

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA



CORRIENTES PERSISTENTES DE CARGA Y DE ESPÍN USANDO LA  
TÉCNICA DE LAS FUNCIONES DE GREEN EN EL EQUILIBRIO.

Trabajo Especial de Grado presentado por  
Judith Cartagena  
ante la Facultad de Ciencias de la  
Ilustre Universidad Central de Venezuela  
como requisito parcial para optar al título  
de: **Licenciada en Física**  
Con la tutoría de: Dr. David Verrilli  
Dr. Nelson Bolívar

Agosto-2016  
Caracas-Venezuela

*Escuela de Física*





## VEREDICTO

Quienes suscriben, miembros del Jurado designado por el Consejo de la Escuela de Física de la Facultad de Ciencias de la Universidad Central de Venezuela, para examinar el Trabajo Especial de Grado presentado por **Judith Cartagena**, Cédula de Identidad **V-18465632**, bajo el título "**Corrientes persistentes de carga y de espín usando la técnica de las funciones de Green en el equilibrio**", a los fines de cumplir con el requisito legal para optar al grado de **Licenciada en Física**, dejan constancia de lo siguiente:

1. Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del Jurado, éste fijó el día 4 de agosto de 2016, a Las 2:00 pm, para que el autor lo defendiera en forma pública, lo que éste hizo en la Sala de videoconferencias del Centro de Computación, mediante un resumen oral de su contenido, luego de lo cual respondió satisfactoriamente a las preguntas que le fueron formuladas por el jurado; todo ello conforme a los artículos 20, 21, 22, 25, 26 y 28 de la Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV vigente.
2. Finalizada la defensa pública del trabajo, el jurado decidió declararlo aprobado por considerar que se ajusta a lo dispuesto y exigido en la Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV vigente en sus artículos 1, 5 y 6.

Se levanta la presente acta a los 4 días del mes de agosto de 2016, dejándose también constancia de que, conforme a la normativa jurídica vigente, actuó como coordinador del jurado el tutor del Trabajo Especial de Grado Prof David Tony Verrilli Hernández.

Firma del jurado evaluador

Prof Hely Arnal Cordero  
V-6348782  
UCV

Prof Alberto José Bellorín  
V-8382750  
UCV

Prof David Tony Verrilli  
V-12952768  
UCV

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA



CORRIENTES PERSISTENTES DE CARGA Y DE ESPÍN USANDO LA  
TÉCNICA DE LAS FUNCIONES DE GREEN EN EL EQUILIBRIO.

Trabajo Especial de Grado presentado por  
Judith Cartagena  
ante la Facultad de Ciencias de la  
Ilustre Universidad Central de Venezuela  
como requisito parcial para optar al título  
de: **Licenciada en Física**  
Con la tutoría de: Dr. David Verrilli  
Dr. Nelson Bolivar

Agosto-2016  
Caracas-Venezuela



19 de octubre de 2016

Consejo de la Escuela de Física  
Facultad de Ciencias  
Universidad Central de Venezuela

Estimados miembros del Consejo de Escuela

Reciban un cordial saludo. Conforme a lo establecido en el artículo 13 de la “Normativa de Trabajo Especial de Grado de la Licenciatura en Física de la Facultad de Ciencias de la UCV” les remitimos tres ejemplares de la monografía de TEG de la estudiante **Judith Cartagena**, CI: **18.465.632**, titulado **CORRIENTES PERSISTENTES DE CARGA Y DE ESPÍN USANDO LA TÉCNICA DE LAS FUNCIONES DE GREEN EN EL EQUILIBRIO.**, los cuales hemos revisado y consideramos listos para la evaluación por parte de un jurado.

Agradeciendo la consideración que sirvan prestar a la presente, nos despedimos atentamente,

Dr. David Verrilli  
12.952.768  
Tutor  
UCV

Dr. Nelson Bolivar  
13.568.312  
Tutor  
UCV



Página libre



## Agradecimientos

Inicialmente quisiera agradecer a mi madre Vicenta Cartagena, a mi padre Oscar Cartagena, a mi hermana Mabel Cartagena y su esposo Javier Gil así como también a mis sobrinos Diego Mendez y Santiago Gil por sus consejos y permanente apoyo durante toda mi carrera. A mi esposo Eduardo Romero quien ha sido y será mi guía de vida, gracias por tu gran ayuda y tus constantes palabras de aliento. Y por último gracias a mis tutores David Verrilli y Nelson Bolivar que contribuyeron en la realización de este trabajo especial de grado.



## RESUMEN

Este trabajo especial de grado se fundamenta en el cálculo de las corrientes persistentes de carga y espín para un anillo mesoscópico de  $N$  sitios atómicos sujeto a un flujo de Aharonov-Bohm, interacción a primeros vecinos e interacciones espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus. Para esto se implementó el formalismo de las funciones de Green-Keldysh y el método de la ecuación de movimiento. Obteniéndose una generalización para los sistemas de ecuaciones de movimiento para un anillo general de  $N$  sitios atómicos y resultados numéricos para las corrientes persistentes de un anillo conformado por 20 sitios atómicos.



# Índice general

<b>Lista de figuras</b>	<b>13</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>15</b>
<b>2. Antecedente</b>	<b>19</b>
<b>3. Marco Teórico</b>	<b>25</b>
3.1. Sistemas mesoscópicos . . . . .	25
3.1.1. Semiconductores . . . . .	26
3.2. Efecto Aharanov-Bohm . . . . .	26
3.2.1. Descripción fenomenológica . . . . .	27
3.3. Interacción espín-órbita . . . . .	29
3.3.1. ¿Qué es el espín? . . . . .	29
3.3.2. Interacción espín-órbita atómico . . . . .	31
3.3.3. Interacción espín-órbita en la materia . . . . .	32
3.4. Corrientes persistentes . . . . .	35
3.4.1. Corrientes persistentes de carga . . . . .	35
3.4.2. Corrientes persistentes de espín . . . . .	36
3.5. Cuantización . . . . .	37
3.5.1. Segunda cuantización . . . . .	37
3.5.2. Hamiltoniano tight-binding . . . . .	38
3.5.3. Operador evolución . . . . .	40
3.6. Representaciones . . . . .	41
3.6.1. Marco de Schrödinger . . . . .	41
3.6.2. Marco de Heisenberg . . . . .	42
3.6.3. Marco de interacción . . . . .	43
3.7. Funciones de Green . . . . .	44
3.7.1. Funciones de Green fuera del equilibrio . . . . .	45
3.8. Metodología Implementada . . . . .	48
<b>4. Desarrollo del trabajo</b>	<b>51</b>
4.1. Operador densidad de corriente de carga y de espín . . . . .	51

---

4.2.	Funciones de Green-Keldysh y la ecuación de movimiento . . . . .	54
4.3.	Generalización del sistema de ecuaciones de movimiento . . . . .	59
4.4.	Densidad de corriente de carga analítica para diez sitios atómicos . . . . .	61
4.5.	Densidades de corriente para un anillo de veinte sitios atómicos . . . . .	65
4.6.	Corrientes persistentes para un anillo de veinte sitios atómicos . . . . .	70
<b>5.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>75</b>
<b>A.</b>	<b>Apéndice</b>	<b>77</b>
A.1.	Operador densidad de corriente de carga y de espín . . . . .	78
A.1.1.	Hamiltoniano en forma matricial . . . . .	78
A.1.2.	Cálculo del conmutador (4.8) . . . . .	79
A.1.3.	Cálculo del anticonmutador (4.10) . . . . .	80
A.2.	Funciones de Green-Keldysh y la ecuación de movimiento . . . . .	83
A.3.	Generalización del sistema de ecuaciones de movimiento . . . . .	85
A.3.1.	Sistema compuesto por dos sitios atómicos . . . . .	85
A.3.2.	Sistema compuesto por tres sitios atómicos . . . . .	87
A.4.	Densidad de corriente de carga analítica para diez sitios atómicos . . . . .	90
A.4.1.	Función de Green $G_{n+1,n}$ . . . . .	90
A.4.2.	Función de Green $G_{n,n+1}$ . . . . .	92

# Índice de figuras

2.1.	Anillo mesoscópico. . . . .	19
2.2.	Densidad de corriente persistente de carga en función de la energía para un anillo de 20 sitios con $\phi = \frac{\phi_0}{4}$ , donde (a) $\alpha = \beta = 0$ , (b) $\alpha = 0,2$ y $\beta = 0$ (c) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,2$ . . . . .	23
2.3.	Corriente persistente de carga en función del flujo $\phi$ para un anillo de 60 sitios, donde (a) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (b) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,3$ (c) $\alpha = 0 = \beta = 0,3$ . Con $\mu = 0$ . . . . .	23
2.4.	Densidad de corriente persistente de espín en función de la energía para un anillo de 16 sitios con $\phi = \frac{\phi_0}{4}$ , donde (a) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (b) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,3$ (c) $\alpha = \beta = 0,3$ . . . . .	24
3.1.	Experimento de interferencia de Aharanov Bohm. . . . .	28
3.2.	Momento angular total. . . . .	32
3.3.	Asimetría de inversión de bulto . . . . .	34
3.4.	Blenda de Zinc. . . . .	34
3.5.	Corriente de carga. . . . .	36
3.6.	Corriente de espín. . . . .	37
4.1.	Sistema de dos sitios atómicos. . . . .	59
4.2.	Sistema de tres sitios. . . . .	60
4.3.	Densidad de corriente persistente de carga en función de la energía para un anillo de 20 sitios con $\phi = 0,25$ , donde (a) $\alpha = \beta = 0$ , (b) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (c) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,3$ , (d) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0,3$ . . . . .	66
4.4.	Densidad de corriente persistente de espín en función de la energía para un anillo de 20 sitios con $\phi = 0,25$ , donde (a) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (b) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,3$ , (c) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0,3$ . . . . .	67
4.5.	Corriente persistente de carga en función del flujo para un anillo de 20 sitios, donde (a) $\alpha = \beta = 0$ , (b) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (c) $\alpha = 0$ y $\beta = 0,3$ (d) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0,3$ . . . . .	71
4.6.	Corriente persistente de espín en función del flujo para un anillo de 20 sitios, donde (a) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (b) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0$ , (c) $\alpha = 0,3$ y $\beta = 0,3$ . . . . .	71

---



# Capítulo 1

## Introducción

En la actualidad se ha incrementado significativamente el estudio, síntesis y caracterización de materiales semiconductores, gracias a que los mismos presentan diversas aplicaciones especialmente en las áreas de computación y sensores. Esto es consecuencia de que estos materiales en el régimen de bajas temperaturas, son sólidos covalentes capaces de comportarse como materiales aislantes, mientras que el régimen de temperaturas moderadas estos adquieren un comportamiento de conductor de manera tal que su conductividad aumenta considerablemente conforme va aumentando la temperatura. Las propiedades de estos materiales pueden optimizarse con el fin de crear dispositivos electrónicos más eficientes y de menor costo energético siendo esta una de las principales aplicaciones de la física del estado sólido más atractivas en estos momentos.

Otra área de particular interés en la física del estado sólido, está relacionada con el efecto de los campos magnéticos sobre materiales semiconductores. Este interés proviene del hecho que el comportamiento de los electrones presentes en un material semiconductor se ve sustancialmente modificado como consecuencia de la interacción de estos con un campo electromagnético externo aplicado sobre el material.

Debido a que los electrones presentes en el material sufren una modificación en su trayectoria, este efecto puede ser descrito desde el punto de vista clásico empleando la ecuación de Lorentz, la cual permite describir la fuerza que siente un electrón en movimiento cuando este se encuentra bajo la influencia de un campo electromagnético externo.

Sin embargo, con el pasar de los años los físicos notaron que muchos fenómenos relacionados con la interacción de estos materiales con campos electromagnéticos no podían ser explicados empleando el electromagnetismo clásico, un típico fenómeno de esta clase se denomina efecto Hall cuántico y solo puede ser explicado empleando la mecánica cuántica (electrodinámica cuántica o mecánica cuántica relativista) [1], [2].

Desde el punto de vista de la mecánica cuántica los potenciales son los principales protagonistas en lugar de los campos, lo cual es contradictorio con el formalismo clásico,

---

ya que estos son un mero artificio matemático para resolver un problema en particular, siendo en sí los campos las cantidades físicas que contienen toda la información del sistema. en el caso cuántico los potenciales contienen mayor información del sistema que los mismos campos formados por ellos, lo cual los convierte en una cantidad física importante a este nivel.

Esta característica de naturaleza cuántica, fue descrita por primera vez por Werner Ehrenberg y Raymond Siday en 1949 pero recibe su nombre por los físicos Yakir Aharonov y David Bohm quienes descubrieron este efecto de forma independiente en 1959 [3], llegando a la conclusión de que un electrón expuesto a una región con potencial vector no nulo y un campo magnético nulo sufrirá una dispersión en su trayectoria presentando una diferencia de fase en su patrón de propagación en comparación con su patrón original. Este fenómeno de dispersión producido sobre la propagación de un electrón a causa de la presencia de un potencial vector se conoce como el efecto Aharonov-Bohm.

El efecto mencionado anteriormente es causante de la creación de corrientes perpetuas sobre un material. Esto fue inicialmente estudiado en los años sesenta, pero no fue hasta 1983 cuando Büttiker expuso sus resultados sobre este tema. Concluyendo que un material mesoscópico con forma de anillo bajo la influencia de un flujo magnético Aharonov-Bohm sufre la creación de un tipo de corrientes que no decaen en el tiempo ya que las mismas se mantienen circulando perpetuamente en el material, denominadas corrientes persistentes [4].

Este efecto de corrientes perpetuas ha llamado notablemente la atención de los investigadores en tiempos recientes, ya que en estos materiales semiconductores se pueden presentar dos tipos de corrientes persistentes las cuales son generadas debido a la aplicación de un flujo de Aharonov-Bohm sobre estos. Siendo la primera denominada corriente persistente de carga y la segunda denominada corriente persistente de espín; esta última aparece cuando están presente efectos de espín-órbita en el material.

Este tipo de corriente persistente de espín es de gran relevancia para los investigadores actuales en el área de la física del estado sólido, ya que los materiales con estas características pueden ser empleados para construir dispositivos que funcionen en base a los espines de esta corriente. Siendo este último fenómeno fundamental para la construcción de computadoras cuánticas, las cuales prometen ser más veloces que las computadoras actuales basadas en semiconductores convencionales.

En los materiales semiconductores se observa un efecto interesante que se encuentra relacionado con las corrientes persistentes de espín presente en estos, el cual se denomina interacción espín-órbita. Esta es ocasionada por el momento magnético intrínseco del material y su interacción con el momento angular orbital del electrón, los cuales generan distintos efectos en el sólido siendo uno de ellos la corriente persistente de espín.

---

Este efecto espín-órbita, puede manifestarse de dos maneras en un material, siendo la primera un efecto ocasionado por la presencia de un campo eléctrico externo aplicado sobre la superficie del material generándose una asimetría de inversión sobre la superficie del mismo, debido a la separación de cargas en la superficie del material la cual es denominada interacción espín-órbita tipo Rashba. El segundo tipo de interacción espín-órbita que se puede encontrar en estos tipos de sistemas es denominada interacción espín-órbita tipo Dresselhaus, la cual es ocasionada debido a una asimetría de inversión de bulto (bulk) presente en el material.

Existen diversos trabajos teóricos en el ámbito científico donde se describen y discuten las características asociadas a las corrientes persistentes cuando estas se encuentran presentes en anillos sujetos a una interacción espín-órbita tipo Rashba o Dresselhaus, cuya finalidad es tener una perspectiva más clara del papel que juegan estas interacciones en la descripción de las corrientes persistentes de carga y las corrientes persistentes de espín en sistemas mesoscópicos semiconductores con forma de anillo.

La determinación de las corrientes persistentes de carga y de espín para un anillo mesoscópico se puede hacer a través de la evaluación de los autovalores y autovectores de el Hamiltoniano asociado al sistema. Sin embargo esta técnica mencionada previamente puede ser un poco tediosa y poco práctica ya que el método se hace fuertemente divergente a medida que el número de átomos aumenta en el sistema.

En los últimos años se han tratado de desarrollar diversas técnicas para determinar las corrientes persistentes de distintos sistemas, uno de los trabajos basados en este tópico, fue realizado en el año 2014 por Maiti y colaboradores [5] en donde ellos sugirieron que las corrientes persistentes de un anillo pueden ser obtenidas mediante la implementación de la técnica de las funciones de Green. Estando estas últimas intrínsecamente relacionadas con los valores medios de las densidades de corriente y por ende con la corrientes persistentes del sistema.

Para el caso en particular de la teoría de muchos cuerpos las funciones de Green son una herramienta muy útil, ya que las mismas son funciones de correlación, en la que estas últimas se refieren a las correlaciones existentes entre los operadores de campo o entre los operadores de creación y aniquilación.

Este trabajo especial de grado tiene como principal propósito de estudio el análisis y determinación de las corrientes persistentes de carga y de espín para sistemas mesoscópicos cerrados compuestos por  $N$  sitios atómicos. Para la determinación de estas corrientes se empleo como modelo de referencia el trabajo realizado por Maiti y colaboradores en el año 2014 [5], donde se estudio el sistema mencionado utilizando un nuevo enfoque para el cálculo y determinación de las corrientes persistentes presentes en un anillo mesoscópico el cual se encuentra sujeto a un flujo magnético de Aharonov-Bohm e interacciones espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus, empleando el formalismo de las funciones de Green.

---

En este trabajo especial de grado se tomó como punto de partida el Hamiltoniano tight-binding apropiadamente simetrizado empleado por Maiti y colaboradores en [5], con la particularidad de que el método empleado en este trabajo se fundamenta en el uso de las funciones de Green-Keldysh en el límite del equilibrio termodinámico y el método de la ecuación de movimiento como herramientas para el cálculo de las diferentes funciones de Green presentes en los valores medios de las densidades de corrientes persistentes de carga y espín para un sistema cerrado compuesto por  $N$  sitios atómicos con interacción a primeros vecinos e interacción espín-órbita.

En particular en este trabajo especial de grado se muestran los resultados algebraicos para la generalización de las ecuaciones de movimiento para un anillo compuesto para  $N$  sitios atómicos, así como también la densidad de corriente de carga para un anillo compuesto por diez sitios atómicos y los resultados numéricos para las densidades de corrientes y las corrientes persistentes de carga y espín para un anillo compuesto por veinte sitios atómicos que se encuentra en presencia o no de interacciones espín-órbita.

---

# Capítulo 2

## Antecedente

Maiti y colaboradores [5] en 2014 estudiaron un nuevo camino para el cálculo de las corrientes persistentes presentes en un anillo mesoscópico sujeto a un flujo magnético de Aharonov-Bohm e interacciones espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus (ver figura 2.1), empleando el formalismo de las funciones de Green.

El estudio se basó en presentar la evaluación directa de los autovalores y autoestados del Hamiltoniano del sistema para la determinación de las corrientes persistentes del mismo. Entre los otros aspectos estudiados, están el papel que juegan el flujo magnético de Aharonov-Bohm y la interacción espín-órbita en la aparición de las corrientes persistentes de cargas y de espín en anillos cuánticos.

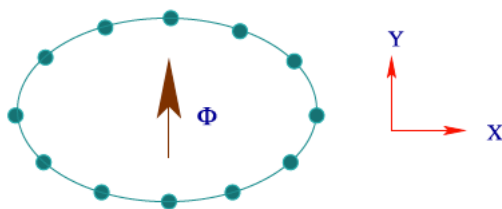


Figura 2.1: Anillo mesoscópico [5].

---

Con la finalidad de estudiar este sistema Maiti [5] usó como modelo de partida un Hamiltoniano tight-binding en segunda cuantización escrito en la representación de los sitios del anillo el cual se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{RD} = & \sum_n \mathbf{c}_n^\dagger \boldsymbol{\epsilon}_n \mathbf{c}_n + \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{t} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\
& - \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\boldsymbol{\sigma}_x) \boldsymbol{\alpha} \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\
& - \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\boldsymbol{\sigma}_y) \boldsymbol{\alpha} \sin \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\
& + \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\boldsymbol{\sigma}_y) \boldsymbol{\beta} \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\
& + \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\boldsymbol{\sigma}_x) \boldsymbol{\beta} \sin \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c).
\end{aligned} \tag{2.1}$$

donde  $\theta = \frac{2\pi\phi}{N}$  es la fase asociada al salto de un electrón al sitio de sus primeros vecinos debido a presencia de un flujo  $\phi$  de Aharonov-Bohm y  $\varphi_{n,n+1} = \frac{\varphi_n + \varphi_{n+1}}{2}$  donde  $\varphi_n = \frac{2\pi(n-1)}{N}$  estando este último término relacionado con las condiciones periódicas del anillo.

Los otros factores en el Hamiltoniano están definidos a través de los siguientes operadores matriciales como:

$$\mathbf{c}_n^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}_n = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\epsilon}_n = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\epsilon}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \boldsymbol{\epsilon}_{n\downarrow} \end{pmatrix}, \tag{2.2}$$

$$\mathbf{t} = t \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\beta} = \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix}, \tag{2.3}$$

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.4}$$

donde  $\mathbf{c}_n^\dagger$  y  $\mathbf{c}_n$  son los operadores de creación y aniquilación respectivamente, para un electrón con espín  $\sigma$  en el  $n$ -ésimo sitio. La integral de salto a primeros vecinos esta descrita por el parámetro  $\mathbf{t}$  y  $\boldsymbol{\epsilon}_{n\sigma}$  es la energía de una impureza localizada (átomo diferente al resto en el material) en el sitio  $n$  del anillo con espín  $\sigma$ . Los factores  $\boldsymbol{\alpha}$  y  $\boldsymbol{\beta}$  corresponden a la magnitud de los campos de interacción espín órbita de Rashba y Dresselhaus, respectivamente, y  $\boldsymbol{\sigma}_x$ ,  $\boldsymbol{\sigma}_y$  y  $\boldsymbol{\sigma}_z$  son las matrices de Pauli.

Maiti y colaboradores calcularon el operador densidad de corriente de carga y de espín para un anillo sujeto a la interacción espín-órbita Rashba y Dresselhaus usando el Hamiltoniano tight-binding mencionado anteriormente y el operador posición con el fin de encontrar el operador velocidad en el marco de Heisenberg obteniendo:

$$\mathbf{J}_c = \frac{2\pi i e}{N} \sum_n \left( \mathbf{c}_n^\dagger \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \mathbf{c}_{n+1} e^{-i\theta} - \mathbf{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \mathbf{c}_n e^{i\theta} \right). \quad (2.5)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_s^z &= \frac{\pi i}{N} \sum_n \left( \mathbf{c}_n^\dagger \sigma_z \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \mathbf{c}_{n+1} e^{-i\theta} - \mathbf{c}_{n+1}^\dagger \sigma_z \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \mathbf{c}_n e^{i\theta} \right) \\ &+ \frac{\pi i}{N} \sum_n \left( \mathbf{c}_n^\dagger \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \sigma_z \mathbf{c}_{n+1} e^{-i\theta} - \mathbf{c}_{n+1}^\dagger \mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} \sigma_z \mathbf{c}_n e^{i\theta} \right). \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde los diferentes elementos de la matriz  $\mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1}$  son:

$$\mathbf{t}_\varphi^{\dagger n, n+1} = \begin{pmatrix} t & -i\alpha e^{-i\varphi_{n, n+1}} + \beta e^{i\varphi_{n, n+1}} \\ -i\alpha e^{i\varphi_{n, n+1}} - \beta e^{-i\varphi_{n, n+1}} & t \end{pmatrix}. \quad (2.7)$$

Posteriormente usaron una definición particular para la función de Green del sistema con la finalidad de escribir las corrientes persistentes del anillo en función de estas:

$$\mathbf{G}_{ij}^r = \sum_m \frac{a_i^m a_j^{m*}}{E - \varepsilon_m + i\eta}. \quad (2.8)$$

donde  $\mathbf{G}_{ij}^r$  es la función de Green retardada propuesta en la literatura, con el límite  $\eta \rightarrow 0^+$  y  $\mathbf{G}_{ij}^a = (\mathbf{G}_{ij}^r)^\dagger$  es la función de Green avanzada con el límite  $\eta \rightarrow 0^+$  usando estas definiciones e intercambiando los índices  $j$  e  $i$  obtuvieron:

$$\mathbf{G}_{ji}^r - \mathbf{G}_{ji}^a = -2i\pi \sum_m a_i^{m*} a_j^m \delta(E - \varepsilon_m). \quad (2.9)$$

Una vez hecho esto ellos obtuvieron los valores medios de las densidades de corrientes de carga y de espín en términos de las funciones de Green descritas anteriormente y los resultados se muestran a continuación.

El valor medio de la corriente de carga en el anillo viene dada por:

$$\begin{aligned}
J_c(E) = & -\frac{e}{N} \sum_n \{t(\mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\uparrow}^a)e^{-i\theta} - t(\mathbf{G}_{n\uparrow,n+1\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\uparrow}^a)e^{i\theta}\} \\
& -\frac{e}{N} \sum_n \{t(\mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\downarrow}^a)e^{-i\theta} - t(\mathbf{G}_{n\downarrow,n+1\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n\downarrow,n+1\downarrow}^a)e^{i\theta}\} \\
& -\frac{e}{N} \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \times (\mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\uparrow}^a)e^{-i\theta} \\
& -\frac{e}{N} \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \times (\mathbf{G}_{n\uparrow,n+1\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n\uparrow,n+1\downarrow}^a)e^{i\theta} \\
& -\frac{e}{N} \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \times (\mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\downarrow}^a)e^{-i\theta} \\
& -\frac{e}{N} \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \times (\mathbf{G}_{n\downarrow,n+1\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n\downarrow,n+1\uparrow}^a)e^{i\theta}.
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Y finalmente el valor medio de la corriente de espín de anillo calculada únicamente en la dirección  $\hat{z}$  viene dada por:

$$\begin{aligned}
J_s(E) = & -\frac{1}{N} \sum_n \{t(\mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\uparrow,n\uparrow}^a)e^{-i\theta} - t(\mathbf{G}_{n\uparrow,n+1\uparrow}^r - \mathbf{G}_{n\uparrow,n+1\uparrow}^a)e^{i\theta}\} \\
& -\frac{1}{N} \sum_n \{t(\mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n+1\downarrow,n\downarrow}^a)e^{-i\theta} - t(\mathbf{G}_{n\downarrow,n\downarrow}^r - \mathbf{G}_{n\downarrow,n+1\downarrow}^a)e^{i\theta}\}.
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Seguido de esto Maiti y colaboradores en [5] presentaron sus resultados numéricos enfocándose principalmente en el caso libre de impurezas haciendo  $\epsilon_{n\uparrow} = \epsilon_{n\downarrow} = 0$  para todos los sitios  $n$  del anillo. En la figura 2.2 se muestran las densidades de corriente de carga para un anillo mesoscópico con veinte sitios cuánticos, en esta se observa que el número de picos incrementa cuando se incorporan efectos espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus siendo estos picos los autovalores asociados al anillo cuántico estudiado.

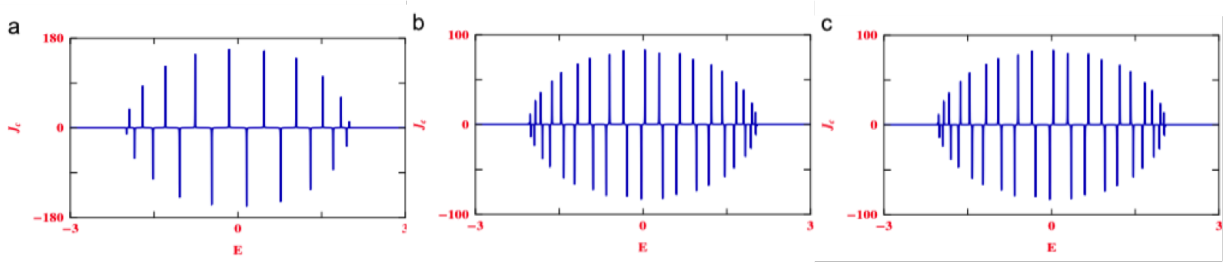


Figura 2.2: Densidad de corriente persistente de carga en función de la energía para un anillo de 20 sitios con  $\phi = \frac{\phi_0}{4}$ , donde (a)  $\alpha = \beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0,2$  y  $\beta = 0$  (c)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,2$  [5].

Por otra parte en la figura 2.3 se muestra la corriente de carga para un anillo de sesenta sitios con interacción espín-órbita en función del flujo de Aharonov-Bohm aplicado sobre el anillo el cual presenta un comportamiento senosoidal donde el mayor valor de la corriente de carga se encuentra para los flujos de 0.25 y -0.25 respectivamente, observándose que para el caso particular del anillo sujeto a ambas interacciones espín-órbita la densidad de corriente modifica su período de oscilación generándose una menor cantidad de oscilaciones en comparación a los caso en el cual solo un tipo de interacción espín-órbita esta presente en el anillo.

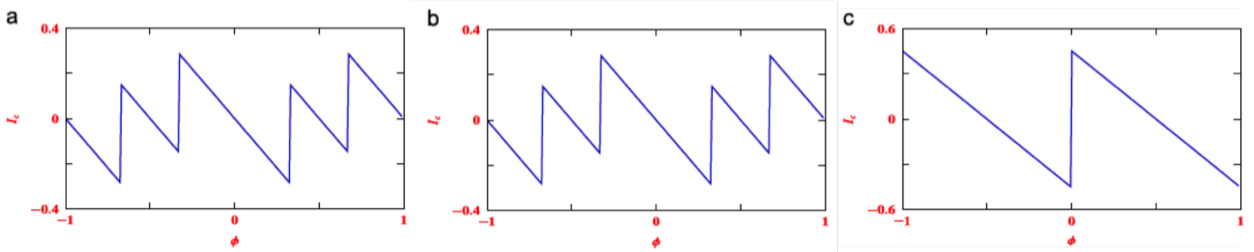


Figura 2.3: Corriente persistente de carga en función del flujo  $\phi$  para un anillo de 60 sitios, donde (a)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,3$  (c)  $\alpha = 0 = \beta = 0,3$ . Con  $\mu = 0$  [5].

Uno de los aspectos más importantes de este trabajo se fundamenta en las densidades de corriente de espín, estas se muestran en la figura 2.4. En dicha figura se puede observar que al igual que en la densidad de corriente de carga se pueden ver distintos picos asociados a los autovalores del anillo pero con la ligera sutileza de que las densidades de corriente de espín con interacción espín-órbita tipo Rashba son opuestas a las densidades de corriente de espín con interacción espín-órbita del tipo Dresselhaus. Esto sugiere que la densidad de corriente de espín con ambas interacciones espín-órbita debería presentar una densidad

de corriente muy próxima a cero como se muestra en los resultados expuestos por Maiti y colaboradores [5].

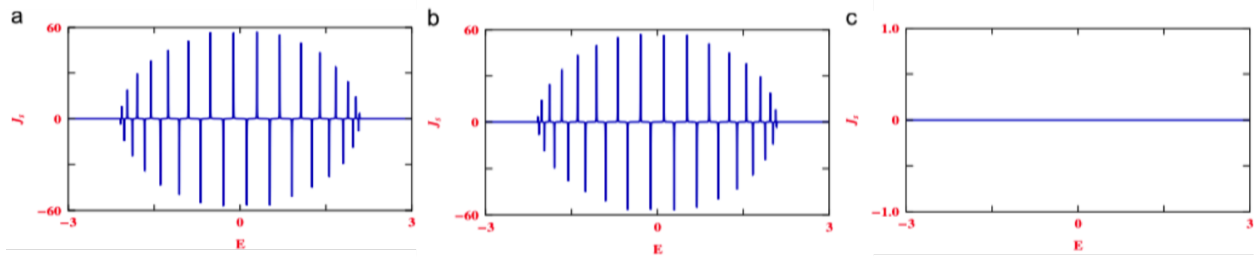


Figura 2.4: Densidad de corriente persistente de espín en función de la energía para un anillo de 16 sitios con  $\phi = \frac{\phi_0}{4}$ , donde (a)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,3$  (c)  $\alpha = \beta = 0,3$  [5].

Desde esta perspectiva se puede intuir que es posible determinar cual es el factor del acoplamiento espín-órbita del tipo Dresselhaus en un material al inducir un acoplamiento espín-órbita del tipo Rashba en el mismo de manera que la corriente de espín en el cristal sea cero. Esto se puede lograr tras la aplicación de un campo eléctrico externo sobre la superficie del cristal.

# Capítulo 3

## Marco Teórico

### 3.1. Sistemas mesoscópicos

Los sistemas mesoscópicos son sistemas más grandes que un átomo pero más pequeños que un objeto macroscópico. Estos sistemas son hasta cinco ordenes de magnitud más pequeños que una hebra de cabello, es decir el tamaño de estos sistemas se encuentra en el orden de los nanómetros, es por ello que los materiales compuestos por sistemas mesoscópicos son conocidos como nanoestructuras [6].

La física de este tipo de sistemas es descrita de manera diferente comparada con los sistemas de mayor escala (macroscópicos), debido a que en el caso de los sistemas mesoscópicos el comportamiento cuántico no puede ser ignorado. Esto como consecuencia directa de que las autoenergías en el material son discretas, es por ello que se requiere de la mecánica cuántica y sus herramientas para describir adecuadamente el comportamiento de este sistema bajo las diferentes condiciones a las que este se encuentre sometido.

Un semiconductor conformado por un número discreto de átomos con un tamaño de 0.1 a 100nm es denominado una nanoestructura. Los sitios en donde se encuentran estos átomos se les denominan sitios atómicos, el movimiento de los electrones en el semiconductor está limitado (confinado) espacialmente a las tres direcciones que conforman la banda de conducción del material. Esta última en sí es una característica peculiar y muy útil de estas estructuras debido a que en un sitio atómico la energía se encuentra cuantizada, es decir esta presenta un espectro discreto, característica que puede ser medida en el laboratorio abriendo la puerta a distintos métodos de caracterización, manipulación y creación de semiconductores con diferentes propiedades. Siendo las nanoestructuras con forma de anillo un ejemplo relativamente simple para un semiconductor [7].

---

### 3.1.1. Semiconductores

En la actualidad los semiconductores son de gran interés puesto que su comportamiento es la base para la fabricación y producción de muchos dispositivos electrónicos. Los semiconductores son sólidos covalentes que pueden ser considerados como aislantes puesto que su banda de valencia se encuentra completamente llena y la banda de conducción completamente vacía, todo esto ocurre a una temperatura de cero absoluto.

La excitación térmica de los electrones desde la banda de valencia a la banda de conducción ocurre para un número significativo de electrones a temperatura ambiente, sin embargo esta última depende del número de electrones de valencia en el nivel de Fermi. Adicional a esto, la conductividad de un semiconductor depende de la temperatura a la que se encuentre expuesto es por ello, que esta aumenta rápidamente conforme aumenta la temperatura en el material.

La conductividad de los semiconductores que resulta de la excitación térmica, se denomina conductividad intrínseca. Otra forma de aumentar la conductividad es agregando impurezas al semiconductor, es decir, reemplazando algunos átomos del semiconductor con átomos de otro elemento que tengan aproximadamente el mismo tamaño pero valencia diferente. La conductividad resultante en este caso se denomina conductividad extrínseca [8].

Existen dos tipos de semiconductores, el primer tipo de semiconductor es llamado semiconductor tipo n (negativo) como consecuencia de que este posee un exceso de electrones libres debido a la presencia de una impureza con exceso de electrones dentro del material a la que se le conoce como impureza donante. El segundo tipo de semiconductor es denominado semiconductor tipo p (positivo) ya que este posee impurezas con deficiencia de electrones libres, a esta impureza se le denomina impureza aceptora de electrones.

## 3.2. Efecto Aharonov-Bohm

Desde los inicios del electromagnetismo los físicos notaron que las cargas de un determinado material pueden circular mediante la aplicación de un campo eléctrico o magnético sobre este. En este capítulo se discutirá el efecto cuántico generado por la presencia de un campo electromagnético sobre el estado y/o trayectoria de un electrón en un material, este efecto es llamado efecto Aharonov-Bohm. Descrito por primera vez por Werner Ehrenberg y Raymond Siday en 1949 y que recibe su nombre por los físicos Yakir Aharonov y David Bohm que descubrieron este efecto de forma independiente en 1959.

---

### 3.2.1. Descripción fenomenológica

Clásicamente para describir la interacción entre partículas cargadas y un campo electromagnético basta con conocer la magnitud de los campos  $\vec{E}$  y  $\vec{B}$  en cada punto del espacio-tiempo y a partir de la información proporcionada por estos campos es posible predecir el movimiento de la misma empleando la fuerza de Lorentz [1]:

$$\vec{F} = e(\vec{E} + \frac{1}{c}\vec{V} \times \vec{B}). \quad (3.1)$$

En electrodinámica clásica el potencial vector y el potencial escalar fueron inicialmente introducidos como una herramienta matemática para el cálculo de los campos. Por otra parte también se puede destacar que estos potenciales son necesarios para obtener la formulación moderna de la electrodinámica clásica, sin embargo, las ecuaciones de movimiento fundamentales pueden ser siempre expresadas exclusivamente en términos de los campos. Sin embargo la mecánica cuántica requiere de los potenciales para escribir el Hamiltoniano del sistema y como resultado inmediato los potenciales no pueden ser eliminados de las ecuaciones, ya que estos son parte fundamental de las mismas. Estas ecuaciones y los potenciales presentes en estas son invariantes de calibre; lo que pareciera indicar que también en mecánica cuántica los potenciales en sí no tienen una relevancia significativa, no obstante Y. Aharonov y D. Bohm han demostrado que esto no es cierto [3].

Supongamos que una partícula cargada se traslada dentro de una jaula de Faraday conectada por un generador externo causando la generación de un potencial oscilante en el tiempo dentro de la jaula. Este potencial tiene un gradiente nulo ya que el campo eléctrico en el interior de la jaula de Faraday es cero [3]. Por lo que al Hamiltoniano mecánico cuántico se le debe agregar un término asociado al potencial  $V(x, t)$  obteniendo que el Hamiltoniano del electrón dentro de la jaula viene dado por  $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V(t)$ , donde  $\mathbf{H}_0$  es el Hamiltoniano del sistema cuando el generador no esta funcionando y  $V(t) = e\phi(t)$ . Es por esto que la solución para el Hamiltoniano libre puede ser escrita como  $\psi_0(x, t)$  y a partir de este, se puede obtener que la solución para  $\mathbf{H}$  viene dada por:

$$\psi = \psi_0 e^{-iS/\hbar}, \quad S = \int V(t) dt. \quad (3.2)$$

Esta solución viene del hecho que:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( i\hbar \frac{\partial \psi_0}{\partial t} + \psi_0 \frac{\partial S}{\partial t} \right) e^{-iS/\hbar} = (\mathbf{H}_0 + V(t)) \psi = \mathbf{H}\psi. \quad (3.3)$$

Como se puede notar esta nueva solución difiere respecto a la solución libre por solo una fase global  $S$ , la cual es la integral del potencial presente en el sistema, lo que en principio no llevaría a ningún cambio en el resultado físico. Un caso análogo a este es que

en la región en la cual se desplaza el electrón exista un potencial vector distinto de cero cuyo rotor es nulo, es decir, este no genera un campo magnético en la región en la cual se encuentra el electrón. La solución para este caso particular es análoga a la ecuación (3.2) con la sutil diferencia de que el Hamiltoniano del sistema viene dado por:

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \left( \vec{P} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2, \quad S = -\frac{e}{c} \int \vec{A} \cdot d\vec{x} = -\frac{e}{c} \phi_0, \quad (3.4)$$

siendo  $\phi_0$  el flujo total magnético presente en la región en la cual se desplaza el electrón.

Para ilustrar este efecto se puede considerar un haz de electrones el cual se divide y se encuentra en la presencia de un potencial vector  $\vec{A}$  como se muestra en la figura 3.1. Dicho potencial vector modifica la fase global  $S$  de cada electrón creando una diferencia de camino entre los electrones formándose un patrón de interferencia (ver ecuación 3.2) por lo cual el máximo principal de interferencia no se encuentra en el centro de la pantalla sino ligeramente desplazado. Este fenómeno resalta la importancia física de los potenciales en la mecánica cuántica ya que estos contienen mayor información que los mismos campos asociados a estos.

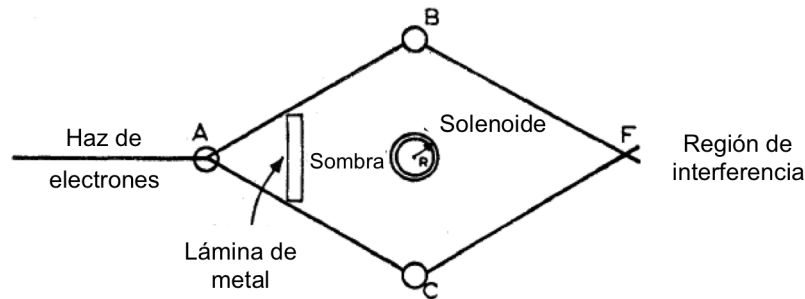


Figura 3.1: Experimento de interferencia de Aharonov-Bohm [3].

En la figura 3.1 se observa un haz de electrones viajando de izquierda a derecha el cual es dividido en dos en el punto A. Estos interactúan con el potencial vector de un solenoide el cual se encuentra ubicado entre los puntos B y C detrás de una lámina de metal, esta interacción provoca un patrón de interferencia en una pantalla ubicada en el punto F. La interacción que provoca el desfase entre los dos haces se le denomina efecto Aharonov-Bohm.

## 3.3. Interacción espín-órbita

### 3.3.1. ¿Qué es el espín?

Con la finalidad de definir en que consiste la interacción espín-órbita primero debemos definir una de las piezas fundamentales de esta interacción, la cual es el espín.

El espín del electrón fue descubierto experimentalmente por Stern y Gerlach en el año 1922 usando un haz de átomos de plata expuesto a un campo magnético externo. Debido a que la energía aplicada para la atomización de la plata sólida no era suficiente como para ionizar los átomos de plata libres en fase gaseosa, era de esperarse que el momento angular orbital total de dichos átomos fuese cero ( $l=0$ , configuración electrónica en el estado base), sin embargo, se encontró una inconsistencia en los resultados obtenidos experimentalmente con los resultados teóricos estimados [9].

El experimento de Stern y Gerlach consistió básicamente en la evaporación de plata sólida en un horno formando de esta manera un haz de átomos neutros de plata. Dicho haz fue colimado mediante el uso de un diafragma permitiendo que el haz de átomos neutros penetre a una región en la cual se encuentra un imán. La interacción de estos átomos con el campo magnético del imán produce un campo magnético interno de mayor intensidad en la dirección de  $\hat{k}$ , siendo esta la misma dirección del campo magnético externo aplicado por el imán sobre el haz. Posteriormente el haz se analiza en componentes según los distintos valores del momento dipolar magnético ( $\mu_z$ ), en donde los átomos deflectados por el campo magnético golpean una placa metálica sobre la cual dichos átomos condensan dejando así una traza visible que puede ser medida [8].

Sin embargo, de acuerdo a la teoría de Schrödinger, si los átomos presentan un momento angular orbital  $l$ , se esperaría que el haz se divida  $2l+1$  componentes. Suponiendo que el haz de átomos de plata se encontraba en su estado base  $l=0$ , experimentalmente es de esperarse una única mancha en la pantalla. Por otra parte si el haz de átomos de plata se encontraba en un estado excitado, en particular, el primer estado el cual para el átomo de plata es  $5p$  ( $l=1$ ). Experimentalmente es de esperarse observar tres manchas sobre la pantalla metálica. Sin embargo, el resultado obtenido fue que el haz se dividió en dos componentes distintas siendo esto totalmente inesperado.

En 1925 Goudsmit y Uhlenbeck postularon que, adicional a su momento angular orbital, el electrón posee un momento angular intrínseco el cual a diferencia del momento angular orbital no tenía nada que ver con los grados de libertad espacial. A este grado de libertad intrínseco se le dio el nombre de momento angular de espín. El espín es un concepto netamente mecánico cuántico ya que no posee un análogo clásico [9].

Aunque la mecánica cuántica de Schrödinger es completamente compatible con la existencia del espín del electrón esta no lo predice, por lo que el espín debe introducirse como un postulado adicional a la teoría de Schrödinger.

En 1929 Dirac desarrollo una teoría relativista de la mecánica cuántica haciendo uso de los mismos postulados de Schrödinger pero sustituyendo la ecuación de la energía por su forma relativista. Dirac en efecto demostró que un electrón debe tener un momento angular intrínseco de  $s = 1/2$ . Esto sin lugar a dudas fue un gran triunfo para la teoría de la relatividad ya que demostró que el espín está íntimamente relacionado con esta [8].

### Descripción del espín como operador y su conexión con las matrices de Pauli

Al igual que al momento angular orbital el momento angular de espín  $\mathbf{S}^1$  es considerado un operador, esto significa que sus tres componentes  $\mathbf{S}_x$ ,  $\mathbf{S}_y$  y  $\mathbf{S}_z$  son observables y por lo tanto estos operadores deben satisfacer relaciones de conmutación similares al momento angular orbital es decir:

$$[\mathbf{S}_x, \mathbf{S}_y] = i\hbar\mathbf{S}_z, \quad [\mathbf{S}_y, \mathbf{S}_z] = i\hbar\mathbf{S}_x, \quad [\mathbf{S}_z, \mathbf{S}_x] = i\hbar\mathbf{S}_y. \quad (3.5)$$

Adicionalmente los operadores de espín actúan sobre un nuevo espacio de Hilbert, el cual es llamado el “espacio de estado del espín”, en donde  $\mathbf{S}^2$  y  $\mathbf{S}_z$  forman un conjunto completo de observables que conmutan (C.C.O.C) satisfaciendo las siguientes relaciones:

$$\mathbf{S}^2|s, m\rangle = s(s+1)\hbar^2|s, m\rangle, \quad \mathbf{S}_z|s, m\rangle = m\hbar|s, m\rangle. \quad (3.6)$$

Cuando el espín del sistema es  $s = 1/2$  como por ejemplo un electrón libre, es conveniente introducir la matrices de Pauli,  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  y  $\sigma_z$ . Dichas matrices se relacionan con el operador de espín de la siguiente manera:

$$\vec{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}, \quad (3.7)$$

donde:

$$\vec{\sigma} = \sigma_x\hat{i} + \sigma_y\hat{j} + \sigma_z\hat{k}. \quad (3.8)$$

Para las matrices de Pauli se satisfacen las siguientes propiedades:

$$\sigma_i\sigma_i = \mathbb{1}, \quad [\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk}\sigma_k, \quad \sigma_i\sigma_j = \delta_{ij}\mathbb{1} + i\epsilon_{ijk}\sigma_k. \quad (3.9)$$

---

<sup>1</sup> En este Trabajo especial de grado los operadores están definidos en negritas y los vectores con flechas, por lo que un operador vectorial contiene ambos símbolos.

---

### 3.3.2. Interacción espín-órbita atómico

La interacción espín-órbita es un efecto relativista, el cual es generado debido a la interacción del momento magnético de espín y el campo magnético interno del átomo. Como consecuencia de que el campo magnético interno del átomo está intrínsecamente relacionado con el impulso angular orbital del electrón de ahí el nombre de espín-órbita.

Desde el marco de referencia en reposo del electrón el núcleo está orbitando alrededor de este, generando un campo magnético que interacciona con el momento magnético de espín del electrón.

La interacción espín-órbita es proporcional al producto escalar  $\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{S}}$ , es decir, sobre el electrón actúa un campo magnético interno y la orientación de este campo viene dada por el momento angular orbital ( $\vec{\mathbf{L}}$ ) del átomo en la cual dicho campo produce una proyección sobre el momento magnético de espín del electrón cuya orientación está determinada por el momento angular de espín ( $\vec{\mathbf{S}}$ ). Esta proyección provoca un acoplamiento entre  $\vec{\mathbf{L}}$  y  $\vec{\mathbf{S}}$  lo que trae como consecuencia que la orientación de uno dependa intrínsecamente del otro [8].

Bajo la presencia de la interacción espín-órbita  $\vec{\mathbf{L}}$  y  $\vec{\mathbf{S}}$  ya no son independientes (ver figura 3.3.2), debido a su acoplamiento estos deben moverse mutuamente de manera tal que su momento angular total  $\vec{\mathbf{J}}$  satisfaga la ley de conservación del momento angular ya que el sistema no se encuentra bajo la influencias de fuerzas externas en el que el Hamiltoniano del sistema es descrito por la magnitud del campo eléctrico aplicado y el producto escalar entre el operador de momento angular y operador momento de espín.

$$\mathbf{H} = -\frac{\mu_B}{\hbar m_e c^2} \left\langle \frac{1}{r} \frac{\partial U(r)}{\partial r} \right\rangle \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{S}}. \quad (3.10)$$

$$\vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}(\mathbf{J}^2 - \mathbf{L}^2 - \mathbf{S}^2). \quad (3.11)$$

$$\vec{\mathbf{J}} = \vec{\mathbf{L}} + \vec{\mathbf{S}}. \quad (3.12)$$

Donde  $\vec{\mathbf{J}}$  cumple con las siguientes propiedades:

$$\mathbf{J}^2 |j, m_j\rangle = j(j+1)\hbar^2 |j, m_j\rangle, \quad \mathbf{J}_z |j, m_j\rangle = m_j \hbar |j, m_j\rangle, \quad [\mathbf{J}_i, \mathbf{J}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \mathbf{J}_k. \quad (3.13)$$

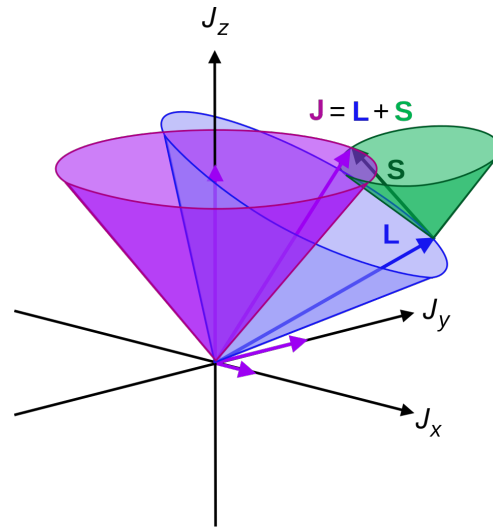


Figura 3.2: Momento angular total.

### 3.3.3. Interacción espín-órbita en la materia

En los sólidos existen distintos tipos de interacción espín-órbita en particular estas se pueden catalogar fundamentalmente en dos tipos: el primer tipo de interacción espín-órbita se denomina interacción espín-órbita simétrico independiente, esta existe en todo tipo de cristales y está intrínsecamente relacionada con la interacción espín-órbita entre el electrón y los orbitales atómicos. El segundo tipo de interacción espín-órbita en la materia se denomina interacción espín-órbita simétrico dependiente y esta existe solamente en cristales que no contienen simetría de inversión, en particular este tipo de interacción se puede separar en dos grupos siendo el primero de ellos la interacción de espín-órbita tipo Dresselhaus: asimetría inducida sobre el bulto (bulk) y el segundo de ellos se denomina interacción espín-órbita tipo Bychkov-Rashba: asimetría inducida sobre la superficie. A continuación se muestran las características de las interacciones espín-órbita simétrico dependientes en la materia.

#### Interacción espín-órbita tipo Rashba

En cristales que carecen de un centro de inversión, las bandas electrónicas del sólido son divididas como consecuencia del acoplamiento espín-órbita. El acoplamiento espín-órbita tipo Rashba es un acoplamiento el cual es directamente proporcional al momento lineal y al campo eléctrico aplicado, el cual fue propuesto originalmente para describir los semiconductores no centrosimétricos del tipo wurzita [10], en la cual se noto que este efecto ocurre debido a una asimetría en la superficie por consecuencia de la presencia de una heterointerfase en el material siendo un ejemplo el material GaAs/AlGaAs. Dicho efecto también puede ocurrir debido a la aplicación de un campo eléctrico sobre la superficie

del material el cual modifica ligeramente las posiciones de los átomos presentes sobre la superficie de este creando una asimetría sobre la misma y estableciendo una interacción espín-órbita en el material.

Cuando un electrón con momento lineal  $\vec{p}$  se mueve a través de una región que contiene un campo magnético  $\vec{B}$ , este experimenta una fuerza de Lorentz en la dirección perpendicular a su movimiento  $\vec{F} = \frac{-e\vec{p} \times \vec{B}}{m}$ , en la cual dicho electrón presenta una energía Zeeman igual a  $\mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}$ , donde  $\vec{\sigma}$  es el vector de las matrices de Pauli y  $\mu_B$  es el magnetón de Bohr. Cuando un electrón se mueve a través de un campo eléctrico, este debido a efectos relativistas siente un campo magnético efectivo  $B_{efec} \sim \frac{\vec{E} \times \vec{p}}{mc^2}$  visto desde el sistema de referencia del electrón en reposo, es por ello que un campo eléctrico también induce una energía Zeeman dependiente del momento lineal  $\mathbf{H}_{\text{SO}} \sim \frac{\mu_B(\vec{E} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}}{mc^2}$ , la cual es llamada acoplamiento espín-órbita. En los cristales el campo eléctrico viene dado por el gradiente del potencial presente en el mismo,  $\vec{E} = -\vec{\nabla}V$ .

En pozos cuánticos en los cuales hay presente una ruptura en la simetría de inversión estructural a lo largo de la dirección de crecimiento de  $\hat{z}$  esto ocasiona como se mencionó anteriormente que las subbandas de espín se dividan en energía. Esta división en las bandas es también observada en algunas superficies metálicas y fue explicada por Bychkov y Rashba [10] considerando un campo eléctrico en la dirección de  $\hat{z}$  con  $\vec{E} = E_z \hat{z}$ , esto ocasiona un acoplamiento espín-órbita efectivo de la forma:

$$\mathbf{H}_{\text{R}} = \frac{\alpha_R}{\hbar} (\vec{z} \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}, \quad (3.14)$$

donde  $\alpha_R$  es llamado el parámetro de Rashba. Por otra parte esta forma conveniente para describir este Hamiltoniano obtenido a partir de ondas planas bidimensionales, es solo fenomenológica y no puede ser aplicada directamente a sistemas reales. De hecho, investigaciones teóricas muestran que la carencia de simetría de inversión no solo crea un campo eléctrico adicional  $E_z$  sino que también distorsiona la función de onda cerca del núcleo donde la aproximación de onda plana no es válida.

### Interacción espín-órbita tipo Dresselhaus

La interacción espín-órbita tipo Dresselhaus ocurre en cristales que presentan una asimetría de inversión de bulto (ver figura 3.3). Un cristal con estas características (Blenda de zinc ver figura 3.4) fue estudiado por G. Dresselhaus en 1955 [11], en donde él notó que esta asimetría conlleva a la formación de un campo eléctrico interno en el material, pero a diferencia de la interacción espín-órbita del tipo Rashba este campo eléctrico no se forma solo sobre la superficie del cristal o un plano particular del cristal sino en todo el sólido es por ello que este campo eléctrico tridimensional genera una energía Zeeman análoga a

la interacción espín-órbita tipo Rashba, sin embargo, esta no está contenida en un plano del cristal. En general, esta interacción es más complicada que la interacción espín-órbita tipo Rashba, siendo este un modelo aún más preciso para describir cristales con asimetría de inversión, sin embargo, bajo cierto nivel de aproximación el modelo de “juguete” de Rashba puede funcionar en ciertos sistemas específicamente en sistemas donde el campo eléctrico del material se encuentra sobre la superficie o una dirección cristalográfica en particular. A continuación se muestra el Hamiltoniano obtenido por Dresselhaus en 1955.

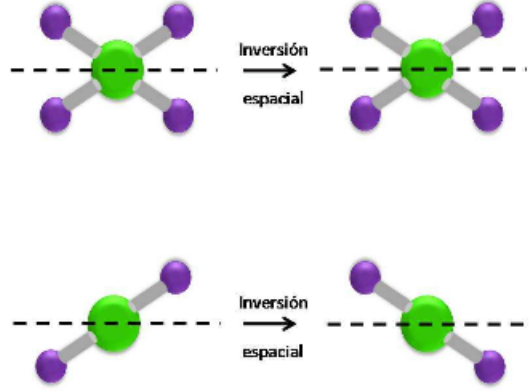


Figura 3.3: Asimetría de inversión de bulto [12].

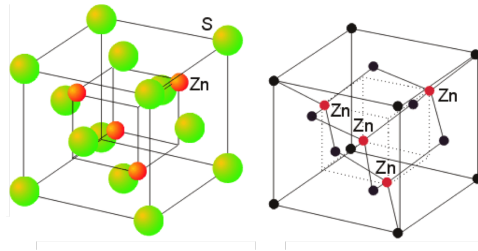


Figura 3.4: Blenda de Zinc.

$$\mathbf{H}_D^{3D} \sim [\mathbf{p}_x (\mathbf{p}_y^2 - \mathbf{p}_z^2) \sigma_x + \mathbf{p}_y (\mathbf{p}_z^2 - \mathbf{p}_x^2) \sigma_y + \mathbf{p}_z (\mathbf{p}_x^2 - \mathbf{p}_y^2) \sigma_z]. \quad (3.15)$$

En la ecuación anterior el término que contiene la matriz de Pauli  $\sigma_x$  está asociada con la dirección cristalográfica (100), el término que contiene la matriz de Pauli  $\sigma_y$  está asociada a la dirección cristalográfica (010) y finalmente el término que contiene la matriz de Pauli  $\sigma_z$  está asociada con la dirección cristalográfica (001). Este Hamiltoniano se

puede proyectar sobre una dirección cristalográfica particular, la cual es típicamente la dirección cristalográfica (001) obteniéndose un Hamiltoniano bidimensional y lineal el cual tiene la siguiente forma:

$$\mathbf{H}_{D,linear}^{2D,001} = \beta [\mathbf{p}_y \boldsymbol{\sigma}_y - \mathbf{p}_x \boldsymbol{\sigma}_x]. \quad (3.16)$$

Este Hamiltoniano describe la interacción espín-órbita sobre la superficie de un cristal tridimensional con asimetría de inversión de bulto donde  $\beta$  es la constante de interacción y  $\boldsymbol{\sigma}_i$  son las matrices de Pauli. Siendo esta una expresión más exacta para sistemas con esta asimetría en comparación con la interacción espín-órbita tipo Rashba.

## 3.4. Corrientes persistentes

Las corrientes persistentes son un efecto cuántico que suele aparecer en sistemas mesoscópicos, como por ejemplo un anillo cuántico el cual se encuentra aislado y bajo la presencia de un flujo magnético de Aharonov-Bohm. Este flujo externo es responsable de generar un movimiento de electrones entre los sitios del anillo permitiéndose así el establecimiento de una corriente en el anillo la cual no decae en el tiempo, a esto se le conoce como corriente persistente.

Este fenómeno fue expuesto por primera vez por Büttiker en 1983 [4] estableciendo que un anillo metálico aislado sometido a un flujo magnético de Aharonov-Bohm genera una corriente permanente que no decae en el tiempo.

En estos anillos cuánticos solemos encontrar dos tipos de corrientes persistentes las cuales son: la corriente persistente de carga y la corriente persistente de espín de las cuales hablaremos a continuación.

### 3.4.1. Corrientes persistentes de carga

Las corrientes persistentes de carga aparecen cuando hay una ruptura en la simetría de inversión temporal en un sólido debido a la presencia de un campo externo en donde las cargas con espines opuestos viajan en una sola dirección produciéndose así una corriente neta que no presenta espín y es por ello que tiene por nombre corriente de carga (ver figura 3.5) [13].

A una temperatura absoluta de ( $T = 0\text{K}$ ), la corriente persistente de carga neta generada por un electrón moviéndose a lo largo de un anillo tiene la siguiente forma [5]:

$$I_c(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} J_c(E) dE, \quad (3.17)$$

donde  $\mu$  es el potencial químico del anillo y  $J_c$  es la densidad de corriente de carga y cuyo operador se define de la siguiente manera:

$$\mathbf{J}_c = \frac{e}{N} \mathbf{V}. \quad (3.18)$$

Siendo  $e/N$  es el número de electrones por unidad de volumen en el material y el operador velocidad viene dado de la siguiente manera:

$$\mathbf{V} = \dot{\mathbf{x}} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{x}]. \quad (3.19)$$

Utilizando esta última relación podemos escribir el operador densidad de corriente de carga como:

$$\mathbf{J}_c = \frac{ie}{N\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{x}]. \quad (3.20)$$

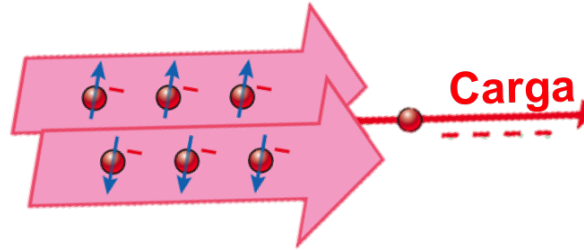


Figura 3.5: Corriente de carga.

### 3.4.2. Corrientes persistentes de espín

Sin la presencia de un flujo de campo magnético externo que rompa la simetría de inversión temporal, la corriente de carga es nula. Sin embargo, existen otro tipo de corrientes que aparecen debido a la interacción espín-órbita y que rompen la simetría de inversión espacial [13]. Estas corrientes son conocidas como corrientes de espín ya que los electrones se mueven con un espín determinado. En el caso particular de una corriente de espín pura, las cargas con espines contrarios se mueven en direcciones opuestas obteniéndose así una corriente de espín en una determinada dirección, sin embargo, bajo estas condiciones la corriente de carga neta es cero ya que las partículas se mueven en direcciones opuestas (ver figura 3.6).

Al igual que en el caso de las corriente de carga, a una temperatura absoluta de ( $T = 0\text{K}$ ), la corriente de espín generada por un electrón moviéndose a lo largo de un anillo tiene la siguiente forma [5]:

$$I_s(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} J_s(E) dE. \quad (3.21)$$

Donde  $J_s$  es la densidad de corriente de espín cuyo operador tiene la siguiente forma:

$$\mathbf{J}_s = \frac{1}{2N} \{\vec{\sigma}, \mathbf{V}\}. \quad (3.22)$$

Utilizando la ecuación para el operador velocidad (ver ecuación (3.19)) podemos reescribir el operador densidad de corriente de espín de la siguiente forma:

$$\mathbf{J}_s = \frac{i}{2N\hbar} \{\vec{\sigma}, [\mathbf{H}, \mathbf{x}]\}. \quad (3.23)$$

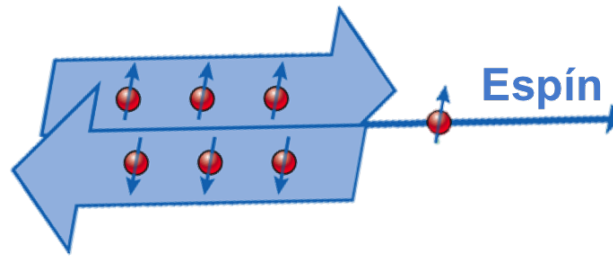


Figura 3.6: Corriente de espín.

## 3.5. Cuantización

### 3.5.1. Segunda cuantización

En la mecánica ondulatoria básica se pueden estudiar sistemas de muchas partículas mediante la utilización de funciones de onda para muchos cuerpos, las cuales se encuentran apropiadamente simetrizadas a partir de las funciones de ondas de una sola partícula. Empelando estas funciones se puede construir un conjunto completo de funciones de onda a partir de la función de onda de una sola partícula, con el fin de generar una expansión arbitraria de funciones de ondas para muchos cuerpos. Este procedimiento es innecesario y

engorroso y el mismo se puede simplificar proponiendo la teoría en una forma equivalente llamada segunda cuantización [14].

Esta teoría está basada fundamentalmente en la representación del número de ocupación, en la cual se trabaja con vectores de estado de muchas partículas especificando en sí los estados ocupados por una sola partícula (estados de Fock) y a su vez permite la introducción de los operadores de creación  $\mathbf{a}_n^\dagger$  y aniquilación  $\mathbf{a}_n$  los cuales modifican los estados de ocupación de una sola partícula de uno en uno respecto al estado de Fock de partida [14]. Es decir,  $\mathbf{a}_n^\dagger$  crea una partícula en la posición  $\vec{r}$  y  $\mathbf{a}_n$  destruye una partícula en la posición  $\vec{r}$ .

En sí, la segunda cuantización utiliza estos operadores  $\mathbf{a}_n^\dagger$  y  $\mathbf{a}_n$  con la finalidad de cuantizar la función de onda del sistema obteniéndose los siguientes operadores:

$$\Psi(\vec{r}) = \sum_n \psi_n(\vec{r}) \mathbf{a}_n, \quad (3.24)$$

$$\Psi^\dagger(\vec{r}) = \sum_n \psi_n^*(\vec{r}) \mathbf{a}_n^\dagger. \quad (3.25)$$

Dado que  $\Psi(\vec{r})$  y  $\Psi^\dagger(\vec{r})$  son operadores escritos en segunda cuantización definidos en cada punto del espacio, son llamados operadores cuánticos de campo y obedecen las siguientes relaciones fundamentales conmutación y anticonmutación:

$$[\Psi(\vec{r}_1), \Psi^\dagger(\vec{r}_2)] = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2), \quad (3.26)$$

$$\{\Psi(\vec{r}_1), \Psi^\dagger(\vec{r}_2)\} = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2). \quad (3.27)$$

Estas relaciones provienen de la naturaleza de los operadores de creación y aniquilación los cuales satisfacen que  $[\mathbf{a}_n, \mathbf{a}_m^\dagger]_{\mp} = \delta_{n,m}$ . (signo superior bosones, signo inferior fermiones) y la completitud de las funciones de onda la cual viene dada por  $\sum_n \psi_n(\vec{r}_1) \psi_n(\vec{r}_2) = \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ , en donde la primera relación (conmutación) se aplica para campos de bosones (ver ecuación 3.26) y la segunda relación (anticonmutación) se aplica para campos de fermiones (ver ecuación (3.27)) [15]. Estas relaciones son consecuencia de que las funciones de onda de los bosones (partículas con espín entero) son pares, mientras que las funciones de onda de los fermiones (partículas con espín semi-entero) son impares.

### 3.5.2. Hamiltoniano tight-binding

Un tipo de Hamiltoniano que se utiliza con frecuencia en la física del estado sólido para describir una red cristalina, es el Hamiltoniano tight-binding. El modelo tight-binding es un modelo que permite el cálculo de la estructura de bandas de un cierto material utilizando una aproximación en el conjunto de funciones de ondas del material que provienen

de la superposición de las funciones de ondas para átomos aislados localizados en un sitio atómico particular [16].

En el modelo tight-binding es común suponer que las únicas interacciones importantes son aquellas que ocurren ente los átomos vecinos cercanos entre sí. Esta última suposición nos permite introducir la definición de Hamiltoniano tight-binding como:

$$\mathbf{H} = \sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \epsilon_{\vec{r}} \langle \vec{r}| + \sum_{\vec{r}, \vec{r}'} |\vec{r}\rangle V_{\vec{r}, \vec{r}'} \langle \vec{r}'|, \quad (3.28)$$

donde  $|\vec{r}\rangle$  es un estado que está centrado en la ubicación  $\vec{r}$ , que representa la posición espacial de un determinado sitio de la red cristalina,  $\epsilon_{\vec{r}}$  es la energía del sitio atómico ubicado en la posición  $\vec{r}$  y  $V_{\vec{r}, \vec{r}'}$  es la energía potencial de salto entre los sitios atómicos ubicados en las posiciones  $\vec{r}'$  y  $\vec{r}$ .

El conjunto completo de estados  $\{|\vec{r}\rangle\}$  en el Hamiltoniano tight-binding obedece lo siguiente:

$$\sum_{\vec{r}} |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}. \quad (3.29)$$

$$\langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta_{\vec{r}, \vec{r}'}. \quad (3.30)$$

En donde la ecuación 3.29 es denominada como la relación de completitud de los estados en el espacio de Hilbert y la ecuación (3.30) es la relación de ortonormalidad entre estos estados.

Una forma conveniente y común de escribir un Hamiltoniano tight-binding es reemplazando el producto de estados  $\{|\vec{r}\rangle\}$  por nuevos operadores utilizando el formalismo de la segunda cuantización.

Estos nuevos operadores, ahora de creación y aniquilación se hacen actuar en cada punto  $\vec{r}$  de la red cristalina. Estos operadores se encuentran relacionados con los puntos de nuestra red cristalina y se pueden incorporar en el modelo tight-binding, donde estos operadores obedecen las siguientes relaciones: relaciones de conmutación en el caso de bosones (-) y relaciones de anticonmutación en el caso de fermiones (+):

$$[\mathbf{a}_{\vec{r}}, \mathbf{a}_{\vec{r}'}^\dagger]_{\mp} = \delta_{\vec{r}, \vec{r}'}, \quad (3.31)$$

$$[\mathbf{a}_{\vec{r}}^\dagger, \mathbf{a}_{\vec{r}'}^\dagger]_{\mp} = 0 = [\mathbf{a}_{\vec{r}}, \mathbf{a}_{\vec{r}'}]_{\mp}. \quad (3.32)$$

Empleando el formalismo de la segunda cuantización podemos escribir nuestro Hamiltoniano tight-binding en segunda cuantización en términos de los nuevos operadores

mencionados anteriormente y tomando  $V$  como una constante relacionada con el salto de potencial entre los sitios atómicos vecinos obteniendo:

$$\mathbf{H} = \sum_{\vec{r}} \mathbf{a}_{\vec{r}}^\dagger \epsilon_{\vec{r}} \mathbf{a}_{\vec{r}} + \sum_{\vec{r}} (\mathbf{a}_{\vec{r}}^\dagger V \mathbf{a}_{\vec{r}} + h.c). \quad (3.33)$$

El Hamiltoniano en esta representación tiene contribuciones dadas por la energía del sitio  $\epsilon_{\vec{r}}$  y las contribuciones de salto, que crean y aniquilan excitaciones en los sitios de la red vecina o lo que es equivalente aniquila o crea excitaciones en los sitios en la posición  $\vec{r}$ .

### 3.5.3. Operador evolución

A través de la ecuación de Schrödinger se puede obtener la evolución temporal de los estados cuánticos a partir del Hamiltoniano del sistema:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\vec{r}, t)\rangle = \mathbf{H} |\psi(\vec{r}, t)\rangle, \quad (3.34)$$

donde  $\hbar$  es la constante de Plank. Para un tiempo inicial  $t = 0$  podemos integrar (3.34) para obtener el estado en un tiempo posterior cualquiera.

Adicionalmente, si  $\mathbf{H}$  es un operador que no depende implícitamente del tiempo, se puede expresar la evolución temporal del estado  $|\psi(\vec{r}, t)\rangle$  en términos de un operador unitario definido en el espacio de Hilbert, llamado propagador u operador evolución [17].

$$|\psi(\vec{r}, t)\rangle = \mathbf{U}(t) |\psi(\vec{r}, 0)\rangle. \quad (3.35)$$

Donde el operador  $\mathbf{U}(t)$  satisface:

$$\mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} = \mathbb{1}. \quad (3.36)$$

Utilizando la ecuación (3.35) tenemos que la ecuación de Schrödinger toma la siguiente forma equivalente:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t) |\psi(\vec{r}, 0)\rangle = \mathbf{H} \mathbf{U}(t) |\psi(\vec{r}, 0)\rangle. \quad (3.37)$$

Como consecuencia de que los estados en la ecuación (3.37) no dependen implícitamente del tiempo, se puede escribir la ecuación de Schrödinger para el operador evolución:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{U}(t) = \mathbf{H} \mathbf{U}(t). \quad (3.38)$$

En el caso particular en el cual  $\mathbf{H}$  no depende implícitamente del tiempo, se puede obtener a partir de la ecuación (3.38) que el operador evolución toma la siguiente forma:

$$\mathbf{U}(\mathbf{t}) = e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}\mathbf{t}}. \quad (3.39)$$

Donde  $\mathbf{U}(0) = \mathbb{1}$  y cumpliéndose adicionalmente la condición de que el operador  $\mathbf{U}$  es unitario (característica importante del operador) como se muestra a continuación:

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}}e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}\mathbf{t}} = \mathbb{1}. \quad (3.40)$$

## 3.6. Representaciones

En física para poder obtener la mayor información de un observable, se debe elegir una manera apropiada para trabajar y escribir las ecuaciones con la intención de resolverlas de una manera simple mediante el uso de simetrías. En el caso de la mecánica cuántica los operadores son los elementos que brindan la información del sistema ya sea que se este trabajando con un sistema que cambia o no con el tiempo y su formulación varia dependiendo de la representación elegida.

Es ahí cuando los marcos o representaciones de Schrödinger, Heisenberg e interacción son de suma importancia y utilidad ya que cada uno de ellos brinda un enfoque particular a la hora de trabajar con sistemas cuánticos.

### 3.6.1. Marco de Schrödinger

En el marco de Schrödinger las cantidades físicas son descritas por medio de operadores que no dependen del tiempo a través de la formulación estándar de la ecuación de Schrödinger.

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \mathbf{H}|\psi(t)\rangle. \quad (3.41)$$

La misma establece la evolución del estado de un sistema, representado por un ket  $|\Psi(\vec{r}, t)\rangle$ , que cambia a medida que transcurre el tiempo. En donde  $\mathbf{H}$  es el operador Hamiltoniano asociado a la energía del sistema el cual podría depender explícitamente del tiempo.

La evolución temporal para un sistema cerrado se puede obtener mediante el operador evolución en el caso particular en el cual el Hamiltoniano del sistema no dependa explícitamente del tiempo este se puede escribir como:

$$\mathbf{U}(t) = e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}\mathbf{t}}. \quad (3.42)$$

El marco de Schrödinger es el más adecuado cuando se trabaja con Hamiltoniano que no dependen del tiempo y cuando se esta interesado solo en las evoluciones de los estados mas no de los operadores.

### 3.6.2. Marco de Heisenberg

En el marco de Heisenberg las cosas cambian un poco ya que ahora las funciones de ondas son independientes del tiempo y la evolución del sistema viene descrita por operadores que dependen del tiempo. Es por esto que ahora no hablamos de estados que varían en el tiempo sino de operadores que cambian en el tiempo, por lo que la derivada temporal de un operador  $\mathbf{O}(t)$  definido en el marco de Heisenberg viene dado por:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{O}(t) = \frac{i}{\hbar}[\mathbf{H}, \mathbf{O}_s]_H + \left(\frac{\partial \mathbf{O}_s}{\partial t}\right)_H. \quad (3.43)$$

En el marco de Schrödinger el valor de expectación de un operador en un cierto instante de tiempo se encuentra definido por:

$$\langle \mathbf{O} \rangle(t) = \langle \psi(t) | \mathbf{O} | \psi(t) \rangle. \quad (3.44)$$

La evolución del estado se obtiene por medio del operador evolución  $\mathbf{U}(t) = e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}t}$ :

$$|\psi(t)\rangle = \mathbf{U}(t)|\psi(0)\rangle. \quad (3.45)$$

Usando el resultado anterior el valor medio de un operador toma la siguiente forma:

$$\langle \mathbf{O} \rangle(t) = \langle \psi(0) | e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}t} \mathbf{O} e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}t} | \psi(0) \rangle. \quad (3.46)$$

De esta manera podemos obtener la forma del  $\mathbf{O}(t)$  en el marco de Heisenberg ya que el valor medio de cualquier operador debe preservarse. Al existir tanta similitud entre el marco de Heisenberg y el marco de Schrödinger, se puede describir la transición del marco de Schrödinger al marco de Heisenberg con tan solo una transformación unitaria con el operador  $\mathbf{U}$  [18]:

$$\mathbf{U}(t) = e^{\frac{-i}{\hbar}\mathbf{H}t}. \quad (3.47)$$

Obteniendo de esta forma que la trasformación de los estados desde el marco de Schrödinger hacia el marco de Heisenberg viene dada por:

$$|\psi_H\rangle = \mathbf{U}^\dagger |\psi_S(t)\rangle. \quad (3.48)$$

La transformación de los operadores viene dada por:

$$\mathbf{O}_H(t) = \mathbf{U}^\dagger(t)\mathbf{O}_S\mathbf{U}(t). \quad (3.49)$$

Donde la S indica que el objeto se encuentra en el marco de Schrödinger mientras que la H indica que el objeto se encuentra en el marco Heisenberg es de particular importancia recalcar que los operadores en el marco de Schrödinger podrían depender explícitamente del tiempo por que al transformarlos al marco de Heisenberg el operador seguirá dependiendo del tiempo pero sus estados no.

### 3.6.3. Marco de interacción

Esta última representación llamada de interacción puede ser considerada una representación intermedia entre la de Schrödinger y la de Heisenberg debido a que en esta se trabaja con una mezcla de características presentes en cada una de estas representaciones.

Esta representación es muy práctica cuando se tiene un sistema al cual se le conoce su solución pero se le añade una perturbación en la cual el Hamiltoniano puede dividirse en dos partes, siendo la primera parte  $\mathbf{H}_0(t)$  el cual se denomina como Hamiltoniano libre (Hamiltoniano sin perturbar) y  $\mathbf{V}(t)$  que es la interacción asociada a la perturbación, por lo que el Hamiltoniano completo que describe a el sistema en este caso queda de la siguiente manera:

$$\mathbf{H}(t) = \mathbf{H}_0(t) + \mathbf{V}(t). \quad (3.50)$$

La transformación unitaria que permite pasar del marco de Schrödinger al de interacción viene dada por [18]:

$$\mathbf{S}_I(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{H}_0 t}. \quad (3.51)$$

La transformación de los estados desde el marco de Schrödinger hasta el marco de interacción viene dada por:

$$|\psi_I(t)\rangle = \mathbf{S}^\dagger|\psi_S(t)\rangle, \quad (3.52)$$

donde  $|\psi_S(t)\rangle$  es la función de estado escrita en el marco de Schrödinger.

Por otra parte el cambio de representación de un operador viene dada por:

$$\mathbf{O}_I(t) = \mathbf{S}_I^\dagger(t)\mathbf{O}_S\mathbf{S}_I(t). \quad (3.53)$$

Al aplicarle la transformación unitaria al Hamiltoniano del sistema para llevarlo del marco de Schrödinger al marco de interacción se debe transformar simultáneamente ambas partes del Hamiltoniano es decir, transformar la parte libre y a la parte asociada a la perturbación quedando de esta manera:

$$\begin{aligned}\mathbf{H}_{0,I}(t) &= \mathbf{S}_I^\dagger(t)\mathbf{H}_{0,S}(t)\mathbf{S}_I(t) \\ &= \mathbf{H}_{0,S}(t).\end{aligned}\tag{3.54}$$

Al aplicar el cambio de representación sobre el Hamiltoniano libre obtenemos que este es el Hamiltoniano libre  $\mathbf{H}_0$  en el marco de Schrödinger, esto debido a que el operador  $\mathbf{S}$  conmuta con el Hamiltoniano libre del sistema.

Por otra parte cuando se aplica la transformación unitaria a la parte del Hamiltoniano perturbado, esta presenta la siguiente forma:

$$\mathbf{H}_{V,I}(t) = \mathbf{S}_I^\dagger(t)\mathbf{H}_{V,S}(t)\mathbf{S}_I(t).\tag{3.55}$$

La evolución de los estados en este marco es similar a la evolución de los estados en el marco de Schrödinger, salvo por el hecho de que el cambio en el tiempo del estado escrito en el marco de interacción  $|\psi_I(t)\rangle$  se encuentra relacionado con el Hamiltoniano de perturbación escrito en el marco de interacción de la siguiente forma:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_I(t)\rangle = \mathbf{H}_{V,I}(t)|\psi_I(t)\rangle.\tag{3.56}$$

Mientras que la derivada temporal de los operadores en el marco de interacción obedecen una relación similar a la evolución en el marco de Heisenberg [19] dada por:

$$i\hbar\frac{d}{dt}\mathbf{O}_I(t) = [\mathbf{O}_s, \mathbf{H}_0]_I.\tag{3.57}$$

### 3.7. Funciones de Green

En los últimos años el desarrollo y el uso del método de las funciones de Green en la teoría cuántica de campos ha permitido que la misma se convierta en una herramienta muy poderosa para el estudio de las interacciones en sistemas complejos [14].

En la teoría de muchos cuerpos las funciones de Green son una herramienta muy útil en donde las mismas son el análogo a una función de correlación, sin embargo bajo este régimen estas funciones se refieren a las correlaciones existentes entre los operadores de campo o de creación y aniquilación.

### 3.7.1. Funciones de Green fuera del equilibrio

Las funciones de Green en tiempo real fuera del equilibrio, aparecen naturalmente como una extensión del formalismo de Matsubara (en el equilibrio) en la teoría cuántica de muchos cuerpos en situaciones donde el sistema a estudiar se encuentra muy retirado del equilibrio. En este sentido, las funciones de Green en el no equilibrio son sinónimo del propagador así como también son una función de correlación. Lo interesante de este formalismo, en general, es que permite aplicar los fundamentos de la teoría en el equilibrio (funciones de Green en el equilibrio) a situaciones fuera del equilibrio sin modificar considerablemente las bases conceptuales de esta [20].

#### Funciones de Green-Keldysh

En 1965 Keldysh derivó un método alternativo para escribir la ecuación integro-diferencial de Boltzman como una integral [21]. Esto se puede lograr mediante el uso del operador cronológico de Dyson, el cual es un operador de ordenamiento temporal, aplicado sobre el contorno de Keldysh [22].

#### Definición

Para un sistema físico dado y un par de operadores  $\mathbf{A}(t)$  y  $\mathbf{B}(t')$  asociados al sistema, se puede definir la función de Green-Keldysh asociada a  $\mathbf{A}$  y  $\mathbf{B}$  de la siguiente forma [22]:

$$G(t, t') = -i\langle T_c \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle, \quad (3.58)$$

con  $\hbar = 1$ .

En la ecuación (3.58) el valor medio de los operadores es dependiente del tiempo, por esta razón al tomar la derivada temporal de la función de Green-Keldysh se debe tomar la derivada de los operadores dependientes del tiempo.

$$T_c \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') = \Theta(t, t') \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \pm \Theta(t', t) \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t). \quad (3.59)$$

$$T_c \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') = \begin{cases} \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') & \text{si } t > t' \text{ en el contorno de Keldysh.} \\ \pm \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) & \text{si } t < t' \text{ en el contorno de Keldysh.} \end{cases} \quad (3.60)$$

Donde  $T_c$  es un operador de ordenamiento temporal que actúa sobre el contorno de Keldysh, ordenando los operadores de manera tal que el operador con la variable temporal de mayor magnitud aparezca en el extremo izquierdo del producto. El símbolo ( $\pm$ ) está relacionado con la naturaleza de los operadores en la cual el signo (+) es empleado cuando los operadores son del tipo bosónicos y el signo (-) cuando los operadores son del tipo fermiónicos [22].

Usando las ecuaciones (3.59) y (3.60) la función de Green-Keldysh (3.58) puede ser reescrita como:

$$G(t, t') = -i\Theta(t, t')\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t') \rangle \mp i\Theta(t', t)\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.61)$$

### **Función de Green-Keldysh menor, mayor, avanzada y retrasada**

En la ecuación (3.61)  $G(t, t')$  se define como una función a dos variables temporales sobre el contorno de Keldysh en donde la misma puede ser expresada en términos de la función de Green menor  $G^<$  y la función de Green mayor  $G^>$ , pudiéndose a partir de estas definir la función de Green avanzada y retardada del sistema [22]:

$$G^<(t, t') = \mp i\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.62)$$

$$G^>(t, t') = -i\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t') \rangle. \quad (3.63)$$

$$G^{(r)}(t, t') = -i\Theta(t - t')\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle. \quad (3.64)$$

$$G^{(a)}(t, t') = i\Theta(t' - t)\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle. \quad (3.65)$$

### **Ecuación de movimiento**

$$i\frac{\partial}{\partial t}G(t, t') = \delta(t, t')\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle - i\langle T_c[\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]\mathbf{B}(t') \rangle. \quad (3.66)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial t'}G(t, t') = \delta(t, t')\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle + i\langle T_c\mathbf{A}(t)[\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}] \rangle. \quad (3.67)$$

Es importante mencionar que las ecuaciones de movimiento deben ser complementadas con ciertas condiciones con el fin de recuperar la función de Green-Keldysh adecuada para el sistema, esto se logra incorporando sobre esta las condiciones de contorno o de periodicidad adecuadas [22].

### **Equilibrio Termodinámico**

En el equilibrio termodinámico los valores medios de los operadores de la forma  $\langle \mathbf{A}_0(t)\mathbf{A}_1(t)\dots\mathbf{A}_{n-1}(t) \rangle$  viene dado por:

$$\langle \dots \rangle \equiv \frac{\text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} \dots)}{\text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}})}. \quad (3.68)$$

Donde  $\mathbf{A}(t) = e^{i\mathbf{H}t} \mathbf{A} e^{-i\mathbf{H}t}$ ,  $\hbar = 1$ ,  $\mathbf{H}$  es el Hamiltoniano del sistema y  $\beta = \frac{1}{\kappa_B T}$  siendo  $\kappa_B$  la constante de Boltzman y  $T$  la temperatura del sistema. A partir de los operadores mencionados anteriormente se puede destacar la siguiente propiedad  $[e^{\pm i\mathbf{H}T}, e^{-\beta\mathbf{H}}] = 0$ , esta última relación indica que el operador densidad del sistema conmuta con el operador evolución del sistema [22].

Usando esta propiedad y utilizando las propiedades de la traza se puede escribir que:

$$\text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t')) = \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} e^{i\mathbf{H}t} \mathbf{A} e^{-i\mathbf{H}t} e^{i\mathbf{H}t'} \mathbf{B} e^{-i\mathbf{H}t'}) = \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} \mathbf{A}(t-t') \mathbf{B}). \quad (3.69)$$

Con esta última relación (3.69) se puede escribir que las funciones de Green de cualquier clase deben cumplir con:

$$G_{\mathbf{AB}}^{\Omega}(t, t') = G_{\mathbf{AB}}^{\Omega}(t-t', 0) = G_{\mathbf{AB}}^{\Omega}(0, t'-t), \quad \Omega = >, <, (a), (r). \quad (3.70)$$

Adicionalmente a esto se tiene que:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} \mathbf{A}(t) \mathbf{B}) &= \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} e^{\beta\mathbf{H}} \mathbf{B} e^{-\beta\mathbf{H}} \mathbf{A}(t)) = \\ \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} e^{i\mathbf{H}(-i\beta)} \mathbf{B} e^{-i\mathbf{H}(-i\beta)} \mathbf{A}(t)) &= \text{Tr}(e^{-\beta\mathbf{H}} \mathbf{B}(-i\beta) \mathbf{A}(t)). \end{aligned} \quad (3.71)$$

Posteriormente usando esta última relación se puede obtener que:

$$G_{\mathbf{AB}}^{>}(t, t') = -i \langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle = -i \langle \mathbf{B}(-i\beta) \mathbf{A}(t-t') \rangle = \pm G_{\mathbf{AB}}^{<}(t, t' - i\beta). \quad (3.72)$$

Luego de haber realizado esto se puede tomar la transformada de Fourier de la última relación y se puede obtener fácilmente que:

$$G_{\mathbf{AB}}^{>}(\omega) = \pm e^{\beta\omega} G_{\mathbf{AB}}^{<}(\omega). \quad (3.73)$$

Mediante el uso de la ecuación (3.73) y tomando la transformada de Fourier de  $G_{\mathbf{AB}}^{(r)}(t, t') - G_{\mathbf{AB}}^{(a)}(t, t') = G_{\mathbf{AB}}^{>}(t, t') - G_{\mathbf{AB}}^{<}(t, t')$ , se puede obtener que la función de Green menor en el equilibrio termodinámico viene dada por :

$$G_{\mathbf{AB}}^{<}(\omega) = \pm \frac{G_{\mathbf{AB}}^{(r)}(\omega) - G_{\mathbf{AB}}^{(a)}(\omega)}{e^{\beta\omega} \mp 1}. \quad (3.74)$$

Esta última ecuación representa la forma de la función de Green menor en el equilibrio termodinámico la cual depende esencialmente del producto de la densidad de estados

por la diferencia entre la función de Green avanzada y retardada da las cuales pueden ser encontradas a partir de la técnica de la ecuación de movimiento la cual debe ser empleada adecuadamente en función de la naturaleza de los operadores utilizados. En la ecuación (3.74) el signo superior debe ser utilizado cuando los operadores son del tipo bosónico, mientras que el signo inferior debe ser empleado cuando los operadores son del tipo fermiónico.

Adicionalmente puede surgir el cuestionamiento de si esta es la única manera de estudiar sistemas de muchos cuerpos que se encuentren bajo el equilibrio termodinámico, siendo la respuesta a esta interrogante un rotundo no.

A pesar de que las funciones de Green-Keldysh son una poderosa herramienta para estudiar sistemas fuera del equilibrio, también existen diversos formalismos definidos en el equilibrio que permiten obtener las funciones de Green para dichos sistemas, estos formalismos se conocen como el formalismo de las funciones de Green de Zubarev y el formalismo de las funciones de Green de Matsubara. Siendo el primer formalismo equivalente a las funciones de Green-Keldysh, con la salvedad de que el tiempo  $t'$  es igual a cero. Lo cual indica que la perturbación sobre el sistema ocurre en un tiempo  $t' = 0$ , es decir, el mismo se comporta como un sistema sin perturbar para cualquier  $t$  mayor que cero. Adicionalmente otra particularidad de este formalismo es que las funciones de Green obtenidas bajo este son equivalentes a las funciones de Green-Keldysh en el límite del equilibrio termodinámico.

Por otra parte las funciones de Green Matsubara son funciones de Green en el equilibrio definidas bajo un intervalo temporal dependientes del parámetro termodinámico  $\beta$  siendo este intervalo temporal definido en el dominio  $t \in [-i\beta, i\beta]$ , presentando a su vez un ordenamiento temporal similar a las funciones de Green-Keldysh con la diferencia de que estas no dependen explícitamente del tiempo sino de la temperatura del sistema.

Las funciones de Green-Keldysh no deben ser consideradas como la única herramienta para estudiar este tipo de sistemas físicos, sin embargo, estas proveen la posibilidad de estudiar la evolución del sistema físico antes de que este alcance el equilibrio termodinámico, siendo esto último de gran utilidad para realizar mediciones y aplicaciones en tiempo y respuesta real.

### 3.8. Metodología Implementada

A continuación se detalla la metodología empleada para la realización del presente trabajo especial de grado utilizando como referencia el artículo de Maiti y colaboradores [5]:

1. En la primera fase de este trabajo especial de grado se empleo un Hamiltoniano con y sin interacción espín órbita el cual se muestra en la ecuación (2.1), para esto

---

se reescribió dicho Hamiltoniano de forma lineal haciendo los respectivos productos matriciales entre cada uno de los elementos que componen dicho Hamiltoniano tight-binding escrito en segunda cuantización. Esto se hizo con la finalidad de calcular y escribir de manera apropiada las corrientes persistentes de carga y de espín asociadas al sistema a estudiar en particular, un anillo mesoscópico con  $N$  sitios atómicos.

2. Una vez escrito el Hamiltoniano en forma lineal se procedió a calcular las densidades de corrientes de carga y de espín. Con el fin de obtener la densidad de corriente de carga se calculó el conmutador del Hamiltoniano con el operador posición asociado a cada sitio en el anillo obteniéndose así la expresión correspondiente para el operador densidad de corriente de carga tras la multiplicación de este por las constantes correspondientes. Posteriormente se procedió a calcular el operador densidad de corriente de espín para ello se empleo el resultado obtenido para el conmutador del Hamiltoniano del anillo con el operador posición para calcular el anticonmutador de este con el operador de espín del sistema empelando este resultado y tras multiplicar apropiadamente por las constantes correspondientes se obtuvo el operador densidad de corriente de espín del sistema.
  3. En una segunda fase se procedió a calcular las densidades de corriente de carga y de espín en términos de funciones de Green, para ello se calculó el valor medio de los operadores de densidad de corriente de carga y de espín. Posteriormente tras una manipulación adecuada de estos valores medios fue posible escribir las densidades de corriente en términos de funciones de Green-Keldysh menor.
  4. En una tercera fase ya con las corrientes escritas en términos de las funciones de Green, se procedió a aplicar el método de la ecuación de movimiento para cada función de Green presente en las densidades de corriente de carga y de espín. Este paso fue de vital importancia para la investigación ya que a través de la implementación de este método se observó cierto patrón recurrente entre las ecuaciones resultantes. Empleando dicho patrón fue posible escribir una generalización de la ecuación de movimiento de las funciones de Green del sistema para cualquier número de sitios en el anillo.
  5. Una vez obtenida la generalización de la ecuación de movimiento del sistema y su transformada de Fourier, fue posible encontrar las funciones de Green-Keldysh para un electrón en cualquier sitio de un anillo con diez sitios atómicos con un espín en particular. Una vez hecho esto se obtuvieron las funciones de Green-Keldysh avanzadas y retardadas para posteriormente de aplicar el límite en el equilibrio termodinámico a dicha solución. Esto fue necesario debido que los valores medios de las densidades de corriente están escritas en términos de las función de Green menor y éstas pueden ser obtenidas a partir de las funciones de Green avanzadas y retardadas del sistema.
-

6. En una última fase se realizó un programa computacional empleando el paquete Wolfram Mathematica con la finalidad de obtener de forma numérica las densidades de corriente de carga y de espín para un anillo mesoscópico con diferentes sitios atómicos, obtenidas a partir de la ecuación de movimiento generalizada derivada en una fase previa. En donde se calcularon las densidades de corriente para un anillo de veinte sitios atómicos variando el flujo de Aharonov-Bohm y empleando un valor determinado para las diferentes interacciones presentes en el sistema tales como lo son la interacción a primeros vecinos o hopping y los parámetros de Rashba y Dresselhaus. Esto se hizo con el fin de comparar los resultados obtenidos en este trabajo especial de grado con los resultados obtenidos previamente por Maiti y colaboradores empleando un esquema totalmente distinto.
-

# Capítulo 4

## Desarrollo del trabajo

En este capítulo se describen los resultados obtenidos a través de la realización de este trabajo especial de grado.

### 4.1. Operador densidad de corriente de carga y de espín

En esta sección se obtienen paso a paso los operadores densidad de corriente de carga y espín derivados a partir del Hamiltoniano (2.1).

Inicialmente se procedió a rescribir el Hamiltoniano (2.1) y cada uno de los términos que lo componen en su forma matricial, con la finalidad de reescribirlo en forma matricial.

$$\mathbf{H}_{RD} = \mathbf{H}_o + \mathbf{H}_h + \mathbf{H}_R + \mathbf{H}_D. \quad (4.1)$$

$$\mathbf{H}_o = \sum_n \mathbf{c}_n^\dagger \epsilon_n \mathbf{c}_n. \quad (4.2)$$

$$\mathbf{H}_h = \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c.). \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_R = & - \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\sigma_x) \alpha \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\ & - \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\sigma_y) \alpha \sin \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c). \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_D = & \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\sigma_y) \beta \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c) \\ & + \sum_n (\mathbf{c}_{n+1}^\dagger (i\sigma_x) \beta \sin \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \mathbf{c}_n + h.c). \end{aligned} \quad (4.5)$$

---

La ecuación (4.1) hace referencia al Hamiltoniano usado para describir un anillo mesoscópico compuesto por sitios atómicos como se muestra en la figura 2.1. Este contiene un primer término relacionado con la energía cinética de un gas de electrones el cual se encuentra asociado a las impurezas presentes en el anillo (estas impurezas pueden contener deficiencia o exceso de electrones ecuación (4.2)), un segundo término asociado a la interacción a primeros vecinos o término de hopping ( ecuación (4.3)), un tercer término asociado a la interacción espín-órbita Rashba (ecuación (4.4)) y finalmente un último término asociado a la interacción espín-órbita Dresselhaus (ecuación (4.5)).

Después de realizar las respectivas operaciones matriciales sobre el Hamiltoniano (A.1) (ver apéndice) fue posible escribir el mismo en forma lineal como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{RD} = & \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \epsilon_{n\uparrow} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \epsilon_{n\downarrow} \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\
& - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}.
\end{aligned} \tag{4.6}$$

Con el propósito de escribir los operadores densidad de corriente de carga y densidad de corriente de espín se procedió a calcular el conmutador del Hamiltoniano (ecuación (4.8)) con el operador posición empleando la definición de estos operadores utilizada por Maiti y colaboradores en [5], como se muestra en las ecuaciones (3.20) y (3.23) respectivamente. Con el fin de lograr este cometido, también fue necesario escribir el operador posición en su forma lineal (ecuación (4.7)), obteniéndose lo siguiente:

$$\begin{aligned}
\mathbf{x} &= \sum_n \mathbf{c}_n^\dagger n \mathbf{c}_n \\
&= \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&= \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger n \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger n \mathbf{c}_{n\downarrow} \right).
\end{aligned} \tag{4.7}$$

Una vez reescrito el operador posición se procedió a escribir el conmutador de  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$  de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] &= [\mathbf{H}_o + \mathbf{H}_h + \mathbf{H}_R + \mathbf{H}_D, \mathbf{x}] \\ &= [\mathbf{H}_o, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_h, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_R, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_D, \mathbf{x}]. \end{aligned} \quad (4.8)$$

Una vez calculado el conmutador  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$  (ecuación (4.8)) el cual se muestra en la ecuación (A.6), se procedió a calcular el operador densidad de corriente de carga  $\hat{\mathbf{J}}_c$  (ecuación (4.9)) del sistema estudiado:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_c &= \frac{ie}{N\hbar} [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \\ &= \frac{ie}{N\hbar} \left( \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \\ &+ \frac{ie}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \\ &+ \frac{ie}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \right). \end{aligned} \quad (4.9)$$

El resultado mostrado en la ecuación (4.9) es totalmente consistente con el resultado derivado por Maiti y colaboradores en [5].

Seguido de esto se calculó el operador densidad de corriente de espín  $\hat{\mathbf{J}}_s$ . Para ello se empleo el resultado del conmutador  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$  obtenido previamente (ecuación (A.6)), pero en esta ocasión el cálculo de este operador es ligeramente diferente al procedimiento anterior, ya que fue necesario calcular el anticonmutador del operador sigma  $\vec{\sigma}$  en cada una de sus componentes con el conmutador  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$ .

Como consecuencia directa de que el operador sigma  $\vec{\sigma}$  es un operador vectorial cuyas componentes son las matrices de Pauli, fue necesario reescribir el conmutador  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$  (ecuación (A.6)) en forma matricial (ecuación (A.7)) con la finalidad de calcular posteriormente el anticonmutador de este último con el operador sigma  $\vec{\sigma}$  y reescribir el resultado final del anticonmutador (4.10)  $\{\vec{\sigma}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\}$  de forma lineal, obteniendo que el operador densidad de corriente de espín tiene la forma mostrada en la ecuación (4.11).

$$\begin{aligned} \{\vec{\sigma}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} &= \{\sigma_x \hat{i} + \sigma_y \hat{j} + \sigma_z \hat{k}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} \\ &= \{\sigma_x \hat{i}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} + \{\sigma_y \hat{j}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} + \{\sigma_z \hat{k}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} \\ &= \{\sigma_x, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} \hat{i} + \{\sigma_y, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} \hat{j} + \{\sigma_z, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} \hat{k} \\ &= (\sigma_x [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \sigma_x) \hat{i} + (\sigma_y [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \sigma_y) \hat{j} \\ &+ (\sigma_z [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \sigma_z) \hat{k}. \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_s &= \frac{i}{2N\hbar} \{ \vec{\sigma}, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \} \\
&= \frac{i}{N\hbar} \left( \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \tau e^{-i\theta} - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \tau e^{i\theta} \right. \\
&\quad + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&\quad + \left. \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta} \right) \hat{i} \\
&\quad + \frac{i}{N\hbar} \left( \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) i \tau e^{-i\theta} - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} - \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) i \tau e^{i\theta} \right. \\
&\quad + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \left( \alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&\quad + \left. \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \left( \alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta} \right) \hat{j} \\
&\quad + \frac{i}{N\hbar} \left( \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right. \\
&\quad \left. - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \hat{k}. \tag{4.11}
\end{aligned}$$

Al comparar el operador densidad de corriente de espín en la componente  $\hat{z}$  obtenido en este trabajo con el operador obtenido por Maiti y colaboradores en [5], se ha determinado que ambos resultados son equivalentes demostrando que el esquema de trabajo seguido arroja resultados que son consistentes con los resultados de estos últimos. Adicionalmente a lo mencionado previamente cabe destacar que en este trabajo especial de grado ha sido posible calcular el resto de las componentes vectoriales del operador densidad de corriente de espín, siendo estas componentes la componente  $\hat{i}$  y la componente  $\hat{j}$  de este operador.

## 4.2. Funciones de Green-Keldysh y la ecuación de movimiento

En esta sección se muestran los valores medios de los operadores densidad de corriente de carga y de espín obtenidos en la sección anterior en términos de las funciones de Green-Keldysh del sistema. Adicionalmente también se deriva la ecuación de movimiento para dos pares de operadores de creación y aniquilación respectivamente para cualquier sitio atómico presente en el anillo estudiado.

Una vez calculados los operadores mencionados anteriormente, se procedió a calcular el valor medio de dichos operadores respectivamente con la finalidad de describir estos valores medios en términos de funciones de Green-Keldysh como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{J}_c \rangle &= \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n \tau e^{-i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle - \sum_n \tau e^{i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sum_n \tau e^{-i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle - \sum_n \tau e^{i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle \right) \\
&\quad + \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) e^{i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) e^{i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle \right) \\
&\quad + \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) e^{-i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) e^{-i\theta} i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle \right). \tag{4.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{J}_s \rangle &= \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle) \tau e^{-i\theta} - \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle) \tau e^{i\theta} \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle) (\alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1})) i e^{i\theta} \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle) (\alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1})) i e^{-i\theta} \right) \hat{i} \\
&\quad + \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle - i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle) i \tau e^{-i\theta} - \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle - i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle) i \tau e^{i\theta} \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle) (\alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1})) i e^{i\theta} \right. \\
&\quad \left. + \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle) (\alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1})) i e^{-i\theta} \right) \hat{j} \\
&\quad + \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \rangle - i \langle \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \rangle) \tau e^{-i\theta} \right. \\
&\quad \left. - \sum_n (i \langle \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} \rangle + i \langle \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \rangle) \tau e^{i\theta} \right) \hat{k}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

En los valores medios calculados previamente los operadores de creación y aniquilación son de carácter fermiónico, ya que estos describen electrones, es por ello que es necesario tomar el signo negativo en la ecuación (3.62), adicionalmente al comparar directamente estos valores medios con la ecuación mencionada anteriormente se puede notar que estos pueden ser reescritos en términos de funciones de Green-Keldysh menor. Una vez hecho este cambio sobre los valores medios de las densidades de corriente se obtiene la siguiente expresión:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{J}_c \rangle &= \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n \tau e^{-i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\uparrow}^< - \sum_n \tau e^{i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^< + \sum_n \tau e^{-i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\downarrow}^< - \sum_n \tau e^{i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^< \right) \\
&+ \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-\varphi_{n,n+1}}) e^{i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^< + \sum_n (i\alpha e^{-\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{\varphi_{n,n+1}}) e^{i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^< \right) \\
&+ \frac{e}{N\hbar} \left( \sum_n (i\alpha e^{\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-\varphi_{n,n+1}}) e^{-i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\downarrow}^< + \sum_n (i\alpha e^{-\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{\varphi_{n,n+1}}) e^{-i\theta} \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\uparrow}^< \right).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{J}_s \rangle &= \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\downarrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\uparrow}^<) \tau e^{-i\theta} - \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^<) \tau e^{i\theta} \right. \\
&+ \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^<) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&+ \left. \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\uparrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\downarrow}^<) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \sin(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta} \right) \hat{i} \\
&+ \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\downarrow}^< - \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\uparrow}^<) i \tau e^{-i\theta} - \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^< - \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^<) i \tau e^{i\theta} \right. \\
&+ \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^<) \left( \alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&+ \left. \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\uparrow}^< + \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\downarrow}^<) \left( \alpha \sin(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta} \right) \hat{j} \\
&+ \frac{1}{N\hbar} \left( \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\uparrow, \mathbf{n}\uparrow}^< - \mathbf{G}_{\mathbf{n}+1\downarrow, \mathbf{n}\downarrow}^<) \tau e^{-i\theta} \right. \\
&- \left. \sum_n (\mathbf{G}_{\mathbf{n}\uparrow, \mathbf{n}+1\uparrow}^< - \mathbf{G}_{\mathbf{n}\downarrow, \mathbf{n}+1\downarrow}^<) \tau e^{i\theta} \right) \hat{k}.
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Una vez reescritos los valores medios de las densidades de corrientes en términos de las funciones de Green-Keldysh menor, es posible emplear el método de la ecuación de movimiento seguido por la aplicación del límite termodinámico para hallar el valor

de dichas funciones de Green. Después de encontrar las funciones de Green fue posible obtener las expresiones para los promedios de cada par de operadores presentes en los valores medios de las densidades de corrientes.

Al haber reescrito las densidades de corriente apropiadamente en términos de funciones de Green se procedió a emplear la ecuación (3.66) con el fin de obtener la ecuación de movimiento generalizada para el sistema estudiado. Esta ecuación de movimiento correlaciona a un par de operadores de dos sitios atómicos arbitrarios con espines arbitrarios, donde  $\mathbf{A}(t) = \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}$  define el operador de destrucción en el sitio  $\mathbf{k}$  del anillo con espín  $\sigma$  y  $\mathbf{B}(t') = \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger$  define el operador de creación en el sitio  $\mathbf{k}'$  con espín  $\sigma'$ .

Empleando este par de operadores y el Hamiltoniano del sistema, se calculó el anticonmutador ecuación (4.16) y el conmutador ecuación (A.16) (ver apéndice) presente en la ecuación (3.66) mostrándose de ahora en adelante todos los resultados en unidades naturales con  $\hbar = 1$ ,  $e = 1$  y  $k_b = 1$ .

Una vez calculado el conmutador entre el operador  $\mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}$  y el Hamiltoniano del sistema mostrado en la ecuación (A.20) (ver apéndice), se procedió a obtener el anticonmutador de  $\mathbf{A}(t)$  con  $\mathbf{B}(t)$ :

$$\left\{ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}(t), \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t) \right\} = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (4.16)$$

Los términos calculados anteriormente mostrados en las ecuaciones (4.16) y (A.20) (ver apéndice), fueron sustituidos en la ecuación (3.66), lográndose obtener una generalización de la ecuación de movimiento para las funciones de Green-Keldysh presentes en el sistema estudiado:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial}{\partial t} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}',\sigma\sigma'}(t, t') &= \delta(t, t') \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \delta_{\sigma\sigma'} + \epsilon_{\mathbf{k}\uparrow} \delta_{\sigma\uparrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) + \epsilon_{\mathbf{k}\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}\downarrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \\ &+ e^{i\theta} \tau \delta_{\sigma\uparrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) + e^{i\theta} \tau \delta_{\sigma\downarrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \\ &+ e^{-i\theta} \tau \delta_{\sigma\uparrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\uparrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) + e^{-i\theta} \tau \delta_{\sigma\downarrow} \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\downarrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \\ &- \left( \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}-1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} + i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{\mathbf{k}-1,k}} \right) \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \delta_{\sigma\downarrow} \\ &+ \left( \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}+1,k}} + i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{\mathbf{k}+1,k}} \right) \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\uparrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \delta_{\sigma\downarrow} \\ &- \left( \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{\mathbf{k}-1,k}} - i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}+1,k}} \right) \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\downarrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \delta_{\sigma\uparrow} \\ &+ \left( \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{\mathbf{k}-1,k}} - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}-1,k}} \right) \left( -i \langle T_c \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t) \mathbf{c}_{\mathbf{k}'\sigma'}^\dagger(t') \rangle \right) \delta_{\sigma\uparrow}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Una vez obtenida la ecuación de movimiento generalizada del sistema se procedió a calcular las ecuaciones de movimiento relacionadas con la función de Green-Keldysh  $G_{n+1\uparrow, n\uparrow}(t, t')$  presente en la densidad de corriente de carga y de espín:

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{n+1\uparrow}\right)G_{n+1\uparrow, n\uparrow}(t, t') &= e^{i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) + e^{-i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+2\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &+ \left(\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1, n}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &- \left(\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2, n+1}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2, n+1}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+2\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right). \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{n\uparrow}\right)G_{n\uparrow, n\uparrow}(t, t') &= \delta(t, t') + e^{i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n-1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) + e^{-i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &+ \left(\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n-1, n}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n-1, n}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n-1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &- \left(\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1, n}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right). \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{n+2\uparrow}\right)G_{n+2\uparrow, n\uparrow}(t, t') &= e^{i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) + e^{-i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+3\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &+ \left(\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1, n+2}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1, n+2}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &- \left(\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+3, n+2}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+3, n+2}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+3\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right). \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{n\downarrow}\right)G_{n\downarrow, n\uparrow}(t, t') &= e^{i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n-1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) + e^{-i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &+ \left(\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1, n}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &- \left(\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n-1, n}} - i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n-1, n}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n-1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right). \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} \left(i\frac{\partial}{\partial t} - \epsilon_{n+2\downarrow}\right)G_{n+2\downarrow, n\uparrow}(t, t') &= e^{i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) + e^{-i\theta}\tau\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+3\downarrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &+ \left(\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+3, n+2}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+3, n+2}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+3\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right) \\ &- \left(\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2, n+1}} - i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2, n+1}}\right)\left(-i\langle T_c\mathbf{c}_{n+1\uparrow}(t)\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger(t')\rangle\right). \end{aligned} \quad (4.22)$$

Se puede observar a partir de las distintas ecuaciones de movimiento presentadas anteriormente que cada ecuación de movimiento genera cuatro nuevas funciones de Green-Keldysh, esto en general implica que el sistema de ecuaciones de movimiento contiene infinitas funciones de Green, por lo que es necesario establecer condiciones de contorno periódicas sobre el anillo con el fin de obtener un número finito de funciones de Green presentes en las respectivas ecuaciones de movimiento, lo cual se puede lograr mediante la fijación del número de sitios atómicos presentes en el anillo, en el caso particular de un anillo con 2 sitios atómicos la posición  $n$  es equivalente a la posición  $n+2$ , mientras que la posición  $n+1$  es equivalente a la posición  $n-1$  (vea figura 4.1).

### 4.3. Generalización del sistema de ecuaciones de movimiento

En esta sección se generalizaron los sistemas de ecuaciones de movimiento para un número arbitrario de sitios atómicos presentes en el anillo. Para lo que fue necesario obtener los sistemas de ecuaciones para un sistema comprendido por dos sitios atómicos y otro comprendido por tres sitios atómicos.

Empleando las condiciones de periodicidad para dos sitios atómicos como se muestra en la figura 4.1 fue posible escribir las ecuaciones de movimiento relacionadas con las ocho funciones de Green presentes en los valores medios de las densidades de corriente, las cuales se muestran en el apéndice (ecuaciones (A.21)-(A.36)) tras la previa aplicación de la transformada de Fourier sobre estas.

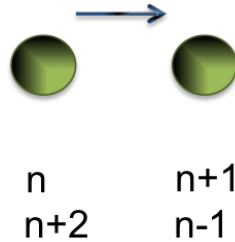


Figura 4.1: Sistema de dos sitios atómicos.

Una vez calculados los grupos de ecuaciones de movimiento para la función de Green-Keldysh  $G_{n+1\uparrow, n\uparrow}(\omega)$  y junto con el uso apropiado de las condiciones de contorno del sistema se pudo notar que en este sistema de ecuaciones también se encuentra la función de Green  $G_{n+1\downarrow, n\uparrow}(\omega)$ . Una vez analizados el resto de los sistemas de ecuaciones se pudo observar que por cada grupo de ecuaciones destinado para el cálculo de una función de Green del sistema, se obtiene otra función de Green adicional, la cual también se encuentra

presente en las respectivas densidades de corriente, disminuyendo de esta forma el número de sistemas de ecuaciones necesarios para hallar las ocho funciones de Green a tan solo cuatro debido a las condiciones de periodicidad (ver figura 4.1) del sistema en general.

Cada función de Green del tipo  $G_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega)$  tiene incluida en su sistema de ecuaciones la función de Green del tipo  $G_{k(-\sigma),k'\sigma'}(\omega)$  donde el signo negativo en la componente de espín indica que este se encuentra invertido respecto a su condición original, lo cual ocurre debido a la naturaleza recursiva de la ecuación de movimiento del sistema, ocasionada por las condiciones de periodicidad en el anillo.

Con la finalidad de obtener una representación para los sistemas de ecuaciones de movimiento y verificar este último resultado, se procedió a estudiar un sistema compuesto por tres sitios atómicos con las condiciones de frontera adecuadas para este, como se muestra en la figura 4.2, obteniéndose los sistemas de ecuaciones de movimiento mostrados en el apéndice (ecuaciones (A.37)-(A.60)) tras la previa aplicación de la transformada de Fourier sobre estas.

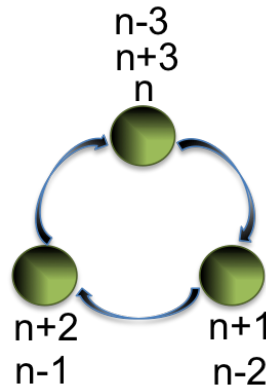


Figura 4.2: Sistema de tres sitios.

En los sistemas de ecuaciones para un anillo compuesto de tres sitios atómicos, se pudo notar al igual que en el caso de dos sitios atómicos, que los sistemas de ecuaciones con funciones de Green del tipo  $G_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega)$  generan a su vez la función de Green  $G_{k(-\sigma),k'\sigma'}(\omega)$  lo cual permite simplificar el número de sistemas de ecuaciones de movimiento de ocho a tan solo cuatro, esto en particular representa un gran ventaja teórica y computacional al momento de resolver los sistemas de ecuaciones de movimiento asociados a cada función de Green presente en las densidades de corriente.

Luego de haber obtenido estos resultados fue posible construir una generalización para los sistemas de ecuaciones de movimiento asociados a un par de funciones de Green-Keldysh del tipo  $G_{k\sigma,k'\sigma'}(\omega)$  y  $G_{k(-\sigma),k'\sigma'}(\omega)$  para un número de sitios atómicos arbitrarios

en el anillo. En esta generalización se resume en una sola ecuación todos los resultados obtenidos para un anillo compuesto de dos y tres sitios atómicos siendo este resultado aplicable para un número arbitrario de sitios<sup>1</sup>:

$$\begin{aligned}
 & \sum_{s1=-1, s1 \neq 0}^{s1=1} \sum_{l=0}^{sitios-1} (\omega - \epsilon_{n+l, s1}) G_{n+l, s1, k, s2}(\omega) - \frac{e^{-it'\omega} \delta_{s1, s2} \delta_{n+l, k}}{\sqrt{2\pi}} \\
 & - e^{-i\theta} t G_{n+l+1, s1, k, s2}(\omega) - e^{i\theta} t G_{n+l-1, s1, k, s2}(\omega) \\
 & + G_{n+l-1, -s1, k, s2}(\omega) (i\alpha e^{i\theta} e^{i(-s1)\varphi_{n+l-1, n+l}} - \beta e^{i\theta} s1 e^{is1\varphi_{n+l-1, n+l}}) \\
 & - G_{n+l+1, -s1, k, s2}(\omega) (i\alpha e^{-i\theta} e^{i(-s1)\varphi_{n+l, n+l+1}} - \beta e^{-i\theta} s1 e^{is1\varphi_{n+l, n+l+1}}) \\
 & = 0
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

## 4.4. Densidad de corriente de carga analítica para diez sitios atómicos

En esta sección se muestran los resultados para la obtención de una expresión algebraica para un anillo compuesto de diez sitios atómicos sin interacción espín-órbita.

Una vez obtenida la generalización para el sistema de ecuaciones de movimiento del sistema, se construyeron dos programas computacionales en el paquete Wolfram Mathematica siendo el primero un programa algebraico y el segundo un programa numérico, con la finalidad de obtener las densidades de corriente de carga y de espín bajo diferentes condiciones teóricas las cuales se mencionaran posteriormente en este capítulo.

Con el fin de obtener una solución algebraica para la densidad de corriente de carga del sistema se procedió a implementar el programa computacional algebraico programado en el paquete Wolfram Mathematica para obtener las funciones de Green de un anillo compuesto por diez sitios atómicos sin impurezas ( $\epsilon_{k, \sigma} = 0$ ), tomando en cuenta sólo la interacción a primeros vecinos y  $t' = 0$ . Esto se realizó con estas condiciones debido a la complejidad del resultado algebraico cuando se encuentran impurezas e interacciones espín-órbita en el sistema. Para ello fue necesario modificar la ecuación (4.23) debido a que la ausencia de interacción espín-órbita obliga a que las funciones de Green del sistema no contengan un espín en particular ( $G_{k, k'}(\omega)$ ) por lo que tomaremos por simplicidad  $s1 = \uparrow$  ( $s1 = 1$ ) y  $s2 = \uparrow$  ( $s2 = 1$ ) en la ecuación (4.23) causando de esta forma que la suma sobre  $s1$  desaparezca. Esto último no implica que las funciones de Green calculadas

---

<sup>1</sup>Los términos en Rojo corresponden a los términos de hopping, los términos en Rosado corresponden a los términos asociados a la interacción espín-órbita tipo Rashba y los términos en Verde corresponden a los términos asociados a la interacción espín-órbita tipo Dresselhaus.

---

contienen un espín en particular, sino es una simplificación computacional en la cual  $G_{k\uparrow,k'\uparrow}(\omega) = G_{k,k'}(\omega)$ .

Por otra parte la densidad de corriente de espín del sistema sin interacciones espín-órbita es cero debido a que esta consta de la diferencia entre funciones de Green con espines opuestos las cuales son equivalentes debido a la degeneración de espín, es decir no hay cambio en el espín. Es por esta razón que solo se calculó la densidad de corriente de carga para el sistema compuesto por diez sitios atómicos, la cual debe ser modificada tomando una sola función de Green por cada término de interacción entre primeros vecinos.

$$J_c(\omega) = \frac{1}{\text{sitios}} \left( \sum_{n=1}^{\text{sitios}-1} (e^{-i\theta} t G_{n+1,n}^< - e^{i\theta} t G_{n,n+1}^<) \right). \quad (4.24)$$

Como se puede observar en la ecuación (4.24), la densidad de corriente está compuesta por dos funciones de Green menor, lo cual limita nuestro problema a implementar la (4.23) solo dos veces, sin embargo, al resolver estos sistemas de ecuaciones y obtener dichas funciones de Green es requerido aplicar el límite termodinámico sobre estas como se muestra en la ecuación (3.74).

Con la finalidad de obtener la función de Green  $G_{n+1,n}$  fue conveniente tomar  $k = n$ ,  $s1 = 1$  y  $s2 = 1$  en la ecuación (4.23) y resolver el sistema de ecuaciones lineal implementando el programa computacional creado obteniéndose el siguiente resultado:

$$G_{n+1,n}(\omega) = \frac{e^{-9i\theta} (-t^9 - e^{10i\theta} t (t^8 - 10t^6 w^2 + 15t^4 w^4 - 7t^2 w^6 + w^8))}{\sqrt{2\pi} (2t^{10} \cos(10\theta) + (2t^2 - w^2) (t^8 - 12t^6 w^2 + 19t^4 w^4 - 8t^2 w^6 + w^8))}. \quad (4.25)$$

Se puede notar que esta función de Green está compuesta por el cociente entre dos polinomios en la variable  $\omega$ , por lo que podemos tratar de simplificar la misma implementando el método de fracciones simples. El primer paso fue encontrar las raíces del polinomio presentes en el denominador de la función de Green, con el objetivo de factorizar el mismo en función de las raíces obtenidas las cuales se muestran en el apéndice (ver ecuaciones (A.61)-(A.70)). Por otra parte los términos presentes en el polinomio del numerador fueron renombrados y se muestran en las ecuaciones (A.71)-(A.75). Obteniéndose el siguiente resultado:

$$G_{n+1,n}(\omega) = \frac{b1 + b2\omega^2 + b3\omega^4 + b4\omega^6 + b5\omega^8}{(\omega - a1)(\omega - a10)(\omega - a2)(\omega - a3)(\omega - a4)(\omega - a5)(\omega - a6)(\omega - a7)(\omega - a8)(\omega - a9)}. \quad (4.26)$$

Empleando la técnica de las fracciones simples tenemos<sup>2</sup>

$$G_{n+1,n}(\omega) = \sum_{i=1}^{10} f_i \frac{1}{\omega - a_i}. \quad (4.27)$$

Debido a que la función de Green-Keldysh obtenida contiene la función de Green mayor y menor en su interior, requerimos convertir la función de Green obtenida previamente (ecuación (4.27)) en la función de Green avanzada y retardada del sistema, para ello se realizaron los siguientes intercambios sobre la función de Green respectivamente  $\omega \rightarrow \omega - i\eta$  y  $\omega \rightarrow \omega + i\eta$  donde  $\eta$  tiende a  $0^+$  con el objetivo obtener la función de Green menor  $G_{n+1,n}^<(\omega)$ .

Empleando el intercambio mencionado anteriormente se obtuvo finalmente que la función de Green avanzada (signo superior) y retardada (signo inferior) la cual viene dada por:

$$G_{n+1,n}^{(a),(r)}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{i=1}^{10} f_i \frac{1}{\omega \mp i\eta - a_i}. \quad (4.28)$$

Para obtener el límite termodinámico de la función de Green obtenida como se muestra en la ecuación (3.74), es requerido calcular la diferencia entre la función de Green avanzada y retardada:

$$G_{n+1,n}^{(a)}(\omega) - G_{n+1,n}^{(r)}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} 2i \sum_{i=1}^{10} f_i \frac{\eta}{(\omega - a_i)^2 + \eta^2}. \quad (4.29)$$

Usando la siguiente definición de la delta de Dirac [18]  $\pi\delta(x - x_0) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{(x - x_0)^2 + \eta^2}$  podemos escribir la ecuación anterior de la siguiente manera:

$$G_{n+1,n}^{(a)}(\omega) - G_{n+1,n}^{(r)} = 2i\pi \sum_{i=1}^{10} f_i \delta(\omega - a_i). \quad (4.30)$$

Finalmente tras hacer pleno uso de la ecuación (3.74), la función de Green menor  $G_{n+1,n}^<(\omega)$  viene dada por:

$$G_{n+1,n}^<(\omega) = 2i\pi \frac{\sum_{i=1}^{10} f_i \delta(\omega - a_i)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (4.31)$$

Tras obtener la función de Green menor  $G_{n+1,n}^<(\omega)$ , se procedió a calcular la función de Green menor  $G_{n,n+1}^<(\omega)$  siguiendo el mismo esquema mencionado anteriormente donde fue necesario realizar los siguientes intercambios en la ecuación (4.23)  $k = n + 1$ ,  $s_1 = 1$  y  $s_2 = 1$ .

---

<sup>2</sup> Los coeficientes  $f_i$  se muestran en las ecuaciones (A.76)-(A.85) del apéndice

La función de Green  $G_{n,n+1}$  obtenida viene dada por:

$$G_{n,n+1}(\omega) = \frac{e^{-i\theta} t \left( (1 + e^{10i\theta}) t^8 - 10t^6 w^2 + 15t^4 w^4 - 7t^2 w^6 + w^8 \right)}{\sqrt{2\pi} (2t^{10} \cos(10\theta) + (2t^2 - w^2) (t^8 - 12t^6 w^2 + 19t^4 w^4 - 8t^2 w^6 + w^8))}. \quad (4.32)$$

Para usar el método de las fracciones simples se encontraron las raíces del polinomio en el denominador las cuales se muestran en las ecuaciones (A.86)-(A.95) del apéndice y los coeficientes del polinomio en el numerador los cuales se muestran en las ecuaciones (A.96)-(A.100) del apéndice, empelando estos cambios se pudo escribir la función de Green de la siguiente manera:

$$G_{n,n+1}(\omega) = \frac{b1 + b2\omega^2 + b3\omega^4 + b4\omega^6 + b5\omega^8}{(\omega - a1)(\omega - a10)(\omega - a2)(\omega - a3)(\omega - a4)(\omega - a5)(\omega - a6)(\omega - a7)(\omega - a8)(\omega - a9)}. \quad (4.33)$$

Empleando la técnica de las fracciones simples tenemos el siguiente resultado <sup>3</sup>:

$$G_{n,n+1}(\omega) = \sum_{i=1}^{10} g_i \frac{1}{\omega - a_i}. \quad (4.34)$$

Realizando los intercambios mencionados en el procedimiento previo obtenemos que la función de Green avanzada (signo superior) retardada (signo inferior) viene dada por:

$$G_{n,n+1}^{(a),(r)}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{i=1}^{10} g_i \frac{1}{\omega \mp i\eta - a_i}. \quad (4.35)$$

donde:

$$G_{n,n+1}^{(a)}(\omega) - G_{n,n+1}^{(r)}(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} 2i \sum_{n=1}^{10} g_i \frac{\eta}{(\omega - a_i)^2 + \eta^2}. \quad (4.36)$$

Usando la definición de la delta de Dirac  $\pi\delta(x - x_0) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\eta}{(x - x_0)^2 + \eta^2}$  obtenemos que:

$$G_{n,n+1}^{(a)}(\omega) - G_{n,n+1}^{(r)}(\omega) = 2i\pi \sum_{i=1}^{10} g_i \delta(\omega - a_i). \quad (4.37)$$

---

<sup>3</sup>Los coeficientes  $g_i$  se muestran en las ecuaciones (A.101)-(A.110) del apéndice

---

Finalmente la función de Green menor  $G_{n,n+1}^<(\omega)$  viene dada por:

$$G_{n,n+1}^<(\omega) = 2i\pi \frac{\sum_{i=1}^{10} g_i \delta(\omega - a_i)}{e^{\beta\omega} + 1}. \quad (4.38)$$

Usando la función de Green anterior  $G_{n,n+1}^<(\omega)$  y la función de Green  $G_{n+1,n}^<(\omega)$  se pudo escribir la densidad de corriente de carga para 10 sitios atómicos sin interacción espín-órbita e impurezas de la siguiente manera:

$$J_c(\omega) = \frac{1}{10} \left( \sum_{n=1}^9 (e^{-i\theta} t G_{n+1,n}^< - e^{i\theta} t G_{n,n+1}^<) \right). \quad (4.39)$$

$$J_c(\omega) = \frac{1}{10} \frac{2i\pi}{e^{\beta\omega} + 1} \left( \sum_{n=1}^9 \left( e^{-i\theta} t \left( \sum_{k=1}^{10} f_k \delta(\omega - a_k) \right) - e^{i\theta} t \left( \sum_{k=1}^{10} g_k \delta(\omega - a_k) \right) \right) \right). \quad (4.40)$$

En este resultado se puede notar que los autovalores presentes en las deltas de Dirac son equivalentes para ambas funciones de Green. Estos autovalores representan las autoenergías del anillo tal y como fue reportado por Maiti y colaboradores [5].

Por otra parte en los resultados numéricos de Maiti para la densidad de corriente de carga para un anillo de veinte sitios atómicos figura 2.2-a, se muestran un conjunto de picos delgados como se obtuvo en el resultado (4.40). Adicionalmente se puede observar también que esta última curva contiene un número equivalente de picos como sitios presentes en el anillo (caso sin interacción espín-órbita), esto también se observa en nuestros resultados teóricos, obteniéndose diez picos asociados a los diez autovalores del anillo, sin embargo, en nuestro caso las intensidades relativas de estos no tienen por que ser similares ya que las mismas dependen intrínsecamente de los coeficientes  $f_i$  y  $g_i$ .

## 4.5. Densidades de corriente para un anillo de veinte sitios atómicos

En esta sección se muestran los resultados numéricos calculados para las densidades de corriente de carga y espín para un anillo de veinte sitios atómicos tanto para el caso libre como en presencia del acoplamiento espín-órbita.

Una vez obtenido el resultado algebraico para la densidad de corriente de un anillo conformado por diez sitios atómicos, se empleó el programa numérico creado en el paquete Wolfram Mathematica basado en la ecuación (4.23) con el fin de obtener las densidades de corriente de carga y de espín para un anillo mesoscópico que contiene veinte sitios atómicos, en el cual se toman en cuenta efectos espín-órbita del tipo Rashba y Dresselhaus.

---

Los parámetros típicos para estos efectos encontrados en la literatura [5] los cuales son  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0,3$  y  $t = 2,5$  [23] para el parámetro de hopping tomando inicialmente un flujo de Aharonov-Bohm de  $\phi = 0,25$  y una temperatura  $T = 0,1 K$ .

Por otra parte otro parámetro empleado sobre el programa fue  $\eta = 1 \times 10^{-3}$  siendo este el límite computacional óptimo para aproximar a  $\eta \rightarrow 0+$ . Este último parámetro es necesario para la obtención de las funciones de Green menor del sistema y evitar los polos de la función de Green, lo cual es necesario para obtener las densidades de corriente en el sistema. Adicionalmente el tamaño del paso para las frecuencias evaluadas fue de  $\omega = 0,001$  tomando un intervalo de frecuencias para  $\omega \in [-5, 5]$ .

Los resultados obtenidos para las densidades de corriente de carga y de espín se muestran a continuación en las figuras 4.3 y 4.4 respectivamente:

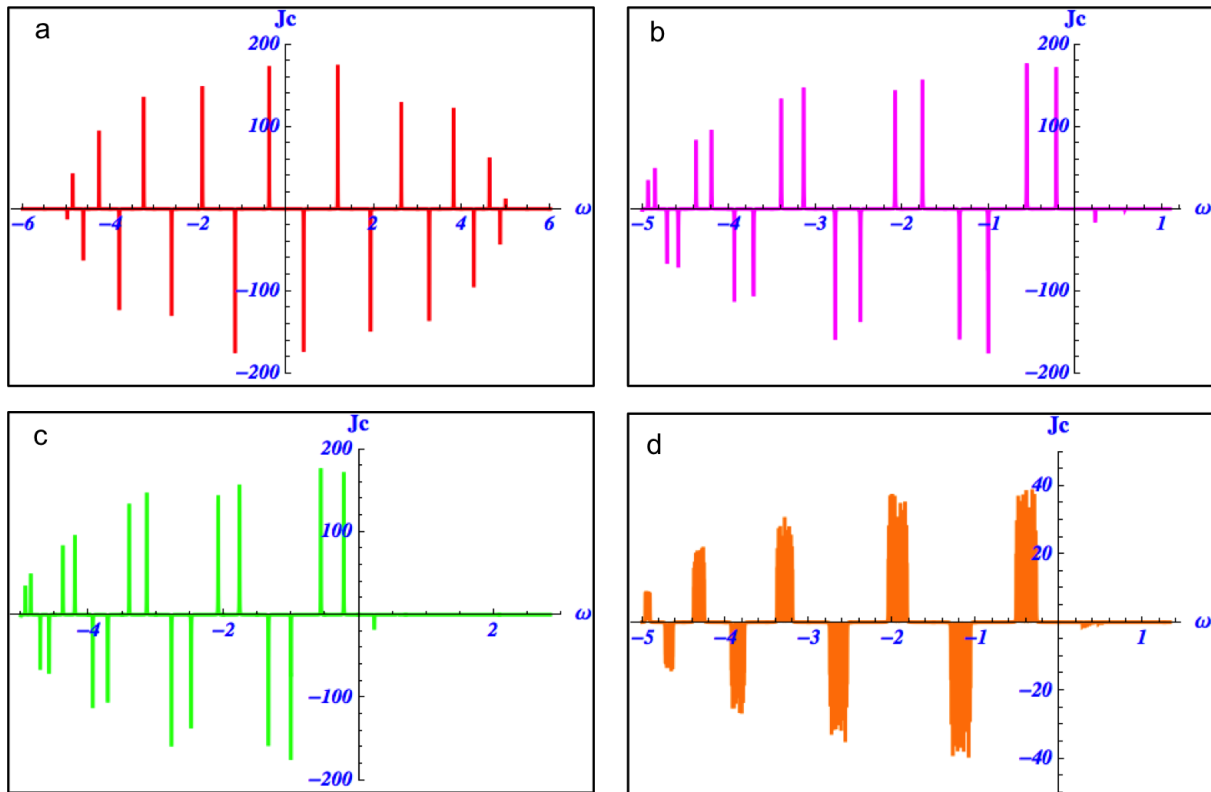


Figura 4.3: Densidad de corriente persistente de carga en función de la energía para un anillo de 20 sitios con  $\phi = 0,25$ , donde (a)  $\alpha = \beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (c)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,3$ , (d)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0,3$ .

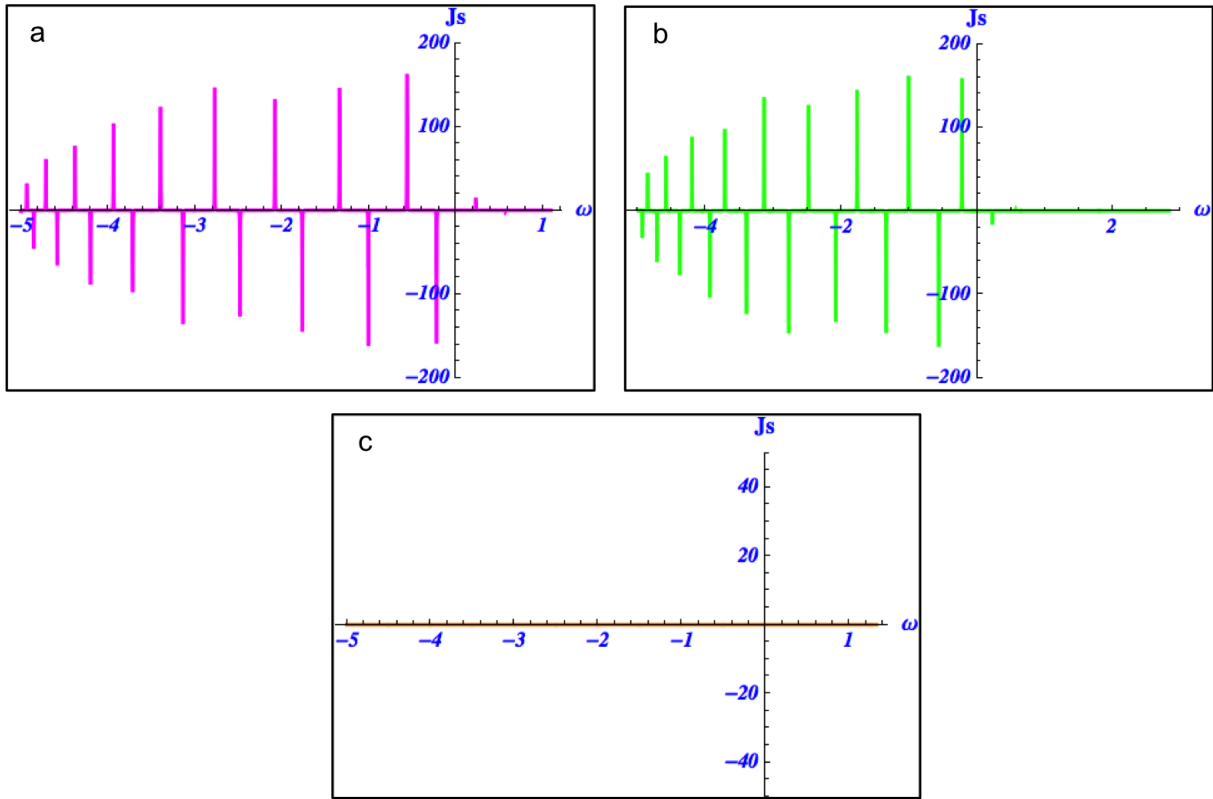


Figura 4.4: Densidad de corriente persistente de espín en función de la energía para un anillo de 20 sitios con  $\phi = 0,25$ , donde (a)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,3$ , (c)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0,3$ .

En la figura 4.3-a podemos observar los resultados obtenidos para la densidad de corriente de carga sin interacción espín-órbita para un parámetro de hopping con  $t = 2,5$  y un flujo de Aharonov-Bohm con  $\phi = 0,25$ . En esta curva se pueden observar diversos picos asociados a las autoenergías del anillo de veinte sitios tal como es de esperarse respecto a los resultados teóricos obtenidos previamente mostrados en la ecuación (4.40). Al comparar este resultado con los resultados expuestos por Maiti y colaboradores [5] mostrados en la figura 2.2 podemos observar que los resultados obtenidos son consistentes con estos últimos observándose un total de veinte picos, lo cual es también sugerido por los resultados teóricos obtenidos en la sección previa para un anillo compuesto por diez sitios atómicos (ecuación (4.40)) con intensidades similares a las obtenidas por estos investigadores. Sin embargo, los resultados difieren cuando son comparadas las autoenergías de nuestro sistema con las obtenidas por Maiti y colaboradores, esto podría estar asociado a que el parámetro de hopping empleado por estos últimos no es el mismo que el empleado por nosotros en este trabajo, debido a que estos investigadores no mencionaron la magnitud de este parámetro en [5].

En las figuras 4.3-b, 4.3-c y 4.3-d se muestran las densidades de corriente de carga para un anillo de veinte sitios atómicos, cuando este último se encuentra bajo los efectos de interacciones espín-órbita. En las figuras 4.3-b y 4.3-c se muestran los resultados obtenidos para la densidad de corriente de carga cuando un solo tipo de interacción espín-órbita se encuentra sobre el anillo, siendo esta interacción espín-órbita tipo Dresselhaus y tipo Rashba respectivamente. Se observa claramente un desdoblamiento en los autoestados del anillo cada uno asociado a un tipo particular de espín, detallándose un total de veinte picos para los estados con energías negativas ( $\omega < 0$ ) y dos picos para los estados con energías positivas ( $\omega > 0$ ) esto último no fue observado por Maiti y colaboradores en [5]. Esta significativa diferencia puede estar asociada al hecho de que las funciones de Green empleadas por estos investigadores parecen ser funciones de Green para un gas de electrones libres las cuales no se encuentran pesadas por la densidad de estados del sistema.

En nuestro caso particular las funciones de Green obtenidas contienen diversas correlaciones asociadas a los efectos de los acoplamientos espín-órbita presentes, obteniéndose pesos de menor magnitud para las deltas de Dirac relacionadas con los autovalores de los estados con energía negativa del sistema. Adicionalmente se puede observar que las densidades de corriente de carga en las figuras 4.3-b y 4.3-c presentan la misma forma y localización de sus picos, esto último también se encuentra en concordancia con los resultados obtenidos por Maiti y colaboradores (ver figura 2.2) por lo que se puede justificar que nuestros resultados describen apropiadamente el sistema físico estudiado.

En la figura 4.3-d se muestra la densidad de corriente de carga cuando ambas interacciones espín-órbita están presentes en el sistema observándose, que esta densidad de corriente contiene un número superior de autoenergías en comparación con los resultados previos discutidos. Obteniéndose en lugar de autoestados discretos un conjunto de bandas, debido a que el efecto espín-órbita adicional crea un conjunto nuevo de desdoblamientos en energías. Sin embargo, este último resultado mencionado no interfiere con la localización de los picos en las densidades de corriente de carga cuando estos son comparados con un sistema que se encuentra bajo un solo tipo de interacción espín-órbita. Adicionalmente cabe resaltar que este resultado no fue mostrado por Maiti y colaboradores en [5].

Una vez discutidas las curvas asociadas a las densidades de corriente de carga procederemos a discutir la densidades de corriente de espín. En la figura 4.4 se muestran las densidades de corriente de espín para el anillo con veinte sitios atómicos y un flujo de Aharonov-Bohm de  $\phi = 0,25$ . En las curvas 4.4-a y 4.4-b se muestran las densidades de corriente de espín cuando un solo tipo de interacción espín-órbita (Dresselhaus y Rashba respectivamente) se encuentra sobre el anillo. Observándose al igual que en las densidades de corriente de carga un desdoblamiento en los niveles de energía debido al efecto espín-

órbita, sin embargo, el desdoblamiento en esta última no ocurre de manera simétrica sino antisimétrica estando un pico opuesto al otro y con intensidades menores que las densidades de corriente de carga. Adicionalmente a esto se puede notar que existe un cambio de signo en los picos presentes en la densidad de corriente cuando son comparados los gráficos 4.4-a y 4.4-b. Este efecto también fue observado por Maiti et al. en [5] donde se estudiaron densidades de corriente para un sistema de dieciséis sitios atómicos.

A este punto un resultado que llama la atención es el por qué ocurre una inversión en las densidades de corriente de espín y no ocurre una inversión en las densidades de corriente de carga cuando un solo tipo de interacción espín-órbita se encuentra sobre el anillo. Esto último puede ser explicado de la siguiente manera:

El Hamiltoniano de Rashba y el de Dresselhaus están relacionados el uno con el otro mediante la transformación de similaridad unitaria  $\mathbf{H}_D = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H}_R \mathbf{U}$ , siendo el operador unitario  $\mathbf{U} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\boldsymbol{\sigma}_x + \boldsymbol{\sigma}_y)$  donde los autoestados del Hamiltoniano de Dresselhaus pueden ser escritos en función de los autoestados del Hamiltoniano de Rashba de la siguiente forma  $|M_D\rangle = \mathbf{U} |M_R\rangle$ . A partir de esta transformación unitaria se puede notar que podemos describir la corriente de espín con solo interacción espín-órbita del tipo Dresselhaus en función de la densidad de corriente de espín con solo interacción espín-órbita del tipo Rashba la cual viene dada por [5]:

$$\begin{aligned}
 \langle \mathbf{J}_s \rangle_D &= \langle M_D | \mathbf{J}_s | M_D \rangle \\
 &= \langle M_R | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{J}_s \mathbf{U} | M_R \rangle \\
 &= \langle M_R | \mathbf{U}^\dagger \frac{1}{2N} \{ \boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{v} \} \mathbf{U} | M_R \rangle \\
 &= \langle M_R | -\frac{1}{2N} \{ \boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{v} \} | M_R \rangle \\
 &= -\langle \mathbf{J}_s \rangle_R
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

Este último resultado muestra claramente que la densidad de corriente de espín del tipo Dresselhaus debe tener signo opuesto y magnitud idéntica en comparación con la densidad de corriente de espín con solo interacción espín-órbita del tipo Rashba, esto como consecuencia de que las mismas se encuentran relacionadas por medio una transformación de similaridad unitaria y que el operador densidad de corriente de espín no conmuta con dicha transformación unitaria. Con el fin de justificar por qué no hay inversión en las densidades de corriente de carga se procedió a implementar un procedimiento similar al caso anterior obteniendo los siguiente:

---

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{J}_c \rangle_D &= \langle M_D | \mathbf{J}_c | M_D \rangle \\
&= \langle M_R | \mathbf{U}^\dagger \mathbf{J}_c \mathbf{U} | M_R \rangle \\
&= \langle M_R | \mathbf{U}^\dagger \frac{e}{N} \mathbf{v} \mathbf{U} | M_R \rangle \\
&= \langle M_R | \frac{e}{N} \mathbf{v} | M_R \rangle \\
&= \langle \mathbf{J}_c \rangle_R
\end{aligned} \tag{4.42}$$

En esta última expresión se puede notar que el signo de la densidad de corriente de carga no cambia al pasar de un sistema con solo interacción espín-órbita del tipo Dresselhaus a otro con solo interacción espín-órbita del tipo Rashba al igual que su intensidad, lo cual se observa con claridad en la figura 4.3. Esto a consecuencia directa de que el operador densidad de corriente de carga conmuta con las matrices de Pauli presentes en el operador de transformación unitaria  $\mathbf{U}$ .

Una vez explicada la razón de la inversión de las densidades de corriente de espín cuando un solo tipo de interacción espín-órbita se encuentra presente sobre el anillo (Resultado explicado por Maiti en [5]), se mostrarán los resultados obtenidos para la densidad de corriente de espín cuando ambos efectos espín-órbita se encuentran simultáneamente sobre el sistema. En la figura 4.4-c se observa que cuando ambos efectos espín-órbita se encuentran sobre el anillo la densidad de corriente de espín es aproximadamente cero, esto es consecuencia directa de la inversión que ocurre en los picos de la densidad de corriente cuando se pasa de un efecto espín-órbita a otro, esto también fue notado por Maiti y colaboradores para un anillo conformado por dieciséis sitios atómicos el cual se muestra en la figura 4.3 esto demuestra efectivamente que la inversión de los picos en las densidades de corriente de espín se encuentra relacionada con la simetría del Hamiltoniano y/o la definición empleada para el operador densidad de corriente de espín (ver ecuación (3.6)) y no con el formalismo de funciones de Green implementado.

## 4.6. Corrientes persistentes para un anillo de veinte sitios atómicos

En esta sección se muestran los resultados obtenidos para las corrientes persistentes de carga y de espín obtenidas en función de las densidades de corriente explicadas en la sección anterior.

Largo de obtener las densidades de corriente de carga y de espín para un anillo de veinte sitios atómicos con los parámetros mencionados anteriormente, se procedió a calcular las corrientes persistentes de carga y de espín empleando las ecuaciones (3.17) y (3.21) respectivamente, tomando el potencial químico del sistema  $\mu = 0$  tal y como hicieron

Maiti y colaboradores en su artículo [5]. Tras la obtención de las corrientes persistentes correspondientes en función de un flujo de Aharonov-Bohm  $\phi \in [-1, 1]$ , las mismas fueron graficadas y se muestran a continuación en las figuras 4.5 y 4.6.

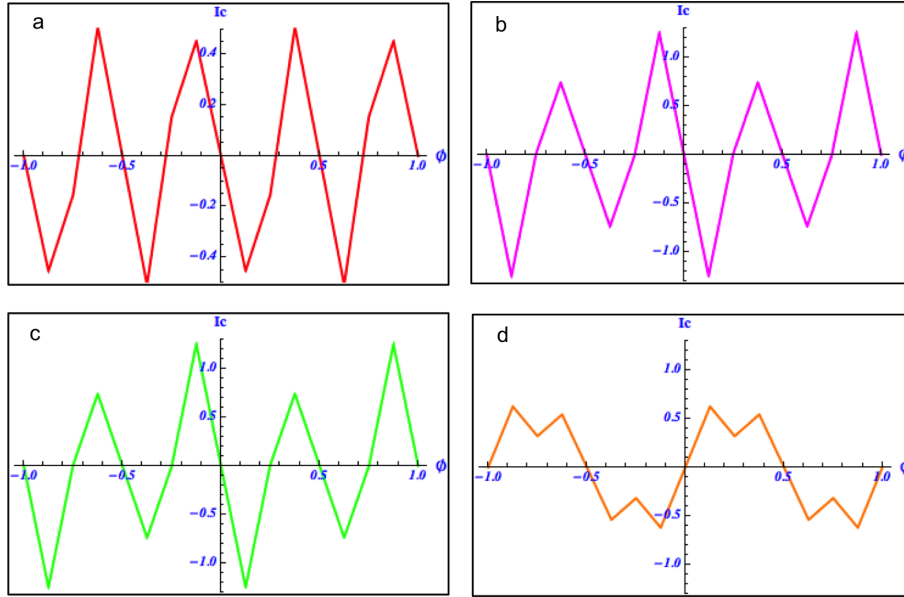


Figura 4.5: Corriente persistente de carga en función del flujo para un anillo de 20 sitios, donde (a)  $\alpha = \beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (c)  $\alpha = 0$  y  $\beta = 0,3$  (d)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0,3$ .

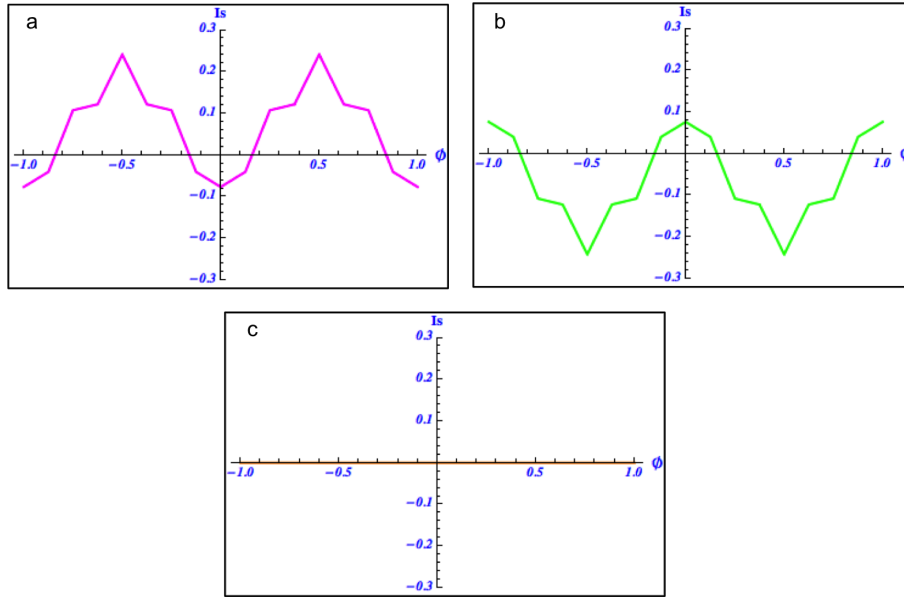


Figura 4.6: Corriente persistente de espín en función del flujo para un anillo de 20 sitios, donde (a)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (b)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0$ , (c)  $\alpha = 0,3$  y  $\beta = 0,3$ .

En la figura 4.5 se puede observar los resultados obtenidos para las corrientes persistentes de carga para un flujo de Aharonov-Bohm  $\phi \in [-1, 1]$ . Notándose un comportamiento sinusoidal muy similar al comportamiento observado por Maiti y colaboradores en [5], el cual se muestra en la figura 2.3, sin embargo, estos investigadores no mostraron la corriente persistente de carga para un anillo sin interacción espín-órbita. El comportamiento oscilatorio en el flujo se debe a que la corriente está modulada por las variaciones en la energía, donde las mismas son periódicas debido a la periodicidad del anillo[24].

A partir de los cálculos realizados en este trabajo, se logró calcular las corrientes persistentes de carga de un anillo de veinte sitios atómicos sin interacción espín-órbita resultado que se muestra en la figura 4.5-a, observándose un comportamiento sinusoidal en donde todos los picos presentes en esta tienen intensidades similares.

Al comparar la curva anterior con las curvas 4.5-b y 4.5-c las cuales corresponden a las corrientes persistentes de carga cuando el sistema presenta un solo tipo de interacción espín-órbita se puede observar que las curvas comparadas tienen la misma forma (signo) respecto a las que no contienen interacciones espín-órbita (figura 4.5-a), siendo menor la intensidad de la corriente persistente de carga para el sistema libre respecto a las que contienen un solo tipo de interacción espín-órbita, lo cual muestra el papel fundamental que estos efectos tienen sobre las corrientes persistentes de carga en sólidos semiconductores.

Por otra parte al comparar las corrientes persistentes de carga cuando solo un efecto espín-órbita se encuentra presente sobre el anillo figura 4.5-b y 4.5-c se puede notar que estas presentan una gran semejanza entre sí, como se observó en el caso de las densidades de corriente de carga (figura 4.3), teniendo la misma forma y magnitudes similares.

De esto se puede observar que ambas curvas contienen dos máximos, siendo uno relativo y el otro absoluto, los cuales se encuentran localizados para los flujos (-0.625 y 0.375) y (-0.125 y 1) respectivamente. Resultados que son consistentes con los mostrados por Maiti y colaboradores en la figura 2.3.

En la figura 4.5-d se muestran las corrientes persistentes de carga cuando ambos efectos espín-órbita se encuentran simultáneamente sobre el anillo, en esta se distingue que la corriente persistente de carga tiene un comportamiento sinusoidal al igual que las curvas mostradas previamente en esta sección, incorporando a esto una modificación en el período de oscilación de la misma y una intensidad similar comparable a la corriente cuando estos efectos no se encuentran sobre el anillo, hecho que muestra que la presencia de ambos efectos espín-órbita modifican apreciablemente las corrientes persistentes de carga en el sistema al punto de que estas no pueden ser diferenciadas respecto a las corrientes presentes en un sistema sin interacción espín-órbita cuando se comparan solamente las intensidades.

---

Una vez discutidas las curvas relacionadas con las corrientes persistentes de carga del sistema se procederá a analizar las corrientes persistentes de espín para un flujo de Aharanov-Bohm  $\phi \in [-1, 1]$ , las cuales se muestran en la figura 4.6.

En las figuras 4.6-a y 4.6-b se muestran las corrientes persistentes de espín cuando un solo efecto espín-órbita se encuentra presente sobre el anillo observándose que estas presentan un comportamiento sinusoidal (desfasada respecto a la anterior) y al igual que en las densidades de corriente de espín (figura 4.4) estas se encuentran invertidas una respecto a otra con intensidades que presentan módulo inferior a las corrientes persistentes de carga discutidas previamente. Se puede detallar que el máximo y mínimo absoluto de estas corrientes se encuentran para los flujos (-0.5 y 0.5) resultado consistente con los obtenidos por Maiti y colaboradores en [5].

Por otra parte en la figura 4.6-c se muestra la corriente persistente de espín cuando ambas interacciones espín-órbita se encuentran presentes en el anillo, apreciándose que esta es cero para todo el rango de flujos estudiados. Esta conclusión también fue obtenida por Maiti y colaboradores en [5], este efecto ocurre como consecuencia directa de la inversión de signo presente cuando se cambia de un tipo de interacción espín-órbita a otro.

Este último resultado es el más importante de este trabajo especial de grado ya que se pudo demostrar que empleando el modelo asociado con el Hamiltoniano (2.1) y la técnica de la ecuación de movimiento para hallar las funciones de Green-Keldysh para la determinación de las corrientes persistentes del anillo, fue posible obtener que bajo este nivel de aproximación las corrientes persistentes de espín se anulan cuando están presente ambos tipos de interacción espín-órbita en igual magnitud sobre el anillo.

---



# Capítulo 5

## Conclusiones

1. En este trabajo especial de grado fue posible a partir del Hamiltoniano (2.1) reproducir los operadores densidad de corriente de carga y densidad de corriente de espín obtenidos por Maiti y colaboradores en [5]. Adicionalmente, se pudo obtener dos componentes extras para el operador densidad de corriente de espín las cuales no fueron derivadas por estos estos investigadores.
  2. Empleando el Hamiltoniano (2.1) se logró obtener una expresión generalizada para la ecuación de movimiento de las funciones de Green-Keldysh de dos pares de operadores de creación y aniquilación ubicados en dos sitios arbitrarios del anillo con espines arbitrarios.
  3. Al emplear las condiciones de contorno adecuadas para un anillo compuesto por dos y tres sitios atómicos, se logró obtener una generalización para los sistemas de ecuaciones de movimiento para cualquier función de Green-Keldysh presente en las densidades de corriente del tipo  $G_{k\sigma,k'\sigma'}$  en la representación de las frecuencias.
  4. Empleando la generalización obtenida para los sistemas de ecuaciones de movimiento y un programa desarrollado en el paquete Mathematica se obtuvieron las funciones de Green-Keldysh presentes en la densidad de corriente de carga para un anillo compuesto de diez sitios atómicos sin interacción espín-órbita, las cuales fueron llevadas al equilibrio termodinámico obteniéndose, una expresión analítica para el valor medio de la densidad de corriente carga notándose que el número de autoenergías presentes en el anillo es equivalente al número de sitios atómicos presentes en este.
  5. Al hacer uso de la generalización de los sistemas de ecuaciones de movimiento y un programa en el paquete Mathematica pero en esta ocasión de carácter numérico, fue posible obtener las densidades de corriente de carga y espín así como también las corrientes persistentes de carga y espín para un anillo compuesto por veinte sitios atómicos con y sin interacción espín-órbita empleando los parámetros  $t = 2,5$ ;
-

$\alpha = 0,3$ ;  $\beta = 0,3$ ;  $\eta = 1 \times 10^{-3}$  un tamaño de paso de  $\omega = 0,001$  un flujo de Aharanov-Bohm  $\phi \in [-1, 1]$  y una temperatura de 0,1 K.

6. Respecto a las densidades de corriente de carga, se puede concluir que la presencia de efectos espín-órbita sobre el anillo causa un desdoblamiento de los niveles de energía por consecuencia del desdoblamiento de espín. Ocasionando la aparición del doble de picos presentes en las densidades de corriente de carga cuando estas son comparadas con las densidades sin interacción espín-órbita. Por otra parte cuando ambos efectos espín-órbita se encuentra sobre el anillo, el número de picos en la densidad de corriente aumenta considerablemente observándose bandas en distintas regiones de energía.
  7. Las densidades de corriente de espín sufren una inversión de signo cuando estas son pasadas de un anillo con interacción espín-órbita del tipo Rashba al tipo Dresselhaus. Notándose que cuando ambas interacciones se encuentran simultáneamente sobre el anillo las densidades de corriente de espín se anulan.
  8. En referencia las corrientes persistentes de cargas estas se muestran en concordancia con los resultado obtenidos por Maiti y colaboradores en [23] observándose que las corrientes persistentes de carga mantienen la misma forma cuando son pasadas de un tipo de interacción espín-órbita a otro manteniendo la misma orientación y período, siendo sus máximos más intensos que los localizados en la corriente persistente de carga sin interacciones espín-órbita. Cuando ambos efectos espín-órbita se encuentran simultáneamente sobre el anillo la corriente persistente de carga presenta un período de oscilación diferente comparado con un sistema con un solo tipo de interacción espín-órbita teniendo una intensidad similar a la corriente persistente de carga sin interacción espín-órbita.
  9. En relación a las corrientes persistentes de espín se pudo notar que los resultados obtenidos en este trabajo especial de grado son consistentes con los obtenidos por Maiti y colaboradores en [5], observándose que dichas corrientes presentan una inversión cuando se pasa de un tipo de interacción espín-órbita a otro resultado relacionado con las densidades de corriente de espín. Por otra parte, cuando ambas interacciones espín-órbita se encuentran sobre el anillo la corriente persistente de espín se anula resultado que puede ser empleado para caracterizar la magnitud del parámetro de interacción espín-órbita tipo Dresselhaus en materiales semiconductores.
  10. Por último se puede concluir que la técnica de la ecuación de movimiento para la determinación de las funciones de Green-Keldysh es un método práctico y versátil para el cálculo de las funciones de Green del sistema físico estudiado, por lo que es recomendado emplear la misma en otro tipo de sistemas como es el caso de los anillos de Grafeno.
-



# Apéndice A

## Apéndice

### A.1. Operador densidad de corriente de carga y de espín

#### A.1.1. Hamiltoniano en forma matricial

$$\begin{aligned}
\mathbf{H}_{RD} = & \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \epsilon_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \epsilon_{n\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \tau e^{i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \tau e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \cos \varphi_{n,n+1} e^{-i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \text{sen } \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \text{sen } \varphi_{n,n+1} e^{-i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \cos \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \cos \varphi_{n,n+1} e^{-i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \text{sen } \varphi_{n,n+1} e^{i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& - \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \text{sen } \varphi_{n,n+1} e^{-i\theta} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{A.1}$$

## A.1.2. Cálculo del conmutador (4.8)

$$[\mathbf{H}_o, \mathbf{x}] = 0. \quad (\text{A.2})$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_h, \mathbf{x}] &= \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\ &\quad - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_R, \mathbf{x}] &= \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ &\quad + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_D, \mathbf{x}] &= \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ &\quad + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Una vez obtenidos los resultados anteriores el siguiente paso fue sumar los conmutadores calculados en el paso anterior para obtener que  $[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]$  tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] &= \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ &\quad + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ &\quad + \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ &\quad + \sum_n (i\alpha e^{i\varphi_{n,n+1}} + \beta e^{-i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n (i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}} - \beta e^{i\varphi_{n,n+1}}) \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

### A.1.3. Cálculo del anticonmutador (4.10)

$$\begin{aligned}
[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] &= \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \tau e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
&- \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} \tau e^{i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{A.7}$$

En esta última (ecuación (A.7)) se muestra el conmutador (A.6) escrito en su forma matricial. A continuación se muestra el procedimiento realizado para el cálculo de la componente  $\hat{z}$  del anticonmutador (4.10):

$$\{\sigma_z, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} = \sigma_z [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \sigma_z. \tag{A.8}$$

$$\begin{aligned}
\sigma_z [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] &= \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
&- \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau e^{i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
&+ \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{A.9}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \boldsymbol{\sigma}_z = & \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{-i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& - \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tau e^{i\theta} & 0 \\ 0 & \tau e^{i\theta} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha & 0 \\ 0 & \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & i e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \\
& + \sum_n \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} & 0 \\ 0 & -e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{A.10}$$

Tras realizar las operaciones matriciales correspondientes sobre las ecuaciones (A.9) y (A.10), las mismas toman la forma que se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}
\sigma_z [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] = & \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger i \alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger i \alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger i \alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger i \alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\
& - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\
& - \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}.
\end{aligned} \tag{A.11}$$

$$\begin{aligned}
[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] \boldsymbol{\sigma}_z = & \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} - \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow} \\
& - \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger i \alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger i \alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\
& - \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger i \alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger i \alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\downarrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n\uparrow} \\
& + \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} \mathbf{c}_{n+1\downarrow}.
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Sustituyendo las ecuaciones (A.11) y (A.12) en (A.8), obtenemos que el anticonmutador (A.8) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\{\sigma_z, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} &= \sigma_z[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\sigma_z \\
&= 2 \sum_n \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - 2 \sum_n \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\
&\quad - 2 \sum_n \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\uparrow} + 2 \sum_n \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{n\downarrow}.
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Finalmente siguiendo el procedimiento mostrado previamente fue posible calcular el resto de los términos que conforman la ecuación (4.10) obteniendo los siguientes resultados:

$$\begin{aligned}
\{\sigma_x, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} &= \sigma_x[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\sigma_x \\
&= 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \tau e^{-i\theta} - 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \tau e^{i\theta} \\
&\quad + 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \operatorname{sen}(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&\quad + 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \left( \alpha \cos(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \operatorname{sen}(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta}.
\end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned}
\{\sigma_y, [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\} &= \sigma_y[\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}] + [\mathbf{H}_{RD}, \mathbf{x}]\sigma_y \\
&= 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} - \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) i \tau e^{-i\theta} - 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} - \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) i \tau e^{i\theta} \\
&\quad + 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} + \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \right) \left( \alpha \operatorname{sen}(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{i\theta} \\
&\quad + 2 \sum_n \left( \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} + \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \right) \left( \alpha \operatorname{sen}(i\varphi_{n,n+1}) - \beta \cos(i\varphi_{n,n+1}) \right) i e^{-i\theta}.
\end{aligned} \tag{A.15}$$

## A.2. Funciones de Green-Keldysh y la ecuación de movimiento

$$\begin{aligned}
\left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{H}_{\text{RD}} \right] &= \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \epsilon_{n'\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] + \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow}^\dagger \epsilon_{n'\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow} \right] \\
&+ \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] + \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \tau e^{i\theta} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow} \right] \\
&+ \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow} \right] + \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow}^\dagger \tau e^{-i\theta} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow} \right] \\
&- \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] - \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow} \right] \\
&+ \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow} \right] + \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_n \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow} \right] \\
&- \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] + \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow} \right] \\
&+ \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\downarrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\uparrow} \right] - \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow} \right].
\end{aligned} \tag{A.16}$$

A continuación se muestra el cálculo de algunos de los conmutadores presentes en la ecuación (A.16):

$$\begin{aligned}
\left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \epsilon_{n'\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] &= \sum_{n'} \epsilon_{n'\uparrow} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] \\
&= - \sum_{n'} \epsilon_{n'\uparrow} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right] \\
&= - \sum_{n'} \epsilon_{n'\uparrow} \left( \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger \left\{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right\} - \left\{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}^\dagger, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right\} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right) \delta_{n'k} \delta_{\uparrow\sigma} \tag{A.17} \\
&= \sum_{n'} \epsilon_{n'\uparrow} \delta_{n'k} \delta_{\uparrow\sigma} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \\
&= \epsilon_{k\uparrow} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}\uparrow}.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] &= -\sum_{n'} i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] \\
&= \sum_{n'} i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right] \\
&= \sum_{n'} i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \left( \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \} - \{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right) \\
&= -\sum_{n'} i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n',n'+1}} \delta_{n'+1,k} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \\
&= -i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}.
\end{aligned} \tag{A.18}$$

$$\begin{aligned}
-\left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \sum_{n'} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] &= -\sum_{n'} \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right] \\
&= \sum_{n'} \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \left[ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \right] \\
&= \sum_{n'} \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \left( \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger \{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow}, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \} - \{ \mathbf{c}_{\mathbf{n}'+1\downarrow}^\dagger, \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma} \} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \right) \\
&= -\sum_{n'} \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n',n'+1}} \delta_{n'+1,k} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{n}'\uparrow} \\
&= -\beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}.
\end{aligned} \tag{A.19}$$

Una vez calculados todos los conmutadores presentes en la ecuación (A.16), se tiene que la ecuación (A.16) toma la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
\left[ \mathbf{c}_{\mathbf{k}\sigma}, \mathbf{H}_{\text{RD}} \right] (t) &= \epsilon_{k\uparrow} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}\uparrow}(t) + \epsilon_{k\downarrow} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}\downarrow}(t) + e^{i\theta} \tau \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}(t) + e^{i\theta} \tau \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t) \\
&\quad + e^{-i\theta} \tau \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\uparrow}(t) + e^{-i\theta} \tau \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\downarrow}(t) - i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}(t) \\
&\quad - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t) + i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{k+1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\uparrow}(t) \\
&\quad + i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{k+1,k}} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\downarrow}(t) - \beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\uparrow}(t) \\
&\quad + \beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t) + \beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{k+1,k}} \delta_{\sigma\downarrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}+1\uparrow}(t) \\
&\quad - \beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{k-1,k}} \delta_{\sigma\uparrow} \mathbf{c}_{\mathbf{k}-1\downarrow}(t).
\end{aligned} \tag{A.20}$$

### A.3. Generalización del sistema de ecuaciones de movimiento

#### A.3.1. Sistema compuesto por dos sitios atómicos

Función de Green  $G_{n+1\uparrow, n\uparrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_1(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_2(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_3(\omega). \quad (\text{A.21})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_2(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + 2\tau \cos(\theta)g_1(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_4(\omega). \quad (\text{A.22})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_4(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_3(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n+1,n}} + i\alpha e^{i\varphi_{n+1,n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.23})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_3(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_4(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n+1,n}} + i\alpha e^{i\varphi_{n+1,n}})g_1(\omega). \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n+1\uparrow, n\uparrow}, & g_2(\omega) &= G_{n\uparrow, n\uparrow}, \\ g_3(\omega) &= G_{n\downarrow, n\uparrow}, & g_4(\omega) &= G_{n+1\downarrow, n\uparrow}. \end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n\uparrow, n+1\uparrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_1(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_2(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_3(\omega). \quad (\text{A.25})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_2(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + 2\tau \cos(\theta)g_1(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_4(\omega). \quad (\text{A.26})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_4(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_3(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n+1,n}} + i\alpha e^{i\varphi_{n+1,n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.27})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_3(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_4(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n+1,n}} + i\alpha e^{i\varphi_{n+1,n}})g_1(\omega). \quad (\text{A.28})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n\uparrow, n+1\uparrow}, & g_2(\omega) &= G_{n+1\uparrow, n+1\uparrow}. \\ g_3(\omega) &= G_{n+1\downarrow, n+1\uparrow}, & g_4(\omega) &= G_{n\downarrow, n+1\uparrow}. \end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n+1\downarrow, n\downarrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_1(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_2(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n, n+1}} + i\alpha e^{i\varphi_{n, n+1}})g_3(\omega). \quad (\text{A.29})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_2(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + 2\tau \cos(\theta)g_1(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n, n+1}} + i\alpha e^{i\varphi_{n, n+1}})g_4(\omega). \quad (\text{A.30})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_4(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_3(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n+1, n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.31})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_3(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_4(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n+1, n}})g_1(\omega). \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n+1\downarrow, n\downarrow}, & g_2(\omega) &= G_{n\downarrow, n\downarrow}, \\ g_3(\omega) &= G_{n\uparrow, n\downarrow}, & g_4(\omega) &= G_{n+1\uparrow, n\downarrow}. \end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n\downarrow, n+1\downarrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_1(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_2(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n, n+1}} + i\alpha e^{i\varphi_{n, n+1}})g_3(\omega). \quad (\text{A.33})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_2(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + 2\tau \cos(\theta)g_1(\omega) - 2i \sin(\theta)(\beta e^{-i\varphi_{n, n+1}} - i\alpha e^{i\varphi_{n, n+1}})g_4(\omega). \quad (\text{A.34})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_4(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_3(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n+1, n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.35})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_3(\omega) = 2\tau \cos(\theta)g_4(\omega) + 2i \sin(\theta)(\beta e^{i\varphi_{n+1, n}} - i\alpha e^{-i\varphi_{n+1, n}})g_1(\omega). \quad (\text{A.36})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n\downarrow, n+1\downarrow}, & g_2(\omega) &= G_{n+1\downarrow, n+1\downarrow}, \\ g_3(\omega) &= G_{n+1\uparrow, n+1\downarrow}, & g_4(\omega) &= G_{n\uparrow, n+1\downarrow}. \end{aligned}$$

### A.3.2. Sistema compuesto por tres sitios atómicos

Función de Green  $G_{n+1\uparrow, n\uparrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_1(\omega) = e^{i\theta}\tau g_2(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_3(\omega) + (\beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_4(\omega) - (\beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_5(\omega). \quad (\text{A.37})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_2(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + e^{i\theta}\tau g_3(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_1(\omega) + (\beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_5(\omega) - (\beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_6(\omega). \quad (\text{A.38})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+2\uparrow})g_3(\omega) = e^{i\theta}\tau g_1(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_2(\omega) + (\beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_6(\omega) - (\beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_4(\omega). \quad (\text{A.39})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_4(\omega) = e^{i\theta}\tau g_5(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_6(\omega) - (\beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n+2,n}})g_3(\omega) + (\beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}})g_1(\omega). \quad (\text{A.40})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+2\downarrow})g_5(\omega) = e^{i\theta}\tau g_6(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_4(\omega) - (\beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_1(\omega) + (\beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n+2,n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.41})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_6(\omega) = e^{i\theta}\tau g_4(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_5(\omega) - (\beta e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}})g_2(\omega) + (\beta e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_3(\omega). \quad (\text{A.42})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n+1\uparrow, n\uparrow}, & g_2(\omega) &= G_{n\uparrow, n\uparrow}, & g_3(\omega) &= G_{n+2\uparrow, n\uparrow}, \\ g_4(\omega) &= G_{n\downarrow, n\uparrow}, & g_5(\omega) &= G_{n+2\downarrow, n\uparrow}, & g_6(\omega) &= G_{n+1\downarrow, n\uparrow}. \end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n\uparrow, n+1\uparrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_1(\omega) = e^{i\theta}\tau g_2(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_3(\omega) + (\beta e^{i\theta} e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{i\theta} e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_4(\omega) - (\beta e^{-i\theta} e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\theta} e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_5(\omega). \quad (\text{A.43})$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_2(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_3(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_1(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_5(\omega) \\
&\quad - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_6(\omega).
\end{aligned} \tag{A.44}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n+2\uparrow})g_3(\omega) &= \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + e^{i\theta}\tau g_1(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_2(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_6(\omega) \\
&\quad - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_4(\omega).
\end{aligned} \tag{A.45}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_4(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_5(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_6(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_3(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n}})g_1(\omega).
\end{aligned} \tag{A.46}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n+2\downarrow})g_5(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_6(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_4(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}})g_1(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_2(\omega).
\end{aligned} \tag{A.47}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_6(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_4(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_5(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}})g_2(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}})g_3(\omega).
\end{aligned} \tag{A.48}$$

$$\begin{aligned}
g_1(\omega) &= G_{n\uparrow,n+1\uparrow}, & g_2(\omega) &= G_{n+2\uparrow,n+1\uparrow}, & g_3(\omega) &= G_{n+1\uparrow,n+1\uparrow}, \\
g_4(\omega) &= G_{n+2\downarrow,n+1\uparrow}, & g_5(\omega) &= G_{n+1\downarrow,n+1\uparrow}, & g_6(\omega) &= G_{n\downarrow,n+1\uparrow}.
\end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n+1\downarrow,n\downarrow}(\omega)$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_1(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_2(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_3(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}})g_4(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_5(\omega).
\end{aligned} \tag{A.49}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_2(\omega) &= \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + e^{i\theta}\tau g_3(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_1(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}})g_5(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_6(\omega).
\end{aligned} \tag{A.50}$$

$$\begin{aligned}
(\omega - \epsilon_{n+2\downarrow})g_3(\omega) &= e^{i\theta}\tau g_1(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_2(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_6(\omega) \\
&\quad + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}})g_4(\omega).
\end{aligned} \tag{A.51}$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_4(\omega) = e^{i\theta}\tau g_5(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_6(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_3(\omega) - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_1(\omega). \quad (\text{A.52})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+2\uparrow})g_5(\omega) = e^{i\theta}\tau g_6(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_4(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_1(\omega) - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_2(\omega). \quad (\text{A.53})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_6(\omega) = e^{i\theta}\tau g_4(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_5(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_2(\omega) - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_3(\omega). \quad (\text{A.54})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n+1\downarrow,n\downarrow}, & g_2(\omega) &= G_{n\downarrow,n\downarrow}, & g_3(\omega) &= G_{n+2\downarrow,n\downarrow}, \\ g_4(\omega) &= G_{n\uparrow,n\downarrow}, & g_5(\omega) &= G_{n+2\uparrow,n\downarrow}, & g_6(\omega) &= G_{n+1\uparrow,n\downarrow}. \end{aligned}$$

Función de Green  $G_{n\downarrow,n+1\downarrow}(\omega)$

$$(\omega - \epsilon_{n\downarrow})g_1(\omega) = e^{i\theta}\tau g_2(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_3(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}})g_4(\omega) + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}})g_5(\omega). \quad (\text{A.55})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+2\downarrow})g_2(\omega) = e^{i\theta}\tau g_3(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_1(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_5(\omega) + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}})g_6(\omega). \quad (\text{A.56})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\downarrow})g_3(\omega) = \frac{e^{-it'\omega}}{\sqrt{2\pi}} + e^{i\theta}\tau g_1(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_2(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}} + i\alpha e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}})g_6(\omega) + (\beta e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}} + i\alpha e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}})g_4(\omega). \quad (\text{A.57})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+2\uparrow})g_4(\omega) = e^{i\theta}\tau g_5(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_6(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_3(\omega) - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_1(\omega). \quad (\text{A.58})$$

$$(\omega - \epsilon_{n+1\uparrow})g_5(\omega) = e^{i\theta}\tau g_6(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_4(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_1(\omega) - (\beta e^{-i\theta}e^{i\varphi_{n+1,n+2}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n+1,n+2}})g_2(\omega). \quad (\text{A.59})$$

$$(\omega - \epsilon_{n\uparrow})g_6(\omega) = e^{i\theta}\tau g_4(\omega) + e^{-i\theta}\tau g_5(\omega) + (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n+2,n}} - i\alpha e^{i\theta}e^{-i\varphi_{n+2,n}})g_2(\omega) - (\beta e^{i\theta}e^{i\varphi_{n,n+1}} - i\alpha e^{-i\theta}e^{-i\varphi_{n,n+1}})g_3(\omega). \quad (\text{A.60})$$

$$\begin{aligned} g_1(\omega) &= G_{n\downarrow,n+1\downarrow}, & g_2(\omega) &= G_{n+2\downarrow,n+1\downarrow}, & g_3(\omega) &= G_{n+1\downarrow,n+1\downarrow}, \\ g_4(\omega) &= G_{n+2\uparrow,n+1\downarrow}, & g_5(\omega) &= G_{n+1\uparrow,n+1\downarrow}, & g_6(\omega) &= G_{n\uparrow,n+1\downarrow}. \end{aligned}$$

## A.4. Densidad de corriente de carga analítica para diez sitios atómicos

### A.4.1. Función de Green $G_{n+1,n}$

Raíces del polinomio en el denominador

$$a_1 = -2t \cos(\theta). \quad (\text{A.61})$$

$$a_2 = 2t \cos(\theta). \quad (\text{A.62})$$

$$a_3 = \frac{1}{2} \left( t \cos(\theta) - |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + \sqrt{2} |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} \right) \right). \quad (\text{A.63})$$

$$a_4 = \frac{1}{2} \left( -\sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} + \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| - t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.64})$$

$$a_5 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} - \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| + t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.65})$$

$$a_6 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} + \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| - t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.66})$$

$$a_7 = \frac{1}{2} \left( -|t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) - t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.67})$$

$$a_8 = \frac{1}{2} \left( |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| - |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) + t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.68})$$

$$a_9 = \frac{1}{2} \left( |t| \left( |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))}} - \sqrt{5} |\cos(\theta)| \right) - t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.69})$$

$$a_{10} = \frac{1}{2} \left( |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) + t \cos(\theta) \right). \quad (\text{A.70})$$

**Coeficientes del numerador**

$$b_1 = -\frac{e^{i\theta}t^9}{\sqrt{2\pi}} - \frac{e^{11i\theta}t^9}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.71})$$

$$b_2 = 5\sqrt{\frac{2}{\pi}}e^{11i\theta}t^7. \quad (\text{A.72})$$

$$b_3 = -\frac{15e^{11i\theta}t^5}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.73})$$

$$b_4 = \frac{7e^{11i\theta}t^3}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.74})$$

$$b_5 = -\frac{e^{11i\theta}t}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.75})$$

**Coeficientes tras la fracción simple**

$$f_1 = \frac{a1^8b5 + a1^6b4 + a1^4b3 + a1^2b2 + b1}{(a1 - a10)(a1 - a2)(a1 - a3)(a1 - a4)(a1 - a5)(a1 - a6)(a1 - a7)(a1 - a8)(a1 - a9)}. \quad (\text{A.76})$$

$$f_2 = \frac{a2^8(-b5) - a2^6b4 - a2^4b3 - a2^2b2 - b1}{(a1 - a2)(a2 - a10)(a2 - a3)(a2 - a4)(a2 - a5)(a2 - a6)(a2 - a7)(a2 - a8)(a2 - a9)}. \quad (\text{A.77})$$

$$f_3 = \frac{a3^8(-b5) - a3^6b4 - a3^4b3 - a3^2b2 - b1}{(a1 - a3)(a3 - a10)(a3 - a2)(a3 - a4)(a3 - a5)(a3 - a6)(a3 - a7)(a3 - a8)(a3 - a9)}. \quad (\text{A.78})$$

$$f_4 = \frac{a4^8(-b5) - a4^6b4 - a4^4b3 - a4^2b2 - b1}{(a1 - a4)(a4 - a10)(a4 - a2)(a4 - a3)(a4 - a5)(a4 - a6)(a4 - a7)(a4 - a8)(a4 - a9)}. \quad (\text{A.79})$$

$$f_5 = \frac{a5^8(-b5) - a5^6b4 - a5^4b3 - a5^2b2 - b1}{(a1 - a5)(a5 - a10)(a5 - a2)(a5 - a3)(a5 - a4)(a5 - a6)(a5 - a7)(a5 - a8)(a5 - a9)}. \quad (\text{A.80})$$

$$f_6 = \frac{a6^8(-b5) - a6^6b4 - a6^4b3 - a6^2b2 - b1}{(a1 - a6)(a6 - a10)(a6 - a2)(a6 - a3)(a6 - a4)(a6 - a5)(a6 - a7)(a6 - a8)(a6 - a9)}. \quad (\text{A.81})$$


---

$$f_7 = \frac{a7^8(-b5) - a7^6b4 - a7^4b3 - a7^2b2 - b1}{(a1 - a7)(a7 - a10)(a7 - a2)(a7 - a3)(a7 - a4)(a7 - a5)(a7 - a6)(a7 - a8)(a7 - a9)}. \quad (\text{A.82})$$

$$f_8 = \frac{a8^8(-b5) - a8^6b4 - a8^4b3 - a8^2b2 - b1}{(a1 - a8)(a8 - a10)(a8 - a2)(a8 - a3)(a8 - a4)(a8 - a5)(a8 - a6)(a8 - a7)(a8 - a9)}. \quad (\text{A.83})$$

$$f_9 = \frac{a9^8(-b5) - a9^6b4 - a9^4b3 - a9^2b2 - b1}{(a1 - a9)(a9 - a10)(a9 - a2)(a9 - a3)(a9 - a4)(a9 - a5)(a9 - a6)(a9 - a7)(a9 - a8)}. \quad (\text{A.84})$$

$$f_{10} = \frac{a10^8(-b5) - a10^6b4 - a10^4b3 - a10^2b2 - b1}{(a1 - a10)(a10 - a2)(a10 - a3)(a10 - a4)(a10 - a5)(a10 - a6)(a10 - a7)(a10 - a8)(a10 - a9)}. \quad (\text{A.85})$$

#### A.4.2. Función de Green $G_{n,n+1}$

Raíces del polinomio en el denominador

$$a_1 = -2t \cos(\theta), \quad (\text{A.86})$$

$$a_2 = 2t \cos(\theta), \quad (\text{A.87})$$

$$a_3 = \frac{1}{2} \left( t \cos(\theta) - |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + \sqrt{2} |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} \right) \right), \quad (\text{A.88})$$

$$a_4 = \frac{1}{2} \left( -\sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} + \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| - t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.89})$$

$$a_5 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\text{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} - \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| + t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.90})$$

$$a_6 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{2} |t| |\sin(\theta)| \sqrt{\frac{\sqrt{5}}{\operatorname{sgn}(t \cos(\theta))} + 5} + \sqrt{5} |t| |\cos(\theta)| - t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.91})$$

$$a_7 = \frac{1}{2} \left( -|t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\operatorname{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) - t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.92})$$

$$a_8 = \frac{1}{2} \left( |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| - |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\operatorname{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) + t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.93})$$

$$a_9 = \frac{1}{2} \left( |t| \left( |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\operatorname{sgn}(t \cos(\theta))}} - \sqrt{5} |\cos(\theta)| \right) - t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.94})$$

$$a_{10} = \frac{1}{2} \left( |t| \left( \sqrt{5} |\cos(\theta)| + |\sin(\theta)| \sqrt{10 - \frac{2\sqrt{5}}{\operatorname{sgn}(t \cos(\theta))}} \right) + t \cos(\theta) \right), \quad (\text{A.95})$$

### Coefficientes del numerador

$$b_1 = -\frac{e^{9i\theta} (1 + e^{10i\theta}) t^9}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{A.96})$$

$$b_2 = 5\sqrt{\frac{2}{\pi}} e^{9i\theta} t^7, \quad (\text{A.97})$$

$$b_3 = -\frac{15e^{9i\theta} t^5}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{A.98})$$

$$b_4 = \frac{7e^{9i\theta} t^3}{\sqrt{2\pi}}, \quad (\text{A.99})$$

$$b_5 = -\frac{e^{9i\theta} t}{\sqrt{2\pi}}. \quad (\text{A.100})$$


---

---

**Coeficientes tras la fracción simple**

$$g_1 = \frac{a1^8b5 + a1^6b4 + a1^4b3 + a1^2b2 + b1}{(a1 - a10)(a1 - a2)(a1 - a3)(a1 - a4)(a1 - a5)(a1 - a6)(a1 - a7)(a1 - a8)(a1 - a9)}. \quad (\text{A.101})$$

$$g_2 = \frac{a2^8(-b5) - a2^6b4 - a2^4b3 - a2^2b2 - b1}{(a1 - a2)(a2 - a10)(a2 - a3)(a2 - a4)(a2 - a5)(a2 - a6)(a2 - a7)(a2 - a8)(a2 - a9)}. \quad (\text{A.102})$$

$$g_3 = \frac{a3^8(-b5) - a3^6b4 - a3^4b3 - a3^2b2 - b1}{(a1 - a3)(a3 - a10)(a3 - a2)(a3 - a4)(a3 - a5)(a3 - a6)(a3 - a7)(a3 - a8)(a3 - a9)}. \quad (\text{A.103})$$

$$g_4 = \frac{a4^8(-b5) - a4^6b4 - a4^4b3 - a4^2b2 - b1}{(a1 - a4)(a4 - a10)(a4 - a2)(a4 - a3)(a4 - a5)(a4 - a6)(a4 - a7)(a4 - a8)(a4 - a9)}. \quad (\text{A.104})$$

$$g_5 = \frac{a5^8(-b5) - a5^6b4 - a5^4b3 - a5^2b2 - b1}{(a1 - a5)(a5 - a10)(a5 - a2)(a5 - a3)(a5 - a4)(a5 - a6)(a5 - a7)(a5 - a8)(a5 - a9)}. \quad (\text{A.105})$$

$$g_6 = \frac{a6^8(-b5) - a6^6b4 - a6^4b3 - a6^2b2 - b1}{(a1 - a6)(a6 - a10)(a6 - a2)(a6 - a3)(a6 - a4)(a6 - a5)(a6 - a7)(a6 - a8)(a6 - a9)}. \quad (\text{A.106})$$

$$g_7 = \frac{a7^8(-b5) - a7^6b4 - a7^4b3 - a7^2b2 - b1}{(a1 - a7)(a7 - a10)(a7 - a2)(a7 - a3)(a7 - a4)(a7 - a5)(a7 - a6)(a7 - a8)(a7 - a9)}. \quad (\text{A.107})$$

$$g_8 = \frac{a8^8(-b5) - a8^6b4 - a8^4b3 - a8^2b2 - b1}{(a1 - a8)(a8 - a10)(a8 - a2)(a8 - a3)(a8 - a4)(a8 - a5)(a8 - a6)(a8 - a7)(a8 - a9)}. \quad (\text{A.108})$$

$$g_9 = \frac{a9^8(-b5) - a9^6b4 - a9^4b3 - a9^2b2 - b1}{(a1 - a9)(a9 - a10)(a9 - a2)(a9 - a3)(a9 - a4)(a9 - a5)(a9 - a6)(a9 - a7)(a9 - a8)}. \quad (\text{A.109})$$

$$g_{10} = \frac{a10^8(-b5) - a10^6b4 - a10^4b3 - a10^2b2 - b1}{(a1 - a10)(a10 - a2)(a10 - a3)(a10 - a4)(a10 - a5)(a10 - a6)(a10 - a7)(a10 - a8)(a10 - a9)}. \quad (\text{A.110})$$


---

# Bibliografía

- [1] Walter Greiner. *Quantum mechanics: Special chapters*. Springer Science & Business Media, 2012.
  - [2] Walter Greiner et al. *Relativistic quantum mechanics*, volume 3. Springer, 1990.
  - [3] D. Aharonov, Y. y Bohm. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Phys. Rev.*, 115:485–491, Aug 1959.
  - [4] M Büttiker, Yoseph Imry, and Rolf Landauer. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. *Physics letters a*, 96(7):365–367, 1983.
  - [5] Santanu K Maiti, Moumita Dey, and SN Karmakar. Persistent charge and spin currents in a quantum ring using green’s function technique: Interplay between magnetic flux and spin–orbit interactions. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 64:169–177, 2014.
  - [6] Supriyo Datta. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge university press, 1997.
  - [7] Yoshimasa Murayama. *Mesoscopic systems: fundamentals and applications*. John Wiley & Sons, 2008.
  - [8] Robert R Eisberg, Robert Martín Resnick y Eisberg, Robert Resnick, et al. *Física cuántica: átomos, moléculas, sólidos, núcleos y partículas*. Number 530.145 EIS. 1979.
  - [9] Nouredine Zettili. *Quantum mechanics: concepts and applications*. John Wiley & Sons, 2009.
  - [10] EI Bychkov, Yu A y Rashba. Properties of a 2d electron gas with lifted spectral degeneracy. *JETP lett*, 39(2):78, 1984.
  - [11] G Dresselhaus. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures. *Physical Review*, 100(2):580, 1955.
  - [12] Vanessa Torres. *Efectos topológicos y cuantización en corrientes de espín*. Trabajo especial de grado UCV, 2010.
-

- [13] Michael Ellner. *Anillo mesoscópico con interacción espín-órbita acoplado a un reservorio de electrones*. Trabajo especial de grado UCV, 2012.
  - [14] Ernst H Doniach, Sebastian y Sondheimer. *Green's functions for solid state physicists*. 1999.
  - [15] Franz Gross. *Relativistic quantum mechanics and field theory*. John Wiley & Sons, 2008.
  - [16] David Ferry and Stephen Marshall Goodnick. *Transport in nanostructures*. Number 6. Cambridge university press, 1997.
  - [17] Luis De La Peña. *Introducción a la mecánica cuántica*. Fondo de Cultura económica, 2014.
  - [18] Walter Greiner. *Quantum Mechanics 1: An Introduction*. Springer-Verlag, 1994.
  - [19] Stephen J Lancaster, Tom y Blundell. *Quantum field theory for the gifted amateur*. Oxford University Press, 2014.
  - [20] Michael Balzer, Karsten y Bonitz. *Nonequilibrium Green's Functions Approach to Inhomogeneous Systems*. Springer, 2012.
  - [21] Hartmut Haug and M Jauho, Antti-Pekka y Cardona. *Quantum kinetics in transport and optics of semiconductors*, volume 14. Springer, 2008.
  - [22] Felix Marín. *Keldysh Elemental*, volume v.3.1. Publicación UCV, 2008.
  - [23] Santanu K Maiti. Quantum transport through a molecule coupled with a mesoscopic ring. *Physica Scripta*, 75(1):62, 2006.
  - [24] Michael Ellner, Nelson Bolívar, Bertrand Berche, and Ernesto Medina. Charge- and spin-polarized currents in mesoscopic rings with rashba spin-orbit interactions coupled to an electron reservoir. *Physical Review B*, 90(8):085305, 2014.
-