos que al aplicar un campo magnético longitudinal existe un aumento de la SDR_r y que está acompañado de una disminución en el valor de W_c . De esta manera con $B_z = 2.5\text{T}$ el valor de la $\text{SDR}_r^{\text{max}}$ aumenta un $\sim 119\%$ en comparación al caso de campo magnético cero. Este comportamiento se debe a que B_z suprime la relajación del espín de los electrones en las TP's provocado por la interacción IHF y la relajación del espín electrónico $\hat{\mathcal{D}}_{SC}$. Por este motivo existen una mayor polarización del espín en las TP's en la misma dirección que la polarización del espín de los electrones en la BC. Cuando se aumenta el valor de la potencia del haz incidente ($W > W_c$) para un B_z fijo, se produce una mayor cantidad de electrones fotogenerados en la BC en comparación del número de TP's. Los electrones en la BC que poseen espín antiparalelo despolarizan las trampas al recombinarse, esto reduce el efecto de filtro de espín y como consecuencia disminuye el SDR_r .

DINÁMICA DEL ESPÍN EN CENTROS DE RECOMBINACIÓN

Ga^{2+} Y Ga^{3+}

5.1 Introducción

En este capítulo estudiamos el impacto de incluir centros de recombinación Ga^{3+} en la dinámica espín electrón–núcleo. Con este fin, extendemos el modelo teórico de ecuación maestra expuesto en el capítulo 3, e incluimos el efecto conjunto de centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} . Mostramos que los centros Ga^{3+} son esenciales para entender el comportamiento experimental del grado de polarización del espín en la BC, la intensidad de la PL y las cantidades ξ y ζ en configuración de Faraday. Los principales resultados de este capítulo están reportados en el artículo de investigación publicado en la referencia [64].

5.2 Generalización del modelo

En esta parte extendemos el modelo de ecuación maestra desarrollado en el capítulo 3 con el fin de incluir los centros de recombinación Ga^{3+} . Así, ampliamos el espacio de Hilbert para el operador matriz de densidad de la siguiente manera,

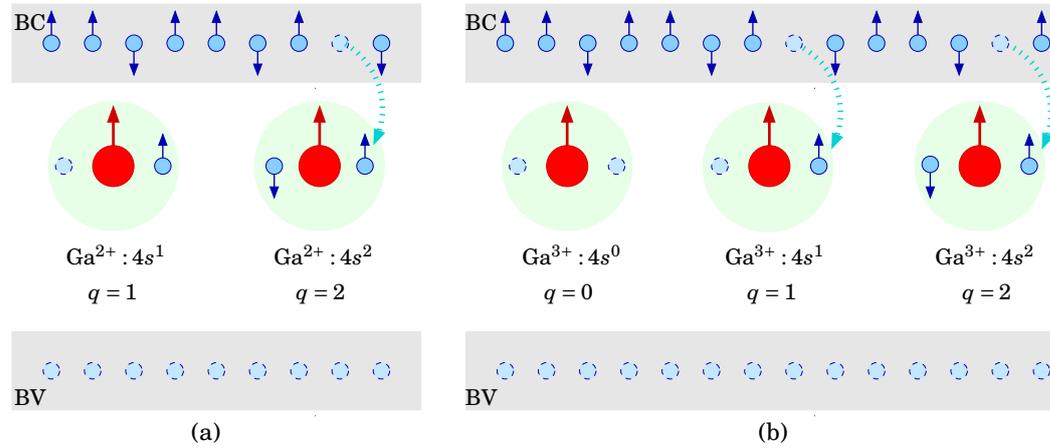


Figura 5.1: Esquema ilustrativo de los estados de carga q de los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} . En (a) mostramos los estados $q = 1, 2$ de carga en Ga^{2+} y en (b) los correspondientes $q = 0, 1, 2$ de carga para Ga^{3+} .

$$\hat{\rho} = \hat{\rho}_{\text{BV}_{1 \times 1}} \oplus \hat{\rho}_{\text{BC}_{2 \times 2}} \oplus \underbrace{\hat{\rho}_{18 \times 8}^D \oplus \hat{\rho}_{24 \times 4}^D}_{\text{Ga}^{2+}} \oplus \underbrace{\hat{\rho}_{04 \times 4}^T \oplus \hat{\rho}_{18 \times 8}^T \oplus \hat{\rho}_{24 \times 4}^T}_{\text{Ga}^{3+}}. \quad (5.1)$$

En la expresión anterior los superíndices D y T denotan los centros de doble (Ga^{2+}) o triple (Ga^{3+}) carga, como se muestran en la figura 5.1. En la ecuación (5.1), el operador $\hat{\rho}$ está formado por la suma directa de las submatrices de densidad de huecos en la BV ($\hat{\rho}_{\text{BV}}$), electrones en la BC ($\hat{\rho}_{\text{BC}}$), electrón ligado (carga simple) en Ga^{2+} ($\hat{\rho}_1^D$), dos electrones en estado de singulete (doble carga) en Ga^{2+} ($\hat{\rho}_2^D$), de carga neutra en Ga^{3+} ($\hat{\rho}_0^T$), de carga simple en Ga^{3+} ($\hat{\rho}_1^T$) y de doble carga en ($\hat{\rho}_2^T$). Los centros Ga^{3+} con carga neutra corresponden a aquellos átomos de Ga en configuración electrónica $[\text{Ar}]3d^{10}4s^04p^0$ (ver figura 5.1 (b)) y por lo tanto puede ser descritos por medio de los estados de espín nuclear $I = 3/2$. De forma equivalente, los estados de doble carga ($q = 2$) de Ga^{2+} y Ga^{3+} también pueden ser expresados con los estados nucleares del átomo de Ga, ya que estos forman el estado de singulete $4s^2$ y no interactúan con el espín electrónico. Los estados de carga simple ($q = 1$) en ambos centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} , son expresados en términos de los estados de espín electrón-núcleo debido a que sólo poseen un electrón ocupado en el estado $4s^1$. De lo anterior podemos notar que los Ga^{2+} poseen un estado estable en $4s^1$ y los Ga^{3+} en el estado neutro $4s^0$.

El hamiltoniano de este nuevo sistema es

$$\hat{H} = \hbar\boldsymbol{\omega} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \hbar\boldsymbol{\Omega} \cdot (\hat{\mathbf{S}}_c^D + \hat{\mathbf{S}}_c^T) + \mathcal{A} (\hat{\mathbf{I}}_1^D \cdot \hat{\mathbf{S}}_c^D + \hat{\mathbf{I}}_1^T \cdot \hat{\mathbf{S}}_c^T), \quad (5.2)$$

los primeros términos de lado derecho consideran las interacciones tipo Zeeman de los electrones en la BC y de los electrones ligados Ga^{2+} y Ga^{3+} en el estado $4s^1$. De forma similar, el último término toma en cuenta la IHF de los estados de espín electrón–núcleo de los centros de recombinación en $4s^1$. En la ecuación (5.2), $\boldsymbol{\omega} = g\mu_B\mathbf{B}/\hbar$, $\boldsymbol{\Omega} = g_c\mu_B\mathbf{B}/\hbar$, \mathbf{B} es el campo magnético externo, μ_B es el magnetón de Bohr, g y g_c son los factores giromagnéticos [49], y \mathcal{A} es la constante hiperfina. Los operadores de espín $\hat{\mathbf{S}}$, $\hat{\mathbf{S}}^D$ y $\hat{\mathbf{S}}^T$ son los correspondientes a los electrones en la BC, Ga^{2+} y Ga^{3+} respectivamente. Los operadores de espín nuclear son $\hat{\mathbf{I}}_q^D$ y $\hat{\mathbf{I}}_q^T$, donde q denota el estado de carga.

El disipador en este caso está compuesto por los siguientes elementos

$$\hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}) = \underbrace{\hat{\mathcal{G}}}_{\text{BV/BC}} + \underbrace{\hat{\mathcal{D}}_S}_{\text{BC}} + \underbrace{\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^D + \hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}^D + \hat{\mathcal{D}}_1^D + \hat{\mathcal{D}}_2^D}_{\text{Ga}^{2+}} + \underbrace{\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^T + \hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}^T + \hat{\mathcal{D}}_0^T + \hat{\mathcal{D}}_1^T + \hat{\mathcal{D}}_2^T}_{\text{Ga}^{3+}}. \quad (5.3)$$

En la relación anterior, el término de generación $\hat{\mathcal{G}}$ de huecos en la BV y electrones en la BC está dado por las ecuaciones (3.30) y (3.63). Los disipadores de relajación del espín electrón–núcleo $\hat{\mathcal{D}}_S$, $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}^D$, $\hat{\mathcal{D}}_1^D$, $\hat{\mathcal{D}}_2^D$, $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}^T$, $\hat{\mathcal{D}}_0^T$, $\hat{\mathcal{D}}_1^T$ y $\hat{\mathcal{D}}_2^T$ en la BC, Ga^{2+} y Ga^{3+} son obtenidos empleando la teoría de Wangness–Bloch–Redfield del apéndice (C) [33–35, 37, 38]. La forma compacta de estos disipadores es

$$\hat{\mathcal{D}}_S = -\frac{1}{2\tau_s} \sum_{k=1}^3 [\hat{S}_k, [\hat{S}_k, \hat{\rho}]], \quad (5.4)$$

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{SC}}^c = -\frac{1}{2\tau_{sc}} \sum_{k=1}^3 [\hat{S}_k^c, [\hat{S}_k^c, \hat{\rho}]], \quad (5.5)$$

$$\hat{\mathcal{D}}_q^c = -\frac{1}{3\tau_{n,q}} \sum_{k=1}^3 [\hat{I}_{q,k}^c, [\hat{I}_{q,k}^c, \hat{\rho}]], \quad (5.6)$$

donde los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} son etiquetados por el superíndice $c = D$ y $c = T$ respectivamente. En el caso de Ga^{2+} ($c = D$) los estados de carga son $q = 1, 2$ y en Ga^{3+} toma todos los valores posibles $q = 0, 1, 2$. En los disipadores de relajación del espín (5.4)–(5.6) asumimos que el principal mecanismo de pérdida de espín es el dipolar magnético.

Los disipadores correspondientes al mecanismo de recombinación para Ga^{2+} y Ga^{3+} es dado por $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^D$ y $\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^T$ respectivamente. Para construir estos disipadores

y expresar correctamente al operador $\hat{\rho}$ en la ecuación (5.1), ampliamos la base de generadores cuánticos de la ecuación (3.12) a

$$\Lambda = \{\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \hat{\lambda}_3, \dots, \hat{\lambda}_{181}\}, \quad (5.7)$$

$$= \{\hat{\rho}, \hat{S}_i, \hat{U}_{k,j,i}^D, \hat{V}_{j,i}^D, \hat{W}_{j,i}^T, \hat{U}_{k,j,i}^T, \hat{V}_{j,i}^T\}, \quad i, j, k = 0, 1, 2, 3, \quad (5.8)$$

donde los operadores hermitianos $\hat{\lambda}_i$ son

$$\hat{\rho} = \hat{1}_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.9)$$

$$\hat{S}_i = 0_{1 \times 1} \oplus (\hat{s}_i)_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.10)$$

$$\hat{U}_{k,j,i}^D = 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus (\hat{s}_k \otimes s_j \otimes s_i)_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.11)$$

$$\hat{V}_{j,i}^D = 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus (\hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.12)$$

$$\hat{W}_{j,i}^T = 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus (\hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.13)$$

$$\hat{U}_{k,j,i}^T = 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus (\hat{s}_k \otimes \hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4}, \quad (5.14)$$

$$\hat{V}_{j,i}^T = 0_{1 \times 1} \oplus 0_{2 \times 2} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{4 \times 4} \oplus 0_{8 \times 8} \oplus (\hat{s}_j \otimes \hat{s}_i)_{4 \times 4}. \quad (5.15)$$

En las expresiones (5.10)-(5.15), los operadores \hat{s}_i ($i = 0, 1, 2, 3$) están dados por (3.15) y cumplen la regla usual de conmutación (3.16). Con ayuda de la base anterior, el operador matriz de densidad (5.1) es expresado como

$$\hat{\rho} = \sum_{q=1}^{181} \frac{\lambda_q}{\text{Tr}[\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q, \quad (5.16)$$

donde λ_q es el promedio estadístico cuántico (3.26).

De forma equivalente a lo expuesto en la sección 3.4, $\hat{\rho}$ representa el operador de huecos en BV, \hat{S}_i son los operadores del número de electrones ($i = 0$) y de espín ($i = 1, 2, 3$) en la BC. Los operadores de número de los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} y sus diversos estados de carga son dados por: $\hat{N}_1^D = \hat{U}_{0,0,0}^D$, $\hat{N}_2^D = \hat{V}_{0,0}^D$, $\hat{N}_0^T = \hat{W}_{0,0}^T$, $\hat{N}_1^T = \hat{U}_{0,0,0}^T$ y $\hat{N}_2^T = \hat{V}_{0,0}^T$. Los operadores de espín electrónico en estos centros son $\hat{S}_k^D = \hat{U}_{k,0,0}^D$ y $\hat{S}_k^T = \hat{U}_{k,0,0}^T$. Debido a que los generadores de la base (5.7) cumplen con la propiedad de producto interno (3.11), expresamos los operadores de

espín nuclear como

$$\hat{I}_{1,k}^c = \sum_{j,i=0}^3 \frac{\text{Tr} [\hat{I}_{1,k}^c \hat{U}_{0,j,i}^c]}{\text{Tr} [\hat{U}_{0,j,i}^c \hat{U}_{0,j,i}^c]}, \quad (5.17)$$

$$\hat{I}_{2,k}^c = \sum_{j,i=0}^3 \frac{\text{Tr} [\hat{I}_{2,k}^c \hat{V}_{j,i}^c]}{\text{Tr} [\hat{V}_{j,i}^c \hat{V}_{j,i}^c]}, \quad (5.18)$$

$$\hat{I}_{0,k}^T = \sum_{j,i=0}^3 \frac{\text{Tr} [\hat{I}_{0,k}^T \hat{W}_{j,i}^T]}{\text{Tr} [\hat{W}_{j,i}^T \hat{W}_{j,i}^T]}, \quad (5.19)$$

donde $c = D$ para Ga^{2+} o $c = T$ con Ga^{3+} .

Los disipadores de los procesos de recombinación son dados en forma equivalente a la relación (3.31), así

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^D = \sum_{q=1}^{181} \frac{C^D [\hat{\lambda}_q]}{\text{Tr} [\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q \quad (5.20)$$

$$\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^T = \sum_{q=1}^{181} \frac{C^T [\hat{\lambda}_q]}{\text{Tr} [\hat{\lambda}_q^2]} \hat{\lambda}_q, \quad (5.21)$$

con $C^D [\hat{\lambda}_q] = \text{Tr} [\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^D \hat{\lambda}_q]$ y $C^T [\hat{\lambda}_q] = \text{Tr} [\hat{\mathcal{D}}_{\text{SDR}}^T \hat{\lambda}_q]$. Siguiendo el procedimiento de la sección 3.5, el coeficiente $C^D [\hat{\lambda}_q]$ describe los procesos de recombinación dependiente e independiente del espín en Ga^{2+} y es expresado por el grupo de ecuaciones (3.39)–(3.44), así

$$C^D [\hat{p}] = -c_p p V_{0,0}^D, \quad (5.22)$$

$$C^D [\hat{n}] = -c_n \left(S_0 U_{0,0,0}^D - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,0,0}^D \right), \quad (5.23)$$

$$C^D [\hat{S}_k] = -c_n \left(S_k U_{0,0,0}^D - S_0 U_{k,0,0}^D \right), \quad (5.24)$$

$$C^D [\hat{U}_{0,j,i}^D] = c_p p V_{j,i}^D - c_n \left(S_0 U_{0,j,i}^D - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i}^D \right), \quad (5.25)$$

$$C^D [\hat{U}_{k,j,i}^D] = -c_n \left(S_0 U_{k,j,i}^D - S_k U_{0,j,i}^D \right), \quad (5.26)$$

$$C^D [\hat{V}_{j,i}^D] = -c_p p V_{j,i}^D + c_n \left(S_0 U_{0,j,i}^D - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i}^D \right). \quad (5.27)$$

Durante los procesos de recombinación, los centros Ga^{3+} pueden estar en tres posibles estados de carga, $4s^0$, $4s^1$ o $4s^2$ (ver figura 5.1(b)), lo que permite cuatro procesos de recombinación. El primero y segundo corresponde a la recombinación de un

electrón en la BC a los estados $4s^0$ o $4s^1$. Adicionalmente puede haber recombinaciones dependiente del espín de la BC al estado $4s^2$ de Ga^{3+} como consecuencia del principio de exclusión de Pauli. El tercero y cuarto proceso son asociados con la recombinación de un electrón en $4s^1$ o $4s^2$ a un hueco en la BV. En este nuevo enfoque, estos cuatro procesos están regulados por los coeficientes de recombinación c_c , c_e , c_a y c_b (ver figura 2.7). Siguiendo el mismo procedimiento de los centros Ga^{2+} , en el modelo de Ga^{3+} para cada estado electrón–núcleo (apéndice B.2) e imponiendo condiciones de isotropía obtenemos los coeficientes $C^D [\hat{\lambda}_q]$, así

$$C^T [\hat{p}] = -c_a p U_{0,0,0}^T - c_b p V_{0,0}^T, \quad (5.28)$$

$$C^T [\hat{n}] = -c_c S_0 W_{0,0}^T - c_e \left(S_0 U_{0,0,0}^T - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,0,0}^T \right), \quad (5.29)$$

$$C^T [\hat{S}_k] = -c_c S_k W_{0,0}^T - c_e \left(S_k U_{0,0,0}^T - S_0 U_{k,0,0}^T \right), \quad (5.30)$$

$$\begin{aligned} C^T [\hat{U}_{0,j,i}^T] &= c_c S_0 W_{0,0}^T - c_a p U_{0,j,i}^T + c_b p V_{j,i} \\ &\quad - c_e \left(S_0 U_{0,j,i}^T - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i}^T \right), \end{aligned} \quad (5.31)$$

$$C^T [\hat{W}_{j,i}^T] = -c_c S_0 W_{j,i}^T + c_a p U_{0,j,i}^T, \quad (5.32)$$

$$C^T [\hat{U}_{k,j,i}^T] = c_c S_k W_{j,i}^T - c_a p U_{k,j,i}^T + c_e \left(S_k U_{0,j,i}^T - S_0 U_{k,j,i}^T \right), \quad (5.33)$$

$$C^T [\hat{V}_{j,i}^T] = -c_b p V_{j,i}^T + c_e \left(S_0 U_{0,j,i}^T - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i}^T \right). \quad (5.34)$$

En las ecuaciones (5.22)–(5.27) y (5.28)–(5.34) los subíndices toman los valores $i, j = 0, 1, 2, 3$ y $k = 1, 2, 3$. Los términos $\left(S_0 U_{0,0,0}^T - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,0,0}^T \right)$ y $\left(S_k U_{0,j,i}^T - S_0 U_{k,j,i}^T \right)$ corresponden al mecanismo de recombinación dependiente del espín, ya que en situación extrema donde el sistema esta completamente polarizado ambos términos tienden a cero.

5.3 Efecto de los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+}

En esta parte resolvemos el sistema de ecuaciones diferenciales que surgen de los resultados de la sección anterior. Para esto, empleamos la ecuación maestra (3.1), la definición del operador matriz de densidad (5.16), el hamiltoniano (5.2) y el disipador (5.3) en la relación (3.60). Con esto obtenemos un sistema de 181 ecuaciones diferenciales de primer orden no–lineales y acopladas fuertemente. Las condiciones iniciales

para este conjunto de ecuaciones son

$$\begin{aligned} N_1^D(0) &= \lambda_6(0) = N^D, \\ N_1^T(0) &= \lambda_{166}(0) = N^T, \\ \lambda_q(0) &= 0 \quad \text{para } q \neq 6, 166, \end{aligned} \quad (5.35)$$

donde N^D es el número de centros Ga^{2+} en $4s^1$ y N^T de Ga^{3+} en $4s^0$. El total de centros de recombinación en el sistema es $N_c = N^D + N^T$. Los parámetros físicos para resolver este sistema son dados en el cuadro (3.1) [11, 12, 20, 24].

Los coeficientes de captura de electrones en Ga^{2+} son $c_p = 1/\tau_h N_c$ y $c_n = 1/\tau^* N_c$. En el caso de Ga^{3+} , proponemos que los coeficientes de recombinación de los electrones en BC a los estados $4s^0$ y $4s^1$ tomen los valores $c_c = c_e = 1/\tau^* N_c$ y la recombinación independiente del espín de los estados $4s^1$ y $4s^2$ a la BV se toman como $c_a = c_b = 1/\tau_h N_c$. Respecto al término de generación (3.63), el factor de tasa de generación electrón–hueco es $G_0 = 2.875 \times 10^{23} \text{ mW}^{-1} \text{ s}^{-1} \text{ cm}^{-3}$ y el grado de polarización de la luz es $P_i = \pm 0.15$ para luz σ^\mp . En el caso de los tiempos del espín nuclear en (5.6), bajo el mecanismo de relajación dipolar magnético, empleamos los valores $\tau_{n,0} = 663 \text{ ps}$, $\tau_{n,1} = 2312 \text{ ps}$ y $\tau_{n,2} = 663 \text{ ps}$.

Al resolver numéricamente el sistema de ecuaciones diferenciales, obtenemos nuevamente el grado de polarización del espín en la BC (ec. (4.1)) y la intensidad de la PL (ec. (4.2)) en configuración de Faraday. Así en la figura 5.2 mostramos a P_e^{CB} como función del campo magnético longitudinal, para una potencia fija de 25 mW y con diferentes concentraciones de Ga^{3+} . También incluimos el efecto de luz circularmente polarizada hacia la derecha (σ^+) y hacia la izquierda (σ^-). El comportamiento en cada concentración es similar al descrito en el capítulo anterior, esto es, una curva tipo lorentziana invertida que se satura a grandes valores de campo magnético y tiende al valor $P_\infty = \lim_{B_z \rightarrow \infty} P_e^{\text{BC}}(B_z)$. Así mismo posee un mínimo desplazado respecto a $B_z = 0$, donde $P_0 = P_e^{\text{BC}}(B_z = 0)$, y que corresponde a un campo magnético tipo Overhauser B_{efec} [19–22, 26].

Como podemos observar en la figura 5.2(a), existe una reducción en P_∞ , P_0 y B_{efec} al incrementar el valor de la concentración de centros Ga^{3+} . A grandes cantidades de estos centros de recombinación, el campo magnético B_{efec} es completamente reducido en ambas orientaciones de luz circularmente polarizada σ^\pm (ver la ampliación del mínimo en la figura 5.2(a)). En la figura 5.2(b) exponemos el caso extremo del 100% de Ga^{3+} . Incluso en ausencia de centros Ga^{2+} , donde el grado de polarización del espín es seriamente reducido, se puede observar una pequeña contribución en P_e^{CB} y esto sugiere la existencia de un escaso efecto de filtro de espín. Esta reducción en la

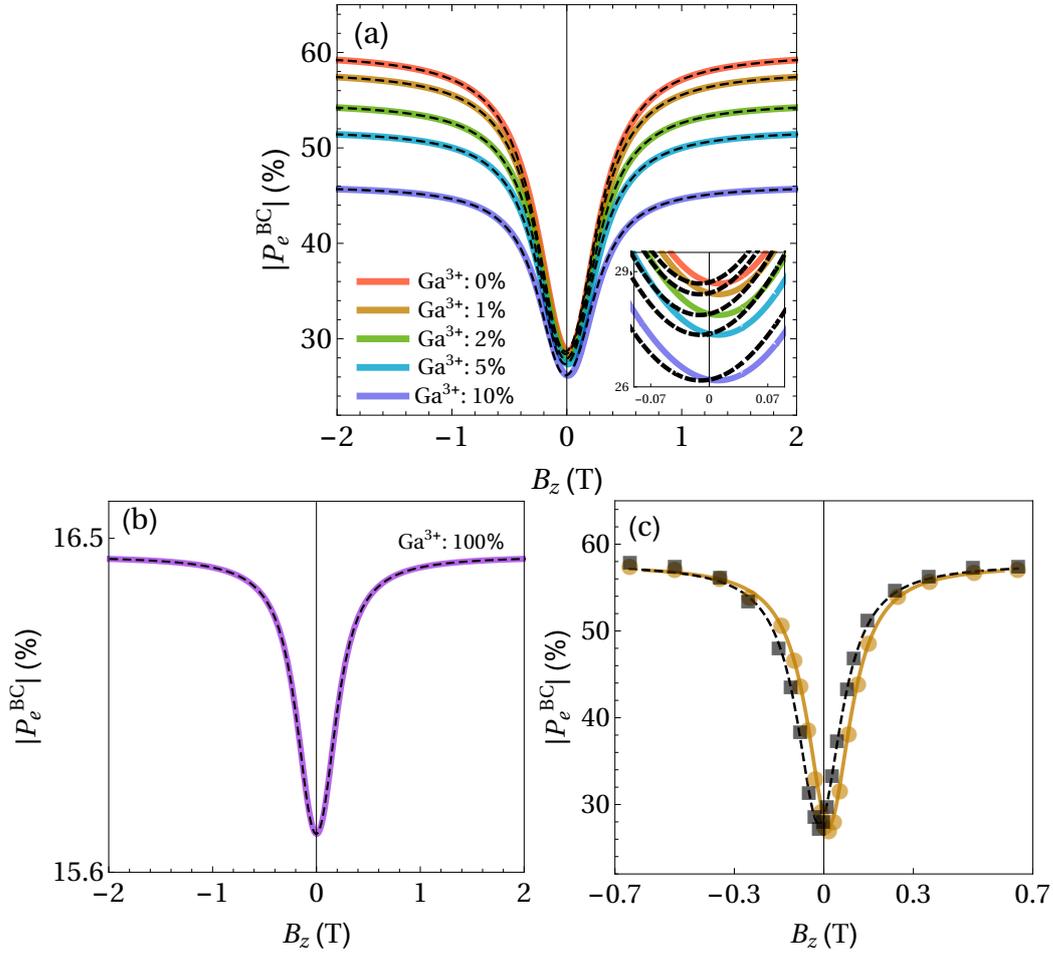


Figura 5.2: Grado de polarización del espín P_e^{CB} como función del campo magnético en configuración de Faraday, para diferentes valores de concentración de Ga^{3+} y una potencia de 25mW. En los paneles (a) y (b) mostramos valores de 0% a 100% en concentración de Ga^{3+} . En (c) presentamos los datos experimentales para $W = 25$ mW [20]. En todos los casos, las líneas continuas corresponden al caso de luz σ^+ y líneas discontinuas a luz σ^- .

captura selectiva dependiente del espín de los electrones en la BC, es principalmente debida al estado de carga $q = 0$ ($4s^0$) que atrapa electrones en las dos direcciones de espín. Sin embargo, el diminuto efecto del filtro de espín permanece gracias al estado de carga $q = 1$ ($4s^1$ en Ga^{3+}) que captura un electrón con una sola orientación de espín. Finalmente comparamos los resultados teóricos con el comportamiento experimental [20] mostrado en la figura 5.2(c), donde podemos observar que la concentración de 1% genera el mejor ajuste entre modelo y experimento.

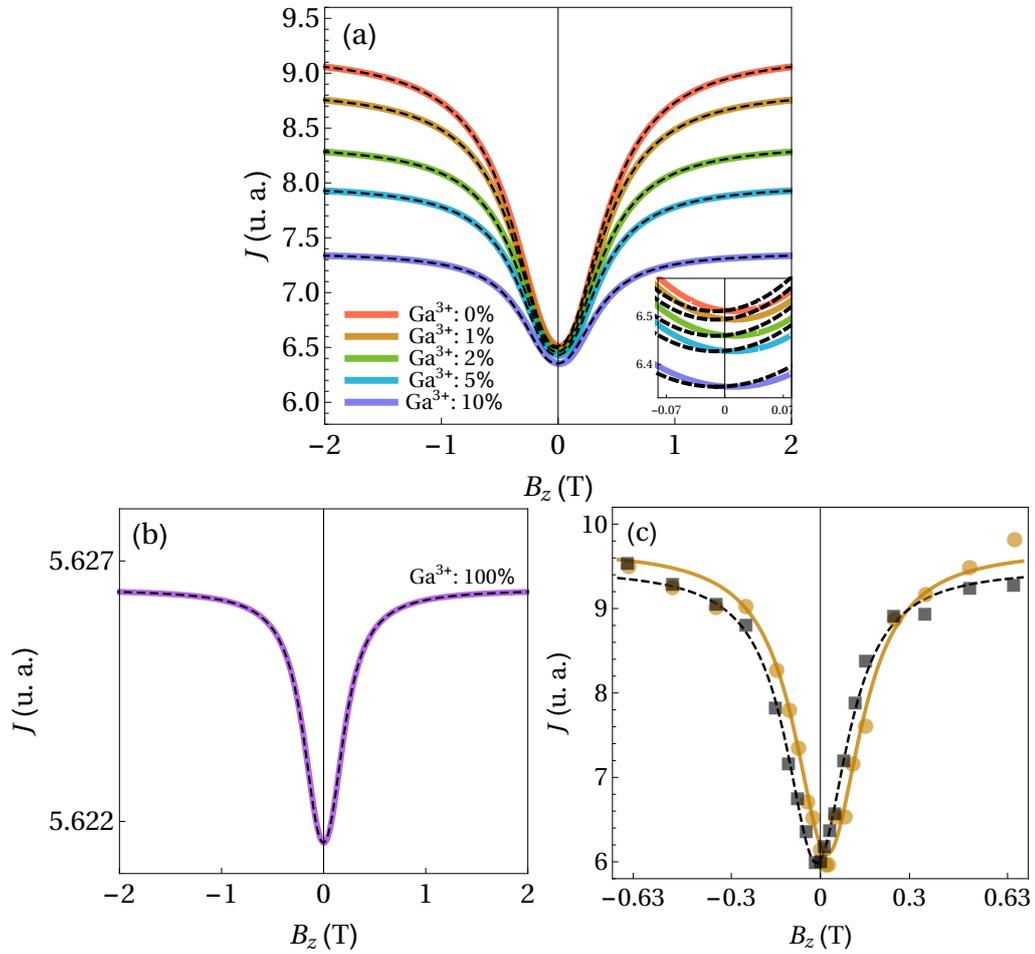


Figura 5.3: Intensidad de la PL J como función del campo magnético en configuración de Faraday, para diferentes valores de concentración de Ga^{3+} y una potencia de 25 mW. En las figuras (a) y (b) mostramos valores de 0% a 100% en concentración de Ga^{3+} . En (c) presentamos los datos experimentales para $W = 25$ mW [20]. En todos los casos, las líneas continuas corresponden al caso de luz σ^+ y líneas discontinuas a luz σ^- .

Para completar el estudio del efecto de los centros Ga^{3+} , mostramos en la figura 5.3 el comportamiento de la intensidad de la PL como función de B_z . En los cálculos de esta cantidad llegamos a conclusiones similares respecto al caso de P_e^{BC} . Las cantidades: $J_\infty = \lim_{B_z \rightarrow \infty} J(B_z)$, $J_0 = J(B_z = 0)$ y B_{efec} que definen el comportamiento de la intensidad de la PL, se ven afectadas al incrementar el valor de concentración de Ga^{3+} (ver figura 5.3(a)). En la figura 5.3(b) mostramos que en ausencia de Ga^{2+} existe un reducido efecto de filtro de espín provocado por los estados de carga $q = 1$

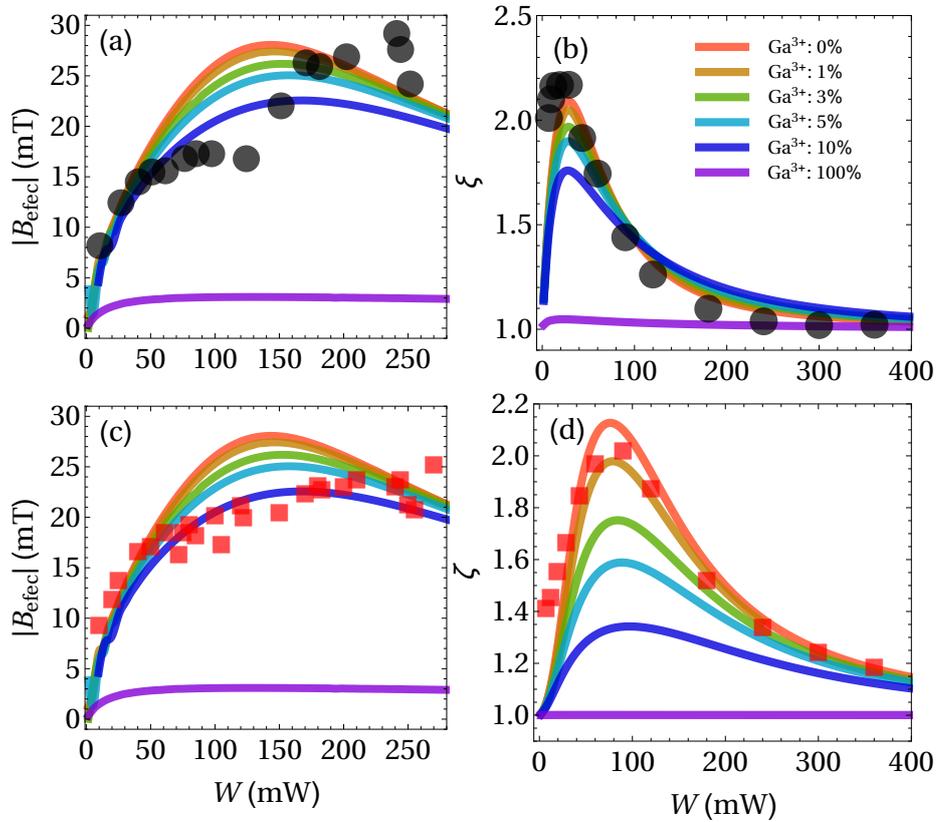


Figura 5.4: Campo magnético B_{efec} como función de la potencia obtenido del mínimo de las curvas (a) $P_e^{\text{CB}}(B_z)$ y (c) $J(B_z)$. Cocientes (b) ξ y (d) ζ como función de W . En todos los casos los valores experimentales (puntos–cuadros) son obtenidos de las referencias [19, 20, 27]. Las curvas teóricas (líneas continuas) fueron calculadas para diferentes valores de concentración de Ga^{3+} .

de Ga^{3+} . Estos resultados teóricos de J se apegan correctamente a los resultados experimentales reportados en la Ref. [20] y que mostramos en la figura 5.3(c).

Para finalizar esta sección, estudiamos al campo magnético tipo Overhauser y los cocientes de profundidad ξ y ζ definidos en la ecuación (4.3) como función de la potencia de excitación y de la concentración de centros Ga^{3+} . En las figuras 5.3(a) y 5.3(c) mostramos el comportamiento de B_{efec} extraído del mínimo de $P_e^{\text{BC}}(B_z)$ y $J(B_z)$ respectivamente. Tanto en el caso teórico (línea continuas) como en el experimental (puntos–cuadros) [19] el comportamiento de B_{efec} es bastante similar, incluso hasta concentraciones del 5% de Ga^{3+} . Respecto a ξ y ζ podemos observar en las figuras 5.3(b) y 5.3(d) que al agregar un valor superior del 1% de Ga^{3+} disminuye fuertemente

el valor máximo de estas relaciones de profundidad y esto es una muestra de la disminución en el efecto de filtro de espín.

Finalmente, aunque con el 100% de centros Ga^{2+} los resultados teóricos presentan un buen ajuste respecto a los resultados experimentales [19, 20, 27]; podemos observar en la figura 5.4 que la incorporación de aproximadamente del 1% de Ga^{3+} genera un ajuste teórico–experimental superior en B_{efec} , ξ y ζ como función de la potencia. Esto último está justificado con el hecho de que en los resultados experimentales se tiene $\xi_{\text{max}} > \zeta_{\text{max}}$ y en el caso teórico en ausencia de Ga^{3+} se produce el caso contrario, es decir, $\xi_{\text{max}} < \zeta_{\text{max}}$. Así, al incluir un porcentaje del 1% de estos centros, esta relación teórica se invierte y se obtiene el mismo comportamiento que el caso experimental. Por este motivo y debido al enfoque teórico presentado en este capítulo, proponemos que debe existir una muy reducida cantidad de centros de recombinación Ga^{3+} en la muestra a base de GaAsN.

CONCLUSIONES Y PERSPECTIVAS

6.1 Conclusiones

En esta tesis doctoral hemos analizado la dinámica de espín de electrones y núcleos en una muestra de GaAsN desarrollando el modelo en el enfoque de ecuación maestra para el operador matriz de densidad. Este se basa en describir las principales características encontradas en la configuración experimental de Faraday. Además, reproduce correctamente el efecto de la despolarización en configuración de Voigt debida al efecto Hanle y es capaz de reproducir el comportamiento de este semiconductor en configuraciones experimentales arbitrarias, es decir, al aplicar bombeo óptico y campo magnético en direcciones relativas arbitrarias. Como recientemente lo ha reportado Ivchenko et. al. [65]. La importancia del enfoque actual es que incluye correctamente el efecto de la interacción hiperfina así como el mecanismo de recombinación dependiente del espín, el efecto de excitación óptica de luz circularmente polarizada y los principales mecanismos de relajación del espín electrónico–nuclear en los centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} .

Partimos del desarrollo de un modelo teórico que considera el efecto de los centros de recombinación Ga^{2+} , estudiados experimentalmente por medio de la técnica espectroscópica de la ODMR. Con el sistema formado por la banda de conducción, centros de recombinación y banda de valencia, fuimos capaces de definir un espacio vectorial de ochenta y cinco operadores hermitianos, que nos permitió incluir la forma

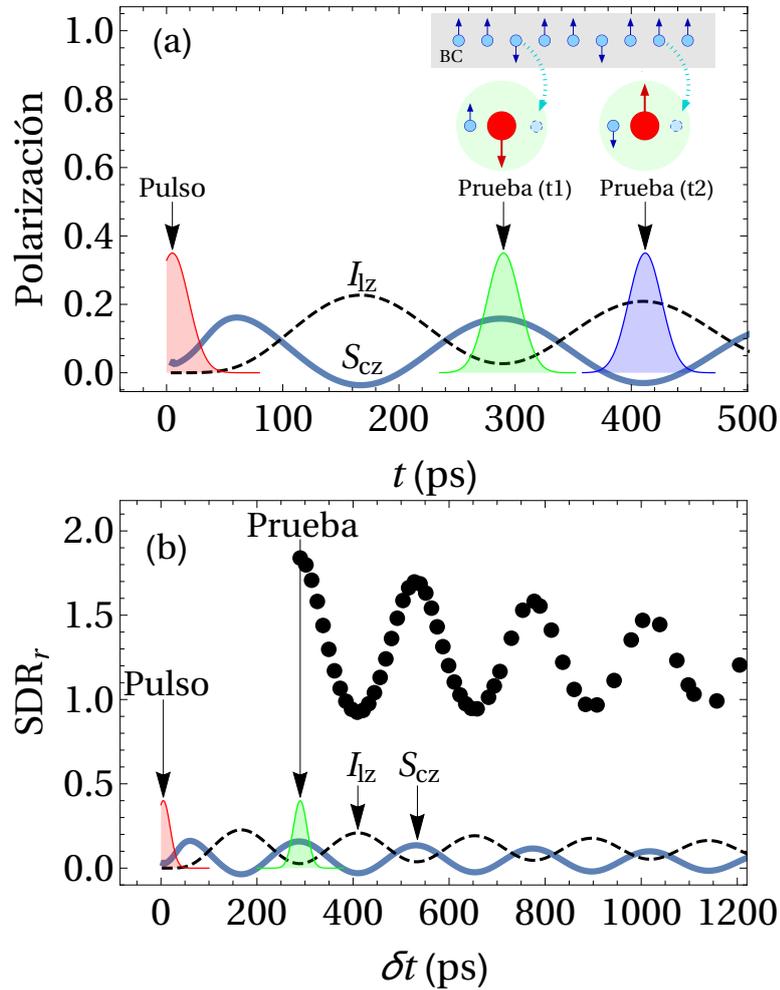


Figura 6.1: Oscilaciones coherentes en los centros de recombinación de Ga^{2+} . En (a) mostramos la dependencia temporal de la polarización del espín de los electrones ligados (línea continua) y del espín nuclear (línea discontinua). En (b) se muestra el trazo de oscilaciones coherentes de espín electrón–núcleo en los centros de Ga por medio de la razón SDR_r .

completa de la interacción hiperfina. Esto implica un avance considerable ya que en estudios teóricos previos se despreciaban los términos fuera de la diagonal de esta interacción o se abordaban por medio de transiciones fenomenológicas. Además, gracias a la definición de estos generadores cuánticos conseguimos generalizar el modelo de dos cargas que contempla los mecanismos de recombinación en cada estado de espín electrón–núcleo en los Ga^{2+} .

Con este mismo enfoque sobre los Ga^{2+} , hemos demostrado que la relajación del espín nuclear en los centros de recombinación juega un papel esencial en reproducir las dos principales características de la interacción hiperfina. Primero, la amplificación del efecto de filtro de espín en la configuración de Faraday es visible si está presente un mecanismo de relajación de espín nuclear. Segundo, las características del campo magnético tipo Overhauser no sólo depende de la interacción hiperfina, también depende fuertemente de la naturaleza del mecanismo de relajación del espín nuclear. Gracias a la teoría de relajación de Wangness–Bloch–Redfield, hemos analizado dos mecanismos de relajación del espín nuclear: la interacción dipolar originada por un campo magnético aleatorio entre los átomos vecinos de los centros de Ga y la interacción cuadrupolar provocada por un campo eléctrico fluctuante de los centros Ga. Hemos probando que el mecanismo dipolar magnético es el único compatible con las observaciones experimentales. Esto nos permitió encontrar por medio de la solución numérica rangos de valores para los tiempos de relajación de espín nuclear en las trampas con un electrón ligado y dos en estado de singulete. Nadie anteriormente había reportado un rango de valores para estos tiempos de relajación de espín nuclear en este semiconductor. En el caso del mecanismo cuadrupolar eléctrico, este no es capaz de dar cuenta de los resultados experimentales; tampoco las posibles fluctuaciones del campo eléctrico que lo generaría son del todo claras.

Además, gracias a este modelo y para explorar a fondo los efectos de interacción hiperfina y los mecanismos de relajación de espín nuclear, hemos propuesto un esquema para trazar las oscilaciones coherentes del espín electrónico y nuclear por medio de la interacción hiperfina, como se muestran en la figura 6.1(a)–(b). Esta propuesta consiste en detectar estas oscilaciones en tiempo real por medio de un esquema de pulso–prueba en excitación óptica de régimen pulsado, como lo hemos reportado en el artículo de investigación que sustenta la presente tesis de doctorado [51]. Recientemente se ha comprobado experimentalmente la existencia de estas oscilaciones coherentes de espín en la referencias [40, 66]. Es importante señalar que en estos resultados se retoma la importancia de los isótopos ^{69}Ga y ^{71}Ga presentes en la muestra de GaAsN.

Aunque la mayoría de los resultados experimentales son reproducidos correctamente por el modelo de centros Ga^{2+} algunos aspectos de su comportamiento siguen sin comprenderse. Por ejemplo, existe la discrepancia en el comportamiento teórico del ancho medio en las curvas de P_e^{BC} y J respecto al caso experimental. Otro caso es el comportamiento de las curvas de los cocientes del grado de polarización ζ y de cociente de la intensidad de la PL ξ . Experimentalmente el comportamiento indica

la condición $\xi_{\max} > \zeta_{\max}$ de sus valores máximos, sin embargo teóricamente con el modelo de los centros Ga^{2+} encontramos $\xi_{\max} < \zeta_{\max}$.

Adicionalmente hemos estudiado la dinámica de espín electrón núcleo cuando se incluye conjuntamente los efectos de centros de recombinación Ga^{2+} y Ga^{3+} . Con este fin aumentamos la dimensión del álgebra de ochenta y cinco generadores a ciento ochenta y un operadores hermitianos, al incluir los tres estados de carga del estado $4s^0$ en los centros Ga^{3+} y los estados de espín nuclear. Nuevamente incluimos los principales efectos de este sistema, es decir, la interacción hiperfina, el efecto Zeeman, el mecanismo de relajación de espín electrónico y relajación del espín nuclear. Así mismo empleamos el mecanismo dipolar magnético por medio de la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield. El mecanismo de recombinación dependiente del espín fue abordado por medio del modelo de tres cargas y generalizado para incluir todos los estados de espín de los centros Ga^{3+} . Respecto al comportamiento de los Ga^{3+} , demostramos que aunque los estados de carga $q = 0$ reducen el efecto de filtro de espín debido a la captura de electrones con ambas orientaciones de espín, el estado de carga $q = 1$ captura selectivamente en espín electrones de la BC. Por lo tanto, incluso aunque pequeña, los estados de tres cargas exhiben un mecanismo de recombinación dependiente del espín. Se demostró que los centros Ga^{2+} son filtros de espín más eficientes que los centros Ga^{3+} . Por lo tanto, la presencia de Ga^{3+} rápidamente deteriora, en general, la eficiencia del efecto de filtro de espín. Sin embargo, gracias a la inclusión de pequeñas concentraciones de centros Ga^{3+} se consiguen mejoras en los ajustes de los resultados teóricos respecto al caso experimental. Incluso en el caso de la relación teórica $\xi_{\max} < \zeta_{\max}$ obtenida con el modelo en el que únicamente se tiene Ga^{2+} . Esta relación se invierte y cumple con lo reportado previamente en trabajos experimentales.

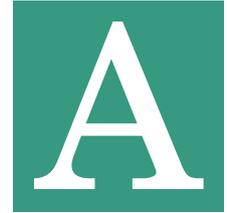
6.2 Perspectivas

De la siguiente tesis doctorado se desprenden los siguientes trabajos a futuro:

- Explorar otro tipo de interacciones de espín que permitan corregir el ancho medio de las curvas lorentzianas en configuración de Faraday.
- Estudiar el efecto en la dinámica electrón cuando el campo magnético posee un ángulo de inclinación respecto a la incidencia del bombeo óptico.

- Analizar el efecto que tiene el sistema cuando además de bombeo óptico y campo magnético externo, se somete a una radiación con frecuencia de microondas.
- Estudiar la posibilidad de generar un protocolo de registro cuántico (lectura y escritura) por medio del esquema en régimen pulsado.
- Estudiar otro tipo de semiconductores que posean centros de recombinación dependiente del espín, con espín nuclear diferente al caso del GaAsN.

Apéndices



CAMPO MAGNÉTICO OVERHAUSER

En apéndice revisamos el origen del campo magnético Overhauser, también conocido como corrimiento Overhauser, como un indicador de la polarización del espín nuclear en metales [23, 67] y semiconductores [41, 68, 69].

A.1 Origen en metales y semiconductores

Las mediciones en resonancia magnética nuclear en metales como Li, Na, Al, Cu y Ga [67] y de resonancia del espín electrónico [23] a mediados del siglo pasado, mostraron que era posible generar una polarización en el espín nuclear de los átomos en metales. Este estudio implicaba que era probable detectar indirectamente esta polarización por medio de un cambio sobre la frecuencia de la resonancia, que es proporcional a un campo magnético adicional al aplicado por estas técnicas espectroscópicas. A éste se le conoció como campo magnético Overhauser y fue atribuido a los efectos de la interacción hiperfina entre el espín de electrones de conducción y el espín nuclear de su átomo vecino. Así, el origen campo Overhauser se debe a los efectos paramagnéticos débiles del espín electrónico sobre el espín nuclear. Un espectro de la resonancia magnética nuclear puede observarse en la figura A.1(a) para CuCl donde podemos apreciar un cambio en la frecuencia para ^{63}Cu con respecto a CuCl, lo que indica la existencia de este campo magnético Overhauser.

En el caso de semiconductores, este efecto también ha sido observado en puntos

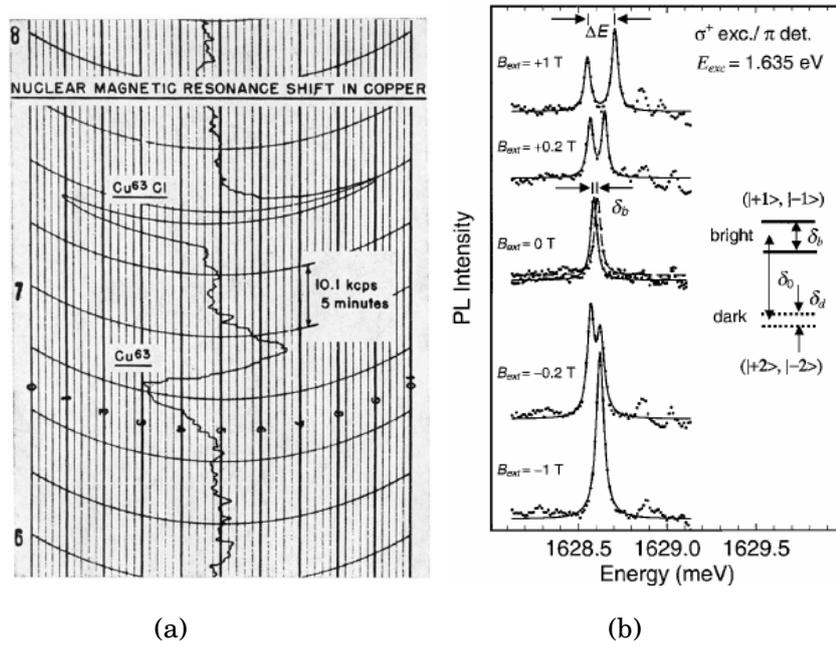


Figura A.1: Mediciones experimentales del campo magnético Overhauser. En (a) mostramos el espectro de resonancia magnética nuclear el isotopo ^{63}Cu [67]. El cambio en el valor frecuencia (eje vertical) respecto a CuCl corresponde al campo magnético Overhauser debido a los átomos de Cu. En (b) mostramos la respuesta de la intensidad de la fotoluminiscencia bajo luz circularmente polarizada (σ^+) y campo magnético externo en configuración de Faraday para un pozo cuántico de GaAs/AlGaAs [41, 68]. El desdoblamiento de los picos en la intensidad de la PL como función de la energía de excitación, indica la presencia de un campo Overhauser

y pozos cuánticos [41, 68]. Por ejemplo en mediciones de la intensidad de la fotoluminiscencia en pozos cuánticos de GaAs/AlGaAs bajo luz circularmente polarizada y campo magnético externo en configuración de Faraday, ha sido posible medir un desdoblamiento en los niveles energéticos del excitón. Este desdoblamiento, como se muestra en la figura A.1(b), es debido al campo magnético Overhauser provocado por la IHF y puede ver invertido si se cambia el signo del campo magnético externo aplicado.

A.2 Breve descripción teórica

Para comprender el origen de este campo magnético Overhauser, empleamos el enfoque introducido en la referencia [69]. Bajo el esquema resonancia de espín electrónico,

un campo magnético de radiación electromagnética (microondas) interacciona con los niveles energéticos del espín de los electrones que fueron previamente desdoblados por un campo magnético externo. El espectro que se obtiene depende del tipo de orbital donde se encuentra el electrón libre y, en este caso, también depende de la IHF entre el espín electrónico y del espín nuclear de su átomo vecino. Así, el hamiltoniano que describe estas interacciones es de la forma

$$\hat{H} = g\mu_B \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{S}} + \mathcal{A} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{I}}. \quad (\text{A.1})$$

En el hamiltoniano anterior g es el factor giromagnético, μ_B es el magnéton de Bohr, \mathcal{A} es la constante hiperfina y \mathbf{B} es el campo magnético externo. El primer término de lado derecho en (A.1) corresponde al efecto Zeeman con $\hat{\mathbf{S}}$ las componentes del espín electrónico y el segundo término corresponde a la IHF con $\hat{\mathbf{I}}$ las componentes del espín nuclear. La forma de IHF en (A.1) considera que el espín del electrón se encuentra en un orbital tipo s ($l = 0$), es decir, se desprecia cualquier efecto del acoplamiento espín – órbita. [23].

Tomando el promedio de *ensemble* [69] sobre el espín nuclear obtenemos

$$\Delta E = g\mu_B B + \mathcal{A} \langle \hat{\mathbf{I}} \rangle. \quad (\text{A.2})$$

Esta ecuación representa el desdoblamiento de los niveles energéticos debidos al espín electrónico, que son función del campo magnético externo y la polarización promedio del espín nuclear. Podemos reescribir la ecuación anterior de la siguiente forma

$$\Delta E = g\mu_B (B + B_N), \quad (\text{A.3})$$

donde

$$B_N = \frac{\mathcal{A}}{g\mu_B} \langle \hat{\mathbf{I}} \rangle, \quad (\text{A.4})$$

es el campo magnético Overhauser.

Como podemos observar claramente en (A.4), el incremento del desdoblamiento de los niveles energéticos del espín electrónico y por lo tanto un cambio en las líneas del espectro de resonancia del espín electrónico, dependen principalmente del valor de la constante hiperfina y del valor de la polarización nuclear promedio generada.

RECOMBINACIÓN DEPENDIENTE DEL ESPÍN ELECTRÓN-NÚCLEO EN Ga

En este apéndice generalizamos las ecuaciones de balance (2.17)-(2.23) para los centros de recombinación Ga^{2+} y el sistema de ecuaciones (2.17)-(2.23) para los centros Ga^{3+} , incluyendo los estados de su espín nuclear

B.1 Recombinación dependiente del espín electrón-núcleo en Ga^{2+}

Generalizamos las ecuaciones de balance (2.17)-(2.23) para los centros de recombinación Ga^{2+} . En particular, sólo modificamos aquellas que describen los procesos de recombinación dependiente e independiente del espín. Asumimos que las tasas de recombinación c_p , c_n en cada uno de los estados de espín nuclear deben ser iguales al depender únicamente de las orientaciones relativas del espín electrónico de la BC y las TP's. De estas consideraciones es posible extender el mecanismo de recombinación incluyendo al espín nuclear como sigue

$$\dot{p} = -c_p p \sum_{m=-3/2}^{3/2} N_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.1})$$

$$(\text{B.2})$$

$$\dot{n}_{\downarrow} = -c_n n_{\downarrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} N_{\uparrow}^m, \quad (\text{B.3})$$

$$\dot{n}_{\uparrow} = -c_n n_{\uparrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} N_{\downarrow}^m, \quad (\text{B.4})$$

$$\dot{N}_{\downarrow}^m = -c_n n_{\uparrow} N_{\downarrow}^m + \frac{c_p}{2} p N_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.5})$$

$$\dot{N}_{\uparrow}^m = -c_n n_{\downarrow} N_{\uparrow}^m + \frac{c_p}{2} p N_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.6})$$

$$\dot{N}_{\uparrow\downarrow}^m = c_n n_{\uparrow} N_{\downarrow}^m + c_n n_{\downarrow} N_{\uparrow}^m - c_p p N_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.7})$$

donde el índice $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ etiqueta los cuatro estados del espín nuclear del Ga^{2+} . Aquí N_{\downarrow}^m y N_{\uparrow}^m representan las poblaciones de TP's con estado cuántico m y estado electrónico $s = 1/2$ y $s = -1/2$ respectivamente. De igual forma, $N_{\uparrow\downarrow}^m$ es la población de trampas con dos electrones en estado de singlete en el estado nuclear m . El número total de TP's es $N_1 = \sum_{m=-3/2}^{3/2} (N_{\downarrow}^m + N_{\uparrow}^m)$ y el total de TA es $N_2 = \sum_{m=-3/2}^{3/2} N_{\uparrow\downarrow}^m$.

Es posible demostrar que el sistema de ecuaciones (B.1)–(B.7) da origen al sistema (3.39)–(3.44) que empleamos en el capítulo (3). Ejemplificamos la obtención de la ecuación cinética (3.44). Empezamos por el operador $\hat{V}_{0,3}$, que es uno de los cuatro generadores diagonales del grupo $U(4)$ en el espacio de las TA's. Expresamos este operador como

$$\hat{V}_{0,3} = -\frac{1}{2} \hat{N}_{\uparrow\downarrow}^{-3/2} + \frac{1}{2} \hat{N}_{\uparrow\downarrow}^{-1/2} - \frac{1}{2} \hat{N}_{\uparrow\downarrow}^{1/2} + \frac{1}{2} \hat{N}_{\uparrow\downarrow}^{3/2}, \quad (\text{B.8})$$

donde $\hat{N}_{\uparrow\downarrow}^m = |m, \uparrow\downarrow\rangle\langle m, \uparrow\downarrow|$ es el operador de proyección en este espacio.

Como $\dot{V}_{0,3} = (d/dt)\text{Tr}[\hat{V}_{0,3}\hat{\rho}]$ entonces

$$\dot{V}_{0,3} = -\frac{1}{2} \dot{N}_{\uparrow\downarrow}^{-3/2} + \frac{1}{2} \dot{N}_{\uparrow\downarrow}^{-1/2} - \frac{1}{2} \dot{N}_{\uparrow\downarrow}^{1/2} + \frac{1}{2} \dot{N}_{\uparrow\downarrow}^{3/2}. \quad (\text{B.9})$$

Usando la ecuación cinética (B.7) para los $\dot{N}_{\uparrow\downarrow}^m$ y simplificando obtenemos

$$\dot{V}_{0,3} = -c_p p V_{0,3} + c_n (S_0 U_{0,0,3} - 4S_3 U_{3,0,3}). \quad (\text{B.10})$$

Ya que $\dot{V}_{0,3}$ es la componente del vector $(\dot{V}_{0,1}, \dot{V}_{0,2}, \dot{V}_{0,3})$, entonces (B.10) deberá transformarse también como un vector. Por lo tanto suponemos que la muestra de GaAsN es isotrópica y bajo esta hipótesis la expresión anterior toma la forma

$$\dot{V}_{0,i} = -c_p p V_{0,i} + c_n \left(S_0 U_{0,0,i} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,0,i} \right), \quad i = 1, 2, 3. \quad (\text{B.11})$$

Podemos realizar el mismo procedimiento en los restantes generadores diagonales $\hat{V}_{0,0}$, $\hat{V}_{3,0}$ y $\hat{V}_{3,3}$ e imponer condiciones de isotropía y de transformación para estos

tensores. Finalmente al encontrar todas estas ecuaciones podemos compactar en una sola ecuación de balance los procesos de recombinación en la trampas ocupadas como

$$\dot{V}_{j,i} = -c_p p V_{j,i} + c_n \left(S_0 U_{0,j,i} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i} \right), \quad j, i = 0, 1, 2, 3. \quad (\text{B.12})$$

.

En el caso de las TP's se tienen ocho generadores diagonales, $\hat{U}_{0,0,0}$, $\hat{U}_{3,0,0}$, $\hat{U}_{0,3,0}$, $\hat{U}_{0,0,3}$, $\hat{U}_{3,3,0}$, $\hat{U}_{3,0,3}$, $\hat{U}_{0,3,3}$ y $\hat{U}_{3,3,3}$, usando estos operadores, el par de ecuaciones (B.5)-(B.6) y bajo mismas consideraciones de isotropía en el sistema se obtienen las siguientes relaciones

$$\dot{U}_{0,j,i} = c_p p V_{j,i} - c_n \left(S_0 U_{0,j,i} - 4 \sum_{r=1}^3 S_r U_{r,j,i} \right), \quad (\text{B.13})$$

$$\dot{U}_{k,j,i} = -c_n (S_0 U_{k,j,i} - S_k U_{0,j,i}), \quad (\text{B.14})$$

con $j, i = 0, 1, 2, 3$ y $k = 1, 2, 3$.

Finalmente, se puede realizar el mismo procedimiento para los operadores tanto para la BC así como el caso trivial de la BV. Generando el sistema completo de las ecuaciones (3.39)–(3.44) del disipador de la SDR en (3.31).

B.2 Recombinación dependiente del espín electrón–núcleo en Ga³⁺

Generalizamos las ecuaciones de balance (2.17)–(2.23) para los centros de recombinación Ga³⁺. Asumimos que las tasas de recombinación c_a , c_b , c_c y c_e en cada uno de los estados de espín nuclear deben ser iguales al depender únicamente de las orientaciones relativas del espín electrónico de la BC y las TP's. De estas consideraciones es posible extender el mecanismo de recombinación incluyendo al espín nuclear como sigue

$$\dot{p} = -c_b p \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m - c_a p \sum_{m=-3/2}^{3/2} (\mathcal{N}_{\uparrow}^m + \mathcal{N}_{\downarrow}^m) \quad (\text{B.15})$$

$$\dot{n}_{\downarrow} = -c_c n_{\downarrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_0^m - 2c_e n_{\downarrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_{\uparrow}^m, \quad (\text{B.16})$$

$$\dot{n}_{\uparrow} = -c_c n_{\uparrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_0^m - 2c_e n_{\uparrow} \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_{\downarrow}^m, \quad (\text{B.17})$$

$$\dot{\mathcal{N}}_0^m = -c_c (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) \mathcal{N}_0^m + c_a p (\mathcal{N}_{\uparrow}^m + \mathcal{N}_{\downarrow}^m), \quad (\text{B.18})$$

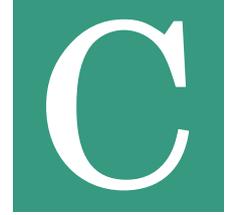
$$\dot{\mathcal{N}}_{\downarrow}^m = -2c_e n_{\uparrow} \mathcal{N}_{\downarrow}^m + \frac{c_b}{2} p \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.19})$$

$$\dot{\mathcal{N}}_{\uparrow}^m = -2c_e n_{\downarrow} \mathcal{N}_{\uparrow}^m + \frac{c_b}{2} p \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m, \quad (\text{B.20})$$

$$\dot{\mathcal{N}}_{\uparrow\downarrow}^m = 2c_e n_{\uparrow} \mathcal{N}_{\downarrow}^m + 2c_e n_{\downarrow} \mathcal{N}_{\uparrow}^m - c_b p \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m. \quad (\text{B.21})$$

Nuevamente, el índice $m = -3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ etiqueta los cuatro estados del espín nuclear del Ga^{3+} . La población del estado $q = 0$ para cada estado nuclear es \mathcal{N}_0^m . Los términos $\mathcal{N}_{\downarrow}^m$ y \mathcal{N}_{\uparrow}^m representan las poblaciones del estado de carga $q = 1$ con estado cuántico m y estado electrónico $s = 1/2$ y $s = -1/2$ respectivamente. Similarmente $\mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m$ es la población de estado de carga $q = 2$ con dos electrones en estado de singulete en el estado nuclear m . El número total de centros $q = 0$ es $\mathcal{N}_0 = \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_0^m$, el total de centros $q = 1$ es $\mathcal{N}_1 = \sum_{m=-3/2}^{3/2} (\mathcal{N}_{\downarrow}^m + \mathcal{N}_{\uparrow}^m)$ y el total de $q = 2$ es $\mathcal{N}_2 = \sum_{m=-3/2}^{3/2} \mathcal{N}_{\uparrow\downarrow}^m$.

Siguiendo un procedimiento idéntico al desarrollado para los centros Ga^{2+} , se puede llegar al modelo de tres cargas generalizado para los procesos de recombinación dependiente del espín electrón-núcleo en los centros Ga^{3+} . El modelo final es dado por el conjunto de ecuaciones (5.28)–(5.34).



TEORÍA DE WANGSNES–BLOCH–REDFIELD

En esta parte revisamos los principales puntos de la teoría de Wangsness–Bloch–Redfield [33–39] que modela el comportamiento de un sistema cuántico abierto S que interactúa débilmente con sus alrededores, como se ilustra en la figura C.1. En general, se considera que los alrededores interactúan con el sistema por medio de procesos estocásticos Markovianos¹ dependientes del tiempo.

Partimos del hamiltoniano de un sistema cuántico abierto,

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_S + \hat{H}_I(t), \quad (\text{C.1})$$

donde \hat{H}_S es el hamiltoniano del sistema de interés y \hat{H}_I describe la interacción entre S y sus alrededores. En la imagen de interacción, la ecuación de Liouville–von Newman para el operador matriz densidad es

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar}[\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\sigma}(t)], \quad (\text{C.2})$$

donde

$$\hat{\sigma}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} \hat{\rho}(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}, \quad (\text{C.3})$$

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} \hat{H}_I(t) e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}. \quad (\text{C.4})$$

¹En un proceso Markoviano la evolución del sistema de interés sólo depende de su estado actual, es decir, no tiene memoria de su pasado.

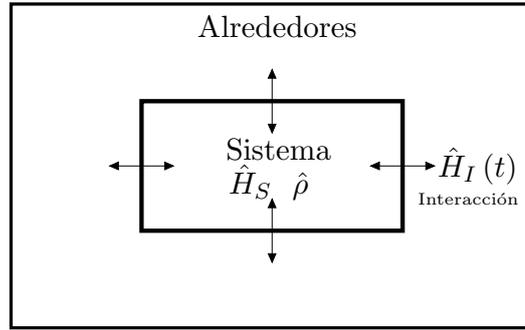


Figura C.1: Esquema ilustrativo de un sistema cuántico abierto S interactuando débilmente con sus alrededores.

Es conveniente escribir la ecuación (C.2) en la siguiente forma integral

$$\hat{\sigma}(t) = \hat{\sigma}(0) - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}(t'), \hat{\sigma}(t')]. \quad (\text{C.5})$$

Desarrollando a segundo orden en teoría de perturbación dependiente del tiempo en la expresión (C.5) y derivando con respecto al tiempo obtenemos

$$\frac{d}{dt} \hat{\sigma}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{\mathcal{H}}(t), \hat{\sigma}(0)] + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' [\hat{\mathcal{H}}(t), [\hat{\mathcal{H}}(t'), \hat{\sigma}(t')]]. \quad (\text{C.6})$$

La expresión anterior depende del pasado del sistema, esto es, no cumple el principio básico de un proceso Markoviano. Con fin de convertirla en una *ecuación maestra* es necesario imponer algunas aproximaciones con el fin de que siga el principio básico de este enfoque [36].

Como primer aproximación consideramos que la dinámica de sistema S depende débilmente del acoplamiento con sus alrededores. Esta conexión se interpreta como una amortiguación sobre la evolución del sistema de interés que destruye todo conocimiento de su pasado. En otras palabras, se impone la condición de un proceso Markoviano y en este caso $d\hat{\sigma}(t)/dt$ depende únicamente del valor presente de $\hat{\sigma}(t)$. Esta condición sobre (C.6) implica que tenemos que realizar la siguiente sustitución

$$\hat{\sigma}(t') \rightarrow \hat{\sigma}(t). \quad (\text{C.7})$$

Como segunda aproximación, consideramos que el hamiltoniano $H_I(t)$ de la ecuación (C.4) puede ser expresado como [35, 38]

$$\hat{H}_I(t) = \sum_q \mathcal{F}^{(q)*}(t) \hat{T}^{(q)}, \quad (\text{C.8})$$

donde $\mathcal{F}^{(q)*}(t)$ son funciones aleatorias dependientes del tiempo que describen el comportamiento de los alrededores y $\hat{T}^{(q)}$ son los operadores que describen la interacción con el sistema S . Se considera que $\mathcal{F}^{(q)*}(t)$ son funciones complejas y que $\hat{T}^{(q)}$ son operadores no hermitianos. En este caso para que el hamiltoniano (C.8) satisfaga $\hat{H}_I^\dagger(t) = \hat{H}_I(t)$ se debe cumplir,

$$\mathcal{F}^{*(q)}(t)\hat{T}^{(q)} = \mathcal{F}^{(q)}(t)\hat{T}^{\dagger(q)}. \quad (\text{C.9})$$

Al sustituir la ecuación (C.8) en (C.4) obtenemos

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \sum_{q,p} \mathcal{F}^{*(q)}(t)\hat{T}_p^{(q)} e^{i\omega_p^{(q)}t} = \sum_{q,p} \mathcal{F}^{(q)}(t)\hat{T}_p^{\dagger(q)} e^{-i\omega_p^{(q)}t}, \quad (\text{C.10})$$

donde hemos utilizado el hecho de que

$$e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t}\hat{T}^{(q)}e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_S t} = \sum_p \hat{T}_p^{(q)} e^{i\omega_p^{(q)}t}, \quad (\text{C.11})$$

y la propiedad (C.9) para escribir de forma equivalente este hamiltoniano.

Al sustituir las expresiones (C.7) y (C.10) en (C.6) e introducir la definición promedio de *ensembles*² [35, 38], es decir, promediar sobre todas las fluctuaciones debidas a los alrededores; obtenemos las siguientes relaciones

$$\overline{\hat{\sigma}(t)}, \quad (\text{C.12})$$

$$\overline{\mathcal{F}^{(q)}(t)}, \quad (\text{C.13})$$

$$\overline{\mathcal{F}^{(q')}(t)\mathcal{F}^{*(q)}(t')}. \quad (\text{C.14})$$

La expresión (C.12) es el promedio de las fluctuaciones de los alrededores sobre el operador de densidad. Generalmente se reemplaza $\overline{\hat{\sigma}(t)}$ por $\hat{\sigma}(t)$ y se considera que el operador $\hat{\sigma}(t)$ contemple dicho promedio [38]. Asumimos que el promedio (C.13) es igual a cero para cada valor de tiempo t , esto se debe al hecho que existen fluctuaciones en los alrededores que se cancelan entre si. En el caso en que (C.13) es diferente de cero, se puede incorporar el término restante en \hat{H}_S .

La ecuación (C.14) es una función de correlación del promedio de las interacciones del sistema y los alrededores entre los tiempos t y t' [39]. Debido a que el sistema se encuentra débilmente acoplado a los alrededores, estos últimos disipan rápidamente cualquier efecto de dicha interacción. Por lo tanto existe un intervalo corto de tiempo $t - t' \lesssim \tau_c$, con τ_c el tiempo de correlación, donde existe memoria de la interacción entre ambos. Para $t - t' > \tau_c$ existe una correlación débil y en el caso $t - t' \gg \tau_c$ no existe correlación entre ambos.

²También conocido como *ensemble de ensembles*.

Al aplicar las condiciones de los promedios de *ensemble* (C.12)–(C.14) a la ecuación (C.6) y empleando el cambio de variable $\tau = t - t'$ obtenemos

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}(t) = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_{q,q',p,p'} \left[\hat{T}_{p'}^{\dagger(q')} e^{-i\omega_{p'}^{(q')}t}, \left[\hat{T}_p^{(q)} e^{i\omega_p^{(q)}t}, \hat{\sigma}(t) \right] \right] \int_0^\infty d\tau \overline{\mathcal{F}^{(q')}(t)\mathcal{F}^{*(q)}(t-\tau)} e^{-i\omega_p^{(q)}\tau}. \quad (\text{C.15})$$

En la relación anterior hemos extendido el límite superior a infinito ya que para $\tau \gg \tau_c$ la contribución de la integral es prácticamente cero.

La ecuación (C.15) puede ser simplificada si asumimos la siguiente relación [70, 71]

$$\overline{\mathcal{F}^{(q')}(t)\mathcal{F}^{*(q)}(t-\tau)} = \delta_{q',q}\xi e^{-|\tau|/\tau_c}, \quad (\text{C.16})$$

para

$$\omega_p^{(q)}\tau_c \ll 1. \quad (\text{C.17})$$

La expresión (C.16) es una función de correlación tipo Ornstein-Uhlenbeck [72, 73]. La condición (C.17) recibe el nombre *reducción extrema* y considera que el tiempo de correlación τ_c es corto que el producto $\omega_p^{(q)}\tau_c$ es muy pequeño y por tanto $\omega_p^{(q)}\tau \approx 0$ ya que $\tau \lesssim \tau_c$.

Al aplicar estas dos últimas aproximaciones en la ecuación (C.15) y al resolver la integral con ayuda de (C.16) obtenemos

$$\frac{d}{dt}\hat{\sigma}(t) = -\frac{1}{2\tau_r} \sum_{q,p,p'} \left[\hat{T}_{p'}^{\dagger(q)} e^{-i\omega_{p'}^{(q)}t}, \left[\hat{T}_p^{(q)} e^{i\omega_p^{(q)}t}, \hat{\sigma}(t) \right] \right], \quad (\text{C.18})$$

donde

$$\tau_r = \frac{\hbar^2}{2\xi\tau_c}, \quad (\text{C.19})$$

es el tiempo de relajación del sistema S con ξ es la amplitud de correlación cuando $\tau = 0$ ($t = t'$).

Finalmente, usando la definición de la matriz de densidad en la imagen de interacción (C.3) podemos encontrar la siguiente *ecuación maestra* en la imagen de Schrödinger,

$$\frac{d}{dt}\hat{\rho}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\hat{H}_S, \hat{\rho}(t)] + \hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}), \quad (\text{C.20})$$

donde

$$\hat{\mathcal{D}}(\hat{\rho}) = -\frac{1}{2\tau_r} \sum_q \left[\hat{T}^{\dagger(q)}, \left[\hat{T}^{(q)}, \hat{\rho}(t) \right] \right], \quad (\text{C.21})$$

es el disipador [36] de la ecuación maestra (C.20).

Para finalizar, es importante revisar los rangos de tiempo para los cuales es válida esta teoría. Dentro la aproximación de tiempo correlación corto se cumple una relación similar a (C.17),

$$\tau_c \ll \omega_I^{-1}. \quad (\text{C.22})$$

donde ω_I es la frecuencia característica del hamiltoniano de perturbación $|H_I| \approx \hbar\omega_I$. A esta condición se le denomina *reducción de movimiento* [38]. Esta condición define un intervalo de tiempo para matriz de densidad. Así

$$\tau_c \ll t \ll \omega_I^{-1}, \quad (\text{C.23})$$

es la escala de tiempo para cual es valida esta teoría de Wangsness–Bloch–Redfield. Podemos estimar el tiempo de correlación en las ecuaciones anteriores usando la relación [74]

$$\tau_c \approx \frac{1}{\tau_r \omega_S^2}, \quad (\text{C.24})$$

donde ω_S es la frecuencia de energía del sistema S con $|H_S| \approx \hbar\omega_S$ y τ_r es el tiempo de relajación dado por (C.19).



INTERACCIONES DIPOLAR MAGNÉTICA Y CUADRUPOLAR ELÉCTRICA

En este apéndice introducimos los hamiltonianos de interacción (C.4) dipolar magnético y cuadrupolar eléctrico que estudiamos para la relajación del espín nuclear. También incluimos la forma explícita de los elementos matriz para estos disipadores nucleares.

D.1 Interacción dipolar magnética

El hamiltoniano de la interacción dipolar magnética [62] es de la forma

$$\hat{H}_D(t) = -\gamma \sum_{i=1}^3 \mathcal{B}_i(t) \hat{J}_i, \quad (\text{D.1})$$

donde $\mathcal{B}_i(t)$ son las componentes del campo magnético local fluctuante y $\gamma \sim e\hbar/2m$ es el magnetón de Bohr. Los operadores hermitianos \hat{J}_i representan las componentes espín del núcleo $J = 3/2$ o electrón $J = 1/2$.

Utilizando las definiciones de operadores esféricos irreducibles [33, 58, 62] es posible escribir el hamiltoniano (D.2) en la forma

$$\hat{H}_D(t) = \sum_{r=-1}^1 \mathcal{F}^{*(1,r)}(t) \hat{T}^{(1,r)}, \quad (\text{D.2})$$

donde

$$\hat{T}^{(1,0)} = \hat{J}_3, \quad (\text{D.3})$$

$$\hat{T}^{(1,\pm 1)} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{J}_1 \pm i \hat{J}_2), \quad (\text{D.4})$$

son las componentes del tensor irreducible de rango uno, y

$$\mathcal{F}^{(1,0)}(t) = -\gamma \mathcal{B}_3(t), \quad (\text{D.5})$$

$$\mathcal{F}^{(1,\pm 1)}(t) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \gamma [\mathcal{B}_1(t) \pm i \mathcal{B}_2(t)]. \quad (\text{D.6})$$

son las componentes del campo magnético fluctuante en esta representación.

D.2 Interacción cuadrupolar eléctrica

Similarmente al caso anterior, el hamiltoniano de la interacción cuadrupolar eléctrica [35, 62] es

$$\hat{H}_Q(t) = \frac{eQ}{6J(2J-1)} \sum_{i,j=1}^3 \mathcal{V}_{ij}(t) \left[\frac{3}{2} (\hat{J}_i \hat{J}_j + \hat{J}_j \hat{J}_i) - \delta_{ij} J(J+1) \right], \quad (\text{D.7})$$

aquí e es la carga elemental, Q es el momento cuadrupolar eléctrico del núcleo con valor de espín $J \geq 1$. En el hamiltoniano (D.7) $\mathcal{V}_{ij}(t)$ representa las componentes del tensor gradiente del campo eléctrico fluctuante y es definido como

$$\mathcal{V}_{ij}(t) = \left(\frac{\partial^2 V}{\partial r_i \partial r_j} \right)_{\mathbf{r}=0}, \quad (\text{D.8})$$

con $V \equiv V(r, t)$ es el potencial electrostático. Notamos que la ecuación (D.8) es evaluada en el sitio del núcleo $\mathbf{r} = 0$ y además representa un tensor simétrico de traza nula.

Nuevamente podemos pasar a la representación de tensores irreducibles [33, 35, 38, 62] y escribir el hamiltoniano (D.7) como

$$\hat{H}_Q(t) = \sum_{r=-2}^2 \mathcal{F}^{*(2,r)}(t) \hat{T}^{(2,r)}, \quad (\text{D.9})$$

con

$$\hat{T}^{(2,\pm 0)} = \frac{1}{6} (2\hat{J}_3^2 - \hat{J}_2^2 - \hat{J}_1^2), \quad (\text{D.10})$$

$$\hat{T}^{(2,\pm 1)} = \mp \frac{1}{2\sqrt{6}} [(\hat{J}_1 \hat{J}_3 + \hat{J}_3 \hat{J}_1) \pm i (\hat{J}_2 \hat{J}_3 + \hat{J}_3 \hat{J}_2)], \quad (\text{D.11})$$

$$\hat{T}^{(2,\pm 2)} = \frac{1}{2\sqrt{6}} [(\hat{J}_1^2 - \hat{J}_2^2) \pm i (\hat{J}_1 \hat{J}_2 + \hat{J}_2 \hat{J}_1)], \quad (\text{D.12})$$

las componentes del tensor esférico irreducible de rango dos. Las componentes del tensor del gradiente del campo eléctrico fluctuante en esta representación son

$$\mathcal{F}^{(1,0)}(t) = \frac{3eQ}{2\hbar J(2J-1)} \mathcal{V}_{33}(t), \quad (\text{D.13})$$

$$\mathcal{F}^{(1,\pm 1)}(t) = \mp \frac{\sqrt{6}eQ}{2\hbar J(2J-1)} [\mathcal{V}_{13}(t) \pm i\mathcal{V}_{23}(t)], \quad (\text{D.14})$$

$$\mathcal{F}^{(1,\pm 2)}(t) = \frac{\sqrt{6}eQ}{4\hbar J(2J-1)} [\mathcal{V}_{11}(t) - \mathcal{V}_{22}(t) \pm i\mathcal{V}_{12}(t)]. \quad (\text{D.15})$$

En estas últimas expresiones se usa el hecho que el tensor (D.8) es simétrico.

D.3 Elementos de matriz del disipador dipolar magnético

Los elementos de matriz para el disipador dipolar magnético para las trampas ocupadas son

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2},\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2;\frac{3}{2},\frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.16})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2;-\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.17})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3\tau_{n2}} \left(7\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},\frac{1}{2}} - 3\hat{\rho}_{2;\frac{3}{2},\frac{3}{2}} - 4\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.18})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{3\tau_{n2}} \left(7\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} - 3\hat{\rho}_{2;-\frac{3}{2},-\frac{3}{2}} - 4\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.19})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2},\frac{1}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2;\frac{3}{2},\frac{1}{2}} - \sqrt{3}\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.20})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left[4\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} - \sqrt{3} \left(\hat{\rho}_{2;\frac{3}{2},\frac{1}{2}} + \hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} \right) \right], \quad (\text{D.21})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} - \sqrt{3}\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},-\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.22})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2},\frac{3}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},\frac{3}{2}} - \sqrt{3}\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.23})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left[4\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} - \sqrt{3} \left(\hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},\frac{3}{2}} + \hat{\rho}_{2;-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} \right) \right], \quad (\text{D.24})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{2}{3\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2;-\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} - \sqrt{3}\hat{\rho}_{2;-\frac{1}{2},\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.25})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2;\frac{3}{2},-\frac{1}{2}} - \hat{\rho}_{2;\frac{1}{2},-\frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.26})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.27})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.28})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.29})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{4}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}, \quad (\text{D.30})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{4}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}. \quad (\text{D.31})$$

Las expresiones anteriores pueden ser expresadas de la siguiente forma

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{m, m'} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \sum_{m_1, m'_1} \mathcal{Q}_{m, m'; m_1, m'_1}^{(DM)} \hat{\rho}_{2; m_1, m'_1}. \quad (\text{D.32})$$

Análogamente podemos obtener los elementos de matriz del disipador de las trampas desocupadas y compactar la expresión final como

$$(\hat{\mathcal{D}}_1)_{s, m; s', m'} = -\frac{1}{\tau_{n1}} \sum_{m_1, m'_1} \mathcal{Q}_{m, m'; m_1, m'_1}^{(DM)} \hat{\rho}_{1; s, m_1; s', m'_1}. \quad (\text{D.33})$$

D.4 Elementos de matriz del disipador cuadrupolar eléctrico

Los elementos de matriz para el disipador cuadrupolar eléctrico para las trampas ocupadas son

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}} - \frac{\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}}{2} \right), \quad (\text{D.34})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} - \frac{\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}}{2} \right), \quad (\text{D.35})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, \frac{1}{2}} - \frac{\hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}}{2} \right), \quad (\text{D.36})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \left(\hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} - \frac{\hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, \frac{3}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}}{2} \right), \quad (\text{D.37})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}} - \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.38})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} - \hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.39})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.40})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, \frac{3}{2}} - \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \right) \quad (\text{D.41})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}, \quad (\text{D.42})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}, \quad (\text{D.43})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} + \hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.44})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; \frac{1}{2}, -\frac{3}{2}} + \hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.45})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} \right), \quad (\text{D.46})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{2\tau_{n2}} \left(3\hat{\rho}_{2; -\frac{1}{2}, \frac{3}{2}} + \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{1}{2}} \right), \quad (\text{D.47})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{\frac{3}{2}, -\frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}}, \quad (\text{D.48})$$

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{-\frac{3}{2}, \frac{3}{2}} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \hat{\rho}_{2; -\frac{3}{2}, \frac{3}{2}}. \quad (\text{D.49})$$

Estos elementos son presentados de forma compacta como

$$(\hat{\mathcal{D}}_2)_{m, m'} = -\frac{1}{\tau_{n2}} \sum_{m_1, m'_1} \mathcal{Q}_{m, m'; m_1, m'_1}^{(CE)} \hat{\rho}_{2; m_1, m'_1}, \quad (\text{D.50})$$

y en el caso de las trampas desocupadas son

$$(\hat{\mathcal{D}}_1)_{s, m; s', m'} = -\frac{1}{\tau_{n1}} \sum_{m_1, m'_1} \mathcal{Q}_{m, m'; m_1, m'_1}^{(CE)} \hat{\rho}_{1; s, m_1; s', m'_1}. \quad (\text{D.51})$$



ARTÍCULOS DE INVESTIGACIÓN PUBLICADOS

En esta parte presentamos los artículos de investigación publicados que sustentan la presente tesis de doctorado. Estos artículos fueron publicados en las revistas y con la referencia que se enuncian. Presentamos únicamente la primer página de estos trabajos.

**E.1 Journal of Materials Science: Materials in
Electronics (2018)**

<https://doi.org/10.1007/s10854-018-8803-z>

*Spin-filtering effect in GaAsN: Electron-nuclear spin dynamics
of Ga³⁺ centers*

V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, S. Azaizia, H. Carrère, L. A.
Bakaleinikov, V. K. Kalevich, E. L. Ivchenko, X. Marie, T. Amand, A. Balocchi,
A. Kunold





Spin-filtering effect in GaAsN: electron-nuclear spin dynamics of Ga³⁺ centers

V. G. Ibarra-Sierra¹ · J. C. Sandoval-Santana¹ · S. Azaizia² · H. Carrère² · L. A. Bakaleinikov³ · V. K. Kalevich³ · E. L. Ivchenko³ · X. Marie² · T. Amand² · A. Balocchi² · A. Kunold⁴

Received: 31 October 2017 / Accepted: 20 February 2018
© Springer Science+Business Media, LLC, part of Springer Nature 2018

Abstract

The impact of Ga³⁺ centers in the spin-filtering effect observed in GaAsN samples is investigated through a model based on the master equation approach. Our results, compared with experimental data, show that, Ga³⁺ are essential to understanding the behavior of the photoluminescence intensity and degree of circular polarization as functions of a Faraday configuration magnetic field. The model presented here takes into account the interplay of Ga²⁺ and Ga³⁺ centers, Zeeman and hyperfine interaction. The various processes that drive the spin-filtering effect, as the spin selective capture of conduction band electrons into Ga centers are also considered here.

1 Introduction

GaAsN dilute semiconductors have attracted significant attention mainly due to their applications in telecommunications [1], photovoltaic devices with efficiency close to 50% [2], and optoelectronic devices in general [3]. The unusually large bowing parameter of semiconductor alloys containing N considerably diminishes their band gap [4, 5] allowing to tune their emission wave length within the telecommunication range [6]. Even though the incorporation of a small amount of N in the crystal lattice of GaAs deteriorates the photoluminescence and carrier lifetime [7, 8], it introduces new and interesting properties regarding the spin polarization of conduction band (CB) electrons [6]. The longer spin relaxation times and record spin polarizations (almost 100%) attained at room temperature under circularly polarized light

excitation are mainly due to Ga spin-filtering defects [9–17]. This phenomenon, commonly termed as a defect-engineered spin-filtering effect, relies on the selective capture of one-electron according to its spin orientation [15, 16, 18–20]. Later experiments on GaAsN subject to a weak magnetic field in Faraday configuration [21–25] revealed that the hyperfine interaction (HFI), which couples the electronic and nuclear spins in Ga centers, plays a key role in the spin-filtering mechanism. The HFI mixes the bound electron spin states mainly producing three effects [25–27]: (i) a reduction of the spin polarization in zero magnetic field, (ii) a dynamical polarization of the nuclear spins and (iii) an Overhauser-like magnetic field. Most of the observed results can be qualitatively and, in some cases, quantitatively reproduced by a generalization of the well known two charge model [9, 10, 15, 19, 28].

Even though presently the general agreement is that Ga²⁺ are the spin-filtering centers, there is a great amount of experimental and theoretical evidence pointing to the existence of other types of Ga interstitial defects (e.g. Ga³⁺) [29–32] that could, in principle, intervene in the spin-filtering effect. Early research on dopant diffusion in GaAs suggests that divalent elements such as Zn [29, 30] and Cd [31] mostly substitute into the Ga sublattice producing Ga interstitial defects through the kick-out mechanism. Using secondary ion-mass spectroscopy on ion-implanted Zn diffusion, it was found that a quadratic diffusion law characterizes the Zn diffusion implying thermal equilibrium and doubly or triply charged Ga interstitial defects [29, 30]. Similar studies with ion-implanted Cd diffusion [31]

✉ V. G. Ibarra-Sierra
vibarra@xanum.uam.mx

¹ Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana, Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340 Mexico City, Mexico

² Université de Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO, 135 avenue de Ranguéil, 31077 Toulouse, France

³ Ioffe Physical-Technical Institute, St. Petersburg 194021, Russia

⁴ Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa-Tamaulipas, 02200 Mexico City, Mexico



E.2 Physical Review B, 95, 195204 (2017)

Electron-nuclear spin dynamics of Ga²⁺ paramagnetic centers probed by spin-dependent recombination: A master equation approach

V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, S. Azaizia, H. Carrère, L. A. Bakaleinikov, V. K. Kalevich, E. L. Ivchenko, X. Marie, T. Amand, A. Balocchi, A. Kunold



PHYSICAL REVIEW B 95, 195204 (2017)

Electron-nuclear spin dynamics of Ga²⁺ paramagnetic centers probed by spin-dependent recombination: A master equation approach

V. G. Ibarra-Sierra,¹ J. C. Sandoval-Santana,¹ S. Azaizia,² H. Carrère,² L. A. Bakaleinikov,³ V. K. Kalevich,³ E. L. Ivchenko,³ X. Marie,² T. Amand,² A. Balocchi,² and A. Kunold⁴

¹*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340 Ciudad de México, Mexico*

²*Université de Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO, 135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France*

³*Ioffe Physical-Technical Institute, 194021 St. Petersburg, Russia*

⁴*Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa-Tamaulipas, 02200 Ciudad de México, Mexico*

(Received 13 November 2016; revised manuscript received 3 April 2017; published 10 May 2017)

Similar to nitrogen-vacancy centers in diamond and impurity atoms in silicon, interstitial gallium deep paramagnetic centers in GaAsN have been proven to have useful characteristics for the development of spintronic devices. Among other interesting properties, under circularly polarized light, gallium centers act as spin filters that dynamically polarize free and bound electrons reaching record spin polarizations (close to 100%). Furthermore, the recent observation of the amplification of the spin filtering effect under a Faraday configuration magnetic field has suggested that the hyperfine interaction that couples bound electrons and nuclei permits the optical manipulation of the nuclear spin polarization. Even though the mechanisms behind the nuclear spin polarization in gallium centers are fairly well understood, the origin of nuclear spin relaxation and the formation of an Overhauser-like magnetic field remain elusive. In this work we develop a model based on the master equation approach to describe the evolution of electronic and nuclear spin polarizations of gallium centers interacting with free electrons and holes. Our results are in good agreement with existing experimental observations. In particular, we are able to reproduce the amplification of the spin filtering effect under a circularly polarized excitation in a Faraday configuration magnetic field. In regard to the nuclear spin relaxation, the roles of nuclear dipolar and quadrupolar interactions are discussed. Our findings show that, besides the hyperfine interaction, the spin relaxation mechanisms are key to understand the amplification of the spin filtering effect and the appearance of the Overhauser-like magnetic field. To gain a deeper insight in the interplay of the hyperfine interaction and the relaxation mechanisms, we have also performed calculations in the pulsed excitation regime. Our model's results allow us to propose an experimental protocol based on time-resolved spectroscopy. It consists of a pump-probe photoluminescence scheme with the detection and the tracing of the electron-nucleus flip-flops through photoluminescence measurements.

DOI: 10.1103/PhysRevB.95.195204

I. INTRODUCTION

Negatively charged nitrogen-vacancy centers in diamond [1–5], phosphorous atom impurities in silicon [6–11], and other schemes based on point defects embedded in semiconductors have been widely studied as alternatives to develop quantum bits [12,13]. One of the necessary conditions for quantum computing is long electron spin decoherence times to ensure a minimum of fault tolerance [10,14]. In diamond's nitrogen-vacancy centers [15], silicon vacancies in silicon carbide [16], silicon [17], and any III-V based quantum dots [10,18] the fluctuating nuclear bath is the main source limiting spin coherence time. The nuclear dipole-dipole interaction is believed to be the dominant mechanism behind the diffusion-induced electron-spin decoherence [19]. To protect the dynamics of the nuclear spins of point defects from the decoherence induced by the environment, semiconductors mainly composed of spin-zero isotopes such as silicon and carbon are preferred over III-V semiconductors [5]. Even though the two stable isotopes of Ga, ⁶⁹Ga and ⁷¹Ga, have nuclear spin 3/2, in dilute nitride GaAsN point interstitial defects give rise to paramagnetic centers that have very peculiar and useful properties. One of them is the spin-dependent recombination (SDR) [20–27]. In Ga(In)NAs

alloys, Ga_i²⁺ paramagnetic centers with only one bound electron can selectively capture another conduction band (CB) electron with the opposite spin orientation [26–30]. Due to this mechanism, paramagnetic centers act as a spin filter that blocks the recombination of CB electrons with the same spin and efficiently captures electrons whose spin is in the opposite direction. In the centers, the bound and captured electrons form a singlet state that is destroyed as either one of the electrons recombines to the valence band (VB). It is important to note that while the lifetime of conduction electrons with the spin opposite to that of the bound electrons is a few picoseconds, the lifetime of conduction electrons copolarized with the majority of bound electrons may extend to nanoseconds. As a consequence the free photoelectron spin polarization can reach over 80% under circularly polarized incident light. Additionally the photoluminescence (PL) intensity can be as high as 800% under circularly polarized optical excitation compared to a linearly polarized one [21,22]. The increase in CB electron population allows even for the detection of electron spin polarization by electrical means due to a giant photoconductivity effect under circularly polarized light [24,31].

Whereas in diamond and silicon the optical excitation acts directly on the point defects, in GaAsN the bound electron is



E.3 Journal of Mathematical Physics, 57, 042104 (2016)

*Time evolution of two-dimensional quadratic Hamiltonians: A
Lie algebraic approach*

J. C. Sandoval-Santana, V. G. Ibarra-Sierra, J. L. Cardoso, A. Kunold





Time evolution of two-dimensional quadratic Hamiltonians: A Lie algebraic approach

J. C. Sandoval-Santana,¹ V. G. Ibarra-Sierra,¹ J. L. Cardoso,²
and A. Kunold²

¹Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340 México D.F., Mexico

²Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa-Tamaulipas, Azcapotzalco, 02200 México D.F., México

(Received 2 February 2016; accepted 11 April 2016; published online 26 April 2016)

We develop a Lie algebraic approach to systematically calculate the evolution operator of a system described by a generalized two-dimensional quadratic Hamiltonian with time-dependent coefficients. Although the development of the Lie algebraic approach presented here is mainly motivated by the two-dimensional quadratic Hamiltonian, it may be applied to investigate the evolution operators of any Hamiltonian having a dynamical algebra with a large number of elements. We illustrate the method by finding the propagator and the Heisenberg picture position and momentum operators for a two-dimensional charge subject to uniform and constant electromagnetic fields. *Published by AIP Publishing.* [<http://dx.doi.org/10.1063/1.4947296>]

I. INTRODUCTION

In many applications as radio-frequency ion traps,^{1–8} quantum optics,^{9–12} cosmology,^{13,14} quantum field theory,¹⁵ quantum dissipation,^{16–22} magneto-transport in lateral heterostructures^{23–26} and even gravitational waves²⁷ the time evolution of particles in quadratic potentials is frequently examined. The one-dimensional, generalized time-dependent quadratic Hamiltonian is given by

$$\hat{H} = a_1(t) + a_2(t)\hat{x} + a_3(t)\hat{p} + a_4(t)\hat{x}^2 + a_5(t)\hat{p}^2 + a_6(t)(\hat{x}\hat{p} + \hat{p}\hat{x}), \quad (1)$$

where \hat{x} and \hat{p} are the position and momentum operators following the standard commutation relations. Aside from the simple harmonic oscillator, a large number of interesting systems arise from this Hamiltonian as the linear potential,^{28,29} the driven harmonic oscillator,^{30,31} Kanai-Caldirola Hamiltonians,^{16–21} and time dependent harmonic oscillators, i.e., an oscillator with time-varying frequency.^{21,32,33} The time evolution generated by the most general version of (1) has been studied by means of Lewis and Riesenfeld³⁴ invariants³⁵ and through linear invariants.¹

Combining two one-dimensional generalized quadratic Hamiltonians along the x and y coordinates and adding cross terms for the position and momentum operators one arrives at the most general form of the two-dimensional quadratic Hamiltonian

$$\begin{aligned} \hat{H} = & a_1(t) + a_2(t)\hat{x} + a_3(t)\hat{y} + a_4(t)\hat{p}_x + a_5(t)\hat{p}_y + a_6(t)\hat{x}^2 + a_7(t)\hat{y}^2 + a_8(t)\hat{x}\hat{y} + a_9(t)\hat{p}_x^2 \\ & + a_{10}(t)\hat{p}_y^2 + a_{11}(t)\hat{p}_x\hat{p}_y + a_{12}(t)(\hat{x}\hat{p}_x + \hat{p}_x\hat{x}) + a_{13}(t)(\hat{y}\hat{p}_y + \hat{p}_y\hat{y}) \\ & + a_{14}(t)\hat{x}\hat{p}_y + a_{15}(t)\hat{y}\hat{p}_x. \quad (2) \end{aligned}$$

Many Hamiltonians of physical significance stem from (2), for example, a single electron in an elliptically shaped quantum dot with quadratic confining potential, a charge subject to variable electromagnetic fields or two-dimensional quadratic Kanai-Caldirola Hamiltonians among others.

Some special cases emerging from these Hamiltonians have been studied by diverse mathematical methods. For instance, the time dependent linear potential has been treated through the Lewis and Riesenfeld³⁴ invariant theory,^{28,29,36} Feynman's path integrals,^{37–41} time-space transformation



E.4 Annals of Physics, 362 (2015) 83–117

Lie algebraic approach to the time-dependent quantum general harmonic oscillator and the bi-dimensional charged particle in time-dependent electromagnetic fields

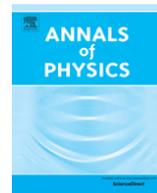
V. G. Ibarra-Sierra, J. C. Sandoval-Santana, J. L. Cardoso, A. Kunold





Contents lists available at ScienceDirect

Annals of Physics

journal homepage: www.elsevier.com/locate/aop

Lie algebraic approach to the time-dependent quantum general harmonic oscillator and the bi-dimensional charged particle in time-dependent electromagnetic fields



V.G. Ibarra-Sierra^a, J.C. Sandoval-Santana^a, J.L. Cardoso^b,
A. Kunold^{b,*}

^a Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, 09340 México D.F., Mexico

^b Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa-Tamaulipas, Azcapotzalco, 02200 México D.F., Mexico

HIGHLIGHTS

- We deal with the general quadratic Hamiltonian and a particle in electromagnetic fields.
- The evolution operator is worked out through the Lie algebraic approach.
- We also obtain the propagator and Heisenberg picture position and momentum operators.
- Analytical expressions for a rotating quadrupole field ion trap are presented.
- Exact solutions for magneto-transport in variable electromagnetic fields are shown.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 17 April 2015

Accepted 23 July 2015

Available online 30 July 2015

Keywords:

Quantum harmonic oscillator

Charged particle in electromagnetic fields

Lie algebra

Evolution operator

Ion trap

ABSTRACT

We discuss the one-dimensional, time-dependent general quadratic Hamiltonian and the bi-dimensional charged particle in time-dependent electromagnetic fields through the Lie algebraic approach. Such method consists in finding a set of generators that form a closed Lie algebra in terms of which it is possible to express a quantum Hamiltonian and therefore the evolution operator. The evolution operator is then the starting point to obtain the propagator as well as the explicit form of the Heisenberg picture position and momentum operators. First, the set of generators forming a closed Lie algebra is identified for the general quadratic

* Corresponding author.

E-mail address: akb@correo.azc.uam.mx (A. Kunold).

<http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2015.07.022>

0003-4916/© 2015 Elsevier Inc. All rights reserved.



E.5 Physical Review B 97, 155201 (2018)

*Electron–nuclear coherent spin oscillations probed by
spin-dependent recombination*

S. Azaizia, H. Carrère, J. C. Sandoval-Santana, V. G. Ibarra-Sierra, V. K.
Kalevich, E. L. Ivchenko, L. A. Bakaleinikov, X. Marie, T. Amand, A. Kunold,
A. Balocchi



Electron-nuclear coherent spin oscillations probed by spin-dependent recombination

S. Azaizia,¹ H. Carrère,¹ J. C. Sandoval-Santana,² V. G. Ibarra-Sierra,² V. K. Kalevich,³ E. L. Ivchenko,³ L. A. Bakaleinikov,³ X. Marie,¹ T. Amand,¹ A. Kunold,⁴ and A. Balocchi^{1,*}

¹Université de Toulouse, INSA-CNRS-UPS, LPCNO, 135 avenue de Rangueil, 31077 Toulouse, France

²Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Avenida San Rafael Atlixco 186, Colonia Vicentina, 09340 Mexico City, Mexico

³Ioffe Physical-Technical Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

⁴Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco, Avenida San Pablo 180, Colonia Reynosa-Tamaulipas, 02200 Mexico City, Mexico



(Received 1 March 2018; published 5 April 2018)

We demonstrate the triggering and detection of coherent electron-nuclear spin oscillations related to the hyperfine interaction in Ga deep paramagnetic centers in GaAsN by band-to-band photoluminescence without an external magnetic field. In contrast to other point defects such as Cr^{4+} in SiC, Ce^{3+} in yttrium aluminum garnet crystals, nitrogen-vacancy centers in diamond, and P atoms in silicon, the bound-electron spin in Ga centers is not directly coupled to the electromagnetic field via the spin-orbit interaction. However, this apparent drawback can be turned into an advantage by exploiting the spin-selective capture of conduction band electrons to the Ga centers. On the basis of a pump-probe photoluminescence experiment we measure directly in the temporal domain the hyperfine constant of an electron coupled to a gallium defect in GaAsN by tracing the dynamical behavior of the conduction electron spin-dependent recombination to the defect site. The hyperfine constants and the relative abundance of the nuclei isotopes involved can be determined without the need of an electron spin resonance technique and in the absence of any magnetic field. Information on the nuclear and electron spin relaxation damping parameters can also be estimated from the oscillation amplitude decay and the long-time-delay behavior.

DOI: 10.1103/PhysRevB.97.155201

I. INTRODUCTION

Electron and nuclear spins of well-isolated point defects in semiconductors are excellent candidates for understanding fundamental spin-coupling mechanisms and are a model system for quantum information processing. The coupling through hyperfine interaction (HFI) represents a key spin mechanism in semiconductor systems: responsible for creating mixed electron-nuclear spin states, it has been shown to be useful, e.g., for electron-nuclear spin transfer, in controlling the electron spin coherence time of P donor sites in Si [1–6], and the nitrogen-vacancy centers in diamond [7–16]. The HFI is, however, also responsible for electron and nuclear spin relaxation and decoherence [17].

Similar to nitrogen in diamond, on the one hand, and to shallow defects in silicon, on the other hand, interstitial Ga_i^{2+} defects in the dilute nitride GaAsN [18,19] unite the characteristics of deep and well-isolated paramagnetic centers with an electrically and optically addressable semiconducting system, leading, e.g., to the giant spin-dependent photoconductivity effect [20,21]. The incorporation of nitrogen in (In)GaAs gives rise to paramagnetic interstitial centers composed of a Ga_i^{2+} atom and a single resident electron [19]. These defect sites are at the origin of a very efficient spin-dependent recombination of conduction-band (CB) electrons. This has proven to be an effective tool for, for instance, generating an exceptionally high spin polarization (up to $\sim 100\%$) of free and bound electrons

in these nonmagnetic dilute nitride semiconductors at room temperature [22–25].

Optically or electrically detected magnetic resonance techniques are consistently employed for manipulating and probing defect spins through the hyperfine interaction and also to identify the defect chemical nature [26,27]. Optically detected magnetic resonance, a variation of nuclear resonance techniques, has been demonstrated on Cr^{4+} impurity ensembles in SiC and GaN [28]. Mostly due to the weak magnetization of nuclear spins, these methods have very low sensitivity. Furthermore, attempts to improve the detection involve high magnetic fields and cryogenic temperatures. Time-resolved Faraday rotation has been successfully used to monitor the $5d$ electron spin time evolution of Ce^{3+} point defects in yttrium aluminum garnet crystals [29]. These techniques partly rely on the spin polarization of electrons bound to centers by coupling the spin states and the electromagnetic field via the spin-orbit interaction occurring in orbitals other than s . Despite the many similarities, in this regard, Ga_i^{2+} centers are fundamentally different. The $4s$ electron spin in Ga_i^{2+} point defects, unlike the $5d$ electron spin in Ce^{3+} , is not directly coupled to the electromagnetic field. However, in these centers CB electrons recombine according to their spin orientation, dynamically polarizing the bound-electron spins. This spin-dependent recombination process, which basically relies on the Pauli exclusion principle, not only can be used to spin polarize the bound electron and to control the degree of nuclear spin polarization [30] but can also be exploited to sense the electron spin dynamics with a time resolution of about 10 ps.

*Corresponding author: andrea.balocchi@insa-toulouse.fr



BIBLIOGRAFÍA

- [1] P. Ball, “Meet the spin doctors...,” *Nature*, vol. 404, no. 6781, pp. 918–920, 2000.
- [2] B. E. Kane, “A silicon-based nuclear spin quantum computer,” *nature*, vol. 393, no. 6681, pp. 133–137, 1998.
- [3] C. Chappert, A. Fert, and F. N. Van Dau, “The emergence of spin electronics in data storage,” *Nature materials*, vol. 6, no. 11, p. 813, 2007.
- [4] R. Fiederling, M. Keim, G. a. Reuscher, W. Ossau, G. Schmidt, A. Waag, and L. Molenkamp, “Injection and detection of a spin-polarized current in a light-emitting diode,” *Nature*, vol. 402, no. 6763, pp. 787–790, 1999.
- [5] M. Hetterich, W. Löffler, P. Aßhoff, T. Passow, D. Litvinov, D. Gerthsen, and H. Kalt, “Electrical spin injection into single *InGaAs* quantum dots,” in *Advances in solid state physics*, pp. 103–114, Springer, 2009.
- [6] J. R. Hauptmann, J. Paaske, and P. E. Lindelof, “Electric-field-controlled spin reversal in a quantum dot with ferromagnetic contacts,” *Nature Physics*, vol. 4, no. 5, pp. 373–376, 2008.
- [7] Y. Ohno, D. Young, B. a. Beschoten, F. Matsukura, H. Ohno, and D. Awschalom, “Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure,” *Nature*, vol. 402, no. 6763, pp. 790–792, 1999.
- [8] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. Von Molnar, and L. Chang, “Magnetotransport properties of p-type (*In,Mn*) as diluted magnetic iii-v semiconductors,” *Physical Review Letters*, vol. 68, no. 17, p. 2664, 1992.
- [9] L. Lombez, P.-F. Braun, H. Carrere, B. Urbaszek, P. Renucci, T. Amand, X. Marie, J. Harmand, and V. Kalevich, “Spin dynamics in dilute nitride semiconductors at room temperature,” *Applied Physics Letters*, vol. 87, no. 25, p. 252115, 2005.

- [10] A. Y. Egorov, V. Kalevich, M. Afanasiev, A. Y. Shiryaev, V. Ustinov, M. Ikezawa, and Y. Masumoto, "Determination of strain-induced valence-band splitting in $GaAsN$ thin films from circularly polarized photoluminescence," *Journal of applied physics*, vol. 98, no. 1, p. 013539, 2005.
- [11] V. Kalevich, E. L. Ivchenko, M. Afanasiev, A. Y. Shiryaev, A. Y. Egorov, V. M. Ustinov, B. Pal, and Y. Masumoto, "Spin-dependent recombination in $GaAsN$ solid solutions," *JETP letters*, vol. 82, no. 7, pp. 455–458, 2005.
- [12] V. Kalevich, A. Y. Shiryaev, E. L. Ivchenko, A. Y. Egorov, L. Lombez, D. Lagarde, X. Marie, and T. Amand, "Spin-dependent electron dynamics and recombination in $GaAs_{1-x}N_x$ alloys at room temperature," *JETP Letters*, vol. 85, no. 3, pp. 174–178, 2007.
- [13] F. Zhao, A. Balocchi, A. Kunold, J. Carrey, H. Carrere, T. Amand, N. Ben Abdallah, J. Harmand, and X. Marie, "Spin-dependent photoconductivity in nonmagnetic semiconductors at room temperature," *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 24, p. 241104, 2009.
- [14] X. Wang, I. A. Buyanova, F. Zhao, D. Lagarde, A. Balocchi, X. Marie, C. Tu, J. Harmand, and W. Chen, "Room-temperature defect-engineered spin filter based on a non-magnetic semiconductor," *Nature materials*, vol. 8, no. 3, pp. 198–202, 2009.
- [15] J. C. Sandoval-Santana, *Modelo no lineal de transporte del espín*. Tesis, UNAM, 2013.
- [16] E. F. Schubert, *Light-emitting diodes*. E. Fred Schubert, 2018.
- [17] D. J. Lepine, "Spin-dependent recombination on silicon surface," *Physical Review B*, vol. 6, no. 2, p. 436, 1972.
- [18] V. Kalevich, A. Y. Shiryaev, E. Ivchenko, M. Afanasiev, A. Y. Egorov, V. Ustinov, and Y. Masumoto, "Hanle effect and spin-dependent recombination at deep centers in $GaAsN$," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 404, no. 23, pp. 4929–4932, 2009.
- [19] V. Kalevich, M. Afanasiev, A. Y. Shiryaev, and A. Y. Egorov, "Optical orientation of nuclei in nitrogen alloys $GaAsN$ at room temperature," *JETP letters*, vol. 96, no. 9, pp. 567–571, 2012.

- [20] V. Kalevich, M. Afanasiev, A. Y. Shiryaev, and A. Y. Egorov, "Amplification of spin-filtering effect by magnetic field in *GaAsN* alloys," *Physical Review B*, vol. 85, no. 3, p. 035205, 2012.
- [21] Y. Puttison, X. Wang, I. Buyanova, and W. Chen, "Effect of hyperfine-induced spin mixing on the defect-enabled spin blockade and spin filtering in *GaNAs*," *Physical Review B*, vol. 87, no. 12, p. 125202, 2013.
- [22] Y. Puttison, X. Wang, I. Buyanova, L. Geelhaar, H. Riechert, A. Ptak, C. Tu, and W. Chen, "Efficient room-temperature nuclear spin hyperpolarization of a defect atom in a semiconductor," *Nature communications*, vol. 4, p. 1751, 2013.
- [23] A. W. Overhauser, "Polarization of nuclei in metals," *Physical Review*, vol. 92, no. 2, p. 411, 1953.
- [24] D. Lagarde, L. Lombez, X. Marie, A. Balocchi, T. Amand, V. Kalevich, A. Shiryaev, E. Ivchenko, and A. Egorov, "Electron spin dynamics in *GaAsN* and *InGaAsN* structures," *physica status solidi (a)*, vol. 204, no. 1, pp. 208–220, 2007.
- [25] A. Kunold, A. Balocchi, F. Zhao, T. Amand, N. B. Abdallah, J. Harmand, and X. Marie, "Giant spin-dependent photo-conductivity in *GaAsN* dilute nitride semiconductor," *Physical Review B*, vol. 83, no. 16, p. 165202, 2011.
- [26] C. Sandoval-Santana, A. Balocchi, T. Amand, J. Harmand, A. Kunold, and X. Marie, "Room-temperature optical manipulation of nuclear spin polarization in *GaAsN*," *Physical Review B*, vol. 90, no. 11, p. 115205, 2014.
- [27] E. Ivchenko, L. Bakaleinikov, and V. Kalevich, "Spin-dependent recombination and hyperfine interaction at deep defects," *Physical Review B*, vol. 91, no. 20, p. 205202, 2015.
- [28] E. Zucker, A. Hashimoto, T. Fukunaga, and N. Watanabe, "Ion-implanted *Zn* diffusion and impurity-induced disordering of an *AlGaAs* superlattice," *Applied physics letters*, vol. 54, no. 6, pp. 564–566, 1989.
- [29] G. Bösker, N. Stolwijk, H.-G. Hettwer, A. Rucki, W. Jäger, and U. Södervall, "Use of zinc diffusion into *GaAs* for determining properties of gallium interstitials," *Physical Review B*, vol. 52, no. 16, p. 11927, 1995.



- [30] G. Bösker, N. Stolwijk, H. Mehrer, U. Södervall, and W. Jäger, “Diffusion of *Cd* in *GaAs* and its correlation with self-diffusion on the *Ga* sublattice,” *Journal of applied physics*, vol. 86, no. 2, pp. 791–799, 1999.
- [31] T. Jen, G. Vardar, Y. Wang, and R. Goldman, “Identifying the dominant interstitial complex in dilute *GaAsN* alloys,” *Applied Physics Letters*, vol. 107, no. 22, p. 221904, 2015.
- [32] H. Bracht, M. Norseng, E. Haller, and K. Eberl, “Zinc diffusion enhanced *Ga* diffusion in *GaAs* isotope heterostructures,” *Physica B: Condensed Matter*, vol. 308, pp. 831–834, 2001.
- [33] R. K. Wangsness and F. Bloch, “The dynamical theory of nuclear induction,” *Physical Review*, vol. 89, no. 4, p. 728, 1953.
- [34] A. G. Redfield, “On the theory of relaxation processes,” *IBM Journal of Research and Development*, vol. 1, no. 1, pp. 19–31, 1957.
- [35] A. Abragam, *The principles of nuclear magnetism*. Clarendon Press, Oxford, 1961.
- [36] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The theory of open quantum systems*. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [37] A. G. Redfield, *Relaxation Theory: Density Matrix Formulation*. John Wiley and Sons, Ltd, 2007.
- [38] J. Kowalewski and L. Maler, *Nuclear spin relaxation in liquids: theory, experiments, and applications*. CRC press, 2006.
- [39] K. Blum, *Density matrix theory and applications*, vol. 64. Springer Science and Business Media, 2012.
- [40] S. Azaizia, H. Carrère, J. Sandoval-Santana, V. Ibarra-Sierra, V. Kalevich, E. Ivchenko, L. Bakaleinikov, X. Marie, T. Amand, A. Kunold, *et al.*, “Electron-nuclear coherent spin oscillations probed by spin-dependent recombination,” *Physical Review B*, vol. 97, no. 15, p. 155201, 2018.
- [41] M. I. Dyakonov and A. Khaetskii, *Spin physics in semiconductors*, vol. 1. Springer, 2008.

- [42] T. Dietl, D. D. Awschalom, M. Kaminska, and H. Ohno, *Spintronics*, vol. 82. Academic Press, 2009.
- [43] G. Slavcheva and P. Roussignol, *Optical Generation and Control of Quantum Coherence in Semiconductor Nanostructures*. Springer Science & Business Media, 2010.
- [44] K. Sato, E. Saitoh, A. Willoughby, P. Capper, and S. Kasap, *Spintronics for next generation innovative devices*. John Wiley & Sons, 2015.
- [45] J. Shah, *Ultrafast spectroscopy of semiconductors and semiconductor nanostructures*, vol. 115. Springer Science & Business Media, 2013.
- [46] J. W. Robinson, *Atomic spectroscopy*. CRC Press, 1996.
- [47] X. Wang, Y. Puttisong, C. Tu, A. J. Ptak, V. Kalevich, A. Y. Egorov, L. Geelhaar, H. Riechert, W. Chen, and I. Buyanova, “Dominant recombination centers in *Ga(In)NAs* alloys: *Ga* interstitials,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, no. 24, p. 241904, 2009.
- [48] W. M. Chen, “Applications of optically detected magnetic resonance in semiconductor layered structures,” *Thin Solid Films*, vol. 364, no. 1-2, pp. 45–52, 2000.
- [49] V. Kalevich, E. Ivchenko, A. Y. Shiryaev, M. Afanasiev, A. Y. Egorov, M. Ikezawa, and Y. Masumoto, “The sign of electron *g*-factor in *GaAs_{1-x}N_x* measured by using the Hanle effect,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 23, no. 11, p. 114008, 2008.
- [50] E. Ivchenko, V. Kalevich, A. Y. Shiryaev, M. Afanasiev, and Y. Masumoto, “Optical orientation and spin-dependent recombination in *GaAsN* alloys under continuous-wave pumping,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 22, no. 46, p. 465804, 2010.
- [51] V. Ibarra-Sierra, J. Sandoval-Santana, S. Azaizia, H. Carrère, L. Bakaleinikov, V. Kalevich, E. Ivchenko, X. Marie, T. Amand, A. Balocchi, *et al.*, “Electron-nuclear spin dynamics of *Ga²⁺* paramagnetic centers probed by

- spin-dependent recombination: A master equation approach,” *Physical Review B*, vol. 95, no. 19, p. 195204, 2017.
- [52] V. Ibarra-Sierra, J. Sandoval-Santana, J. Cardoso, and A. Kunold, “Lie algebraic approach to the time-dependent quantum general harmonic oscillator and the bi-dimensional charged particle in time-dependent electromagnetic fields,” *Annals of Physics*, vol. 362, pp. 83–117, 2015.
- [53] J. Sandoval-Santana, V. Ibarra-Sierra, J. Cardoso, and A. Kunold, “Time evolution of two-dimensional quadratic hamiltonians: A lie algebraic approach,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 57, no. 4, p. 042104, 2016.
- [54] M. Krauß, M. Aeschlimann, and H. C. Schneider, “Ultrafast spin dynamics including spin-orbit interaction in semiconductors,” *Physical review letters*, vol. 100, no. 25, p. 256601, 2008.
- [55] M. D’yakonov, V. Perel, V. Berkovits, and V. Safarov, “Optical effects due to polarization of nuclei in semiconductors,” *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics*, vol. 40, p. 950, 1975.
- [56] B. Zakharchenya, V. Kalevich, V. Kul’kov, and V. Fleisher, “Optical orientation of the electron–nuclear spin system in a semiconductor in an inclined magnetic field,” *Sov. Phys. Solid State*, vol. 23, no. 5, pp. 810–813, 1981.
- [57] F. Meier and B. P. Zakharchenya, *Optical orientation*, vol. 8. Elsevier, 2012.
- [58] J. J. Sakurai, S.-F. Tuan, and E. D. Commins, “Modern quantum mechanics, revised edition,” 1995.
- [59] W. Greiner and B. Müller, *Quantum mechanics: Symmetries*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [60] M. Dyakonov and V. Perel, “Spin relaxation of conduction electrons in non-centrosymmetric semiconductors,” *Soviet Physics Solid State, Ussr*, vol. 13, no. 12, pp. 3023–3026, 1972.
- [61] P. Boross, B. Dóra, A. Kiss, and F. Simon, “A unified theory of spin-relaxation due to spin-orbit coupling in metals and semiconductors,” *Scientific reports*, vol. 3, 2013.

- [62] D. Dubbers and H.-J. Stöckmann, *Quantum physics: the bottom-up approach: from the simple two-level system to irreducible representations*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [63] Y. Puttison, X. Wang, I. Buyanova, C. Tu, L. Geelhaar, H. Riechert, and W. Chen, “Room-temperature spin injection and spin loss across a *GaNAs/GaAs* interface,” *Applied Physics Letters*, vol. 98, no. 1, p. 012112, 2011.
- [64] V. Ibarra-Sierra, J. Sandoval-Santana, S. Azaizia, H. Carrère, L. Bakaleinikov, V. Kalevich, E. Ivchenko, X. Marie, T. Amand, A. Balocchi, *et al.*, “Spin-filtering effect in *GaAsN*: electron-nuclear spin dynamics of Ga^{3+} centers,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, pp. 1–8, 2018.
- [65] E. Ivchenko, L. Bakaleinikov, M. Afanasiev, and V. Kalevich, “Spin-dependent recombination in *GaAs_{1-x}N_x* alloys at oblique magnetic field,” *Physics of the Solid State*, vol. 58, no. 8, pp. 1539–1548, 2016.
- [66] J. Sandoval-Santana, V. Ibarra-Sierra, S. Azaizia, H. Carrère, L. Bakaleinikov, V. Kalevich, E. Ivchenko, X. Marie, T. Amand, A. Balocchi, *et al.*, “Electron-nuclear spin dynamics of *Ga* centers in *GaAsN* dilute nitride semiconductors probed by pump-probe spectroscopy,” *The European Physical Journal Plus*, vol. 133, no. 3, p. 122, 2018.
- [67] W. D. Knight, “Nuclear magnetic resonance shift in metals,” *Physical Review*, vol. 76, no. 8, p. 1259, 1949.
- [68] D. Gammon, A. L. Efros, T. Kennedy, M. Rosen, D. Katzer, D. Park, S. W. Brown, V. Korenev, and I. Merkulov, “Electron and nuclear spin interactions in the optical spectra of single *GaAs* quantum dots,” *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 22, p. 5176, 2001.
- [69] G. Landwehr, *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics II: Transport and Optics, Proceedings of the International Conference, Würzburg, Fed. Rep. of Germany, August 22–26, 1988*, vol. 87. Springer Science & Business Media, 2012.
- [70] N. Bloembergen, “Spin relaxation processes in a two-proton system,” *Physical Review*, vol. 104, no. 6, p. 1542, 1956.
- [71] P. S. Hubbard, “Some properties of correlation functions of irreducible tensor operators,” *Physical Review*, vol. 180, no. 1, p. 319, 1969.



- [72] G. E. Uhlenbeck and L. S. Ornstein, "On the theory of the brownian motion," *Physical review*, vol. 36, no. 5, p. 823, 1930.
- [73] J. Łuczka, "Non-markovian stochastic processes: Colored noise," *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 15, no. 2, p. 026107, 2005.
- [74] M. Dyakonov, "Basics of semiconductor and spin physics," in *Spin Physics in Semiconductors*, Springer, 2008.



Casa abierta al tiempo

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA METROPOLITANA

ACTA DE DISERTACIÓN PÚBLICA

No. 00045

Matrícula: 2112800069

Dinámica de la polarización del espín electrónico y nuclear en trampas paramagnéticas de Ga en GaAsN.

En la Ciudad de México, se presentaron a las 16:00 horas del día 1 del mes de agosto del año 2018 en la Unidad Iztapalapa de la Universidad Autónoma Metropolitana, los suscritos miembros del jurado:

- DR. SALVADOR ANTONIO CRUZ JIMENEZ
- DR. JOSE LUIS CARDOSO CORTES
- DR. GERARDO GARCIA NAUMIS
- DR. ALEJANDRO KUNOLD BELLO



VICTOR GUADALUPE IBARRA SIERRA
ALUMNO

Bajo la Presidencia del primero y con carácter de Secretario el último, se reunieron a la presentación de la Disertación Pública cuya denominación aparece al margen, para la obtención del grado de:

DOCTOR EN CIENCIAS (FISICA)

DE: VICTOR GUADALUPE IBARRA SIERRA

y de acuerdo con el artículo 78 fracción IV del Reglamento de Estudios Superiores de la Universidad Autónoma Metropolitana, los miembros del jurado resolvieron:

aprobar

Acto continuo, el presidente del jurado comunicó al interesado el resultado de la evaluación y, en caso aprobatorio, le fue tomada la protesta.

REVISÓ

LIC. JULIO CESAR DE LARA ISASSI
DIRECTOR DE SISTEMAS ESCOLARES

DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE CBI

DR. JESUS ALBERTO OCHOA TAPIA

PRESIDENTE

DR. SALVADOR ANTONIO CRUZ JIMENEZ

VOCAL

DR. JOSE LUIS CARDOSO CORTES

VOCAL

DR. GERARDO GARCIA NAUMIS

SECRETARIO

DR. ALEJANDRO KUNOLD BELLO