

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA



**FORMALISMO DE FUNCIONES DE GREEN PARA EL CÁLCULO
DE CORRIENTES EN EL EQUILIBRIO EN ANILLOS DE
GRAFENO.**

Trabajo Especial de Grado presentado por
Emma Mora
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. Nelson Bolívar
Dr. David Verrilli

Abril-2017

Caracas-Venezuela

Escuela de Física

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA



**FORMALISMO DE FUNCIONES DE GREEN PARA EL CÁLCULO
DE CORRIENTES EN EL EQUILIBRIO EN ANILLOS DE
GRAFENO.**

Trabajo Especial de Grado presentado por
Emma Mora
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. Nelson Bolívar
Dr. David Verrilli

Abril-2017
Caracas-Venezuela



UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
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 **Emma Rocio Mora Fernández**, Cédula de Identidad **V-21469051**, bajo el título **“Formalismo de Funciones de Green para el cálculo de Corrientes en el Equilibrio en Anillos de Grafeno”**, 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 17 de mayo de 2017, a la 1:00 pm, para que el autor lo defendiera en forma pública, lo que éste hizo en la Sala de Seminarios Guillermo Ruggeri de la Escuela de Física, 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 17 días del mes de mayo de 2017, dejándose también constancia de que, conforme a la normativa jurídica vigente, actuó como coordinador del jurado el tutor del Trabajo Especial de Grado Prof Nelson Enrique Bolivar Cova.

Firma del jurado evaluador

Prof Hely Arnal Cordero
V-6348782
UCV

Lic. Gabriel Antonio Apellan
V-13518260
UCV

Prof Nelson Enrique Bolivar
V-13568312
UCV



Agradecimientos

Primeramente quiero agradecer a Dios por darme la vida, salud y bienestar. A mis padres por darme la mejor vida que pudieron y particularmente en este período de tiempo, por soportarme y darme su apoyo incondicional. A mi hermana menor Natasha, mi confidente, mejor amiga que me consiente.

A mis tutores Nelson Bolívar y David Verrilli por prestarme su ayuda durante todo este tiempo, incluyendo fines de semana, junto con ellos aprendí muchas cosas en este período.

A mis mejores amigos, Tiffany Herrera, Andrés Gómez, Blanca Morillo y Dayanna Pereira personas en las que puedo confiar, cuyas amistades prevalecerán a pesar del tiempo y la distancia. Lo se porque me siguen hablando a pesar de que me alejé un poco por andar en modo tesis. A mi mascota Leia, quien me desestresaba jugando conmigo, quien además es mi compañera de cuarto/ peluche viviente.

Para finalizar, a todas aquellas personas que han estado pendiente de mi y mi tesis, la profesora Solmar Varela cuyos consejos me guiaron para escribir de manera correcta la monografía, el profesor Hely Cordero que me sacó de dudas en la aplicación de la técnica; y muchas otras personas.

RESUMEN

En este trabajo estudiamos las corrientes persistentes en un anillo unidimensional con cuatro átomos de carbono, basado en Grafeno, con el formalismo de las funciones de Green utilizando la técnica de la ecuación de movimiento. El anillo es atravesado por un flujo de campo magnético de forma perpendicular al plano del anillo. Reproducimos el cálculo de las corrientes persistentes de carga en un anillo basado en grafeno sin interacción Espín-Órbita (EO). Seguidamente, realizamos el cálculo sólo con interacción EO intrínseca propia del Grafeno, luego sólo con EO rashba dependiente de un campo eléctrico externo. Realizamos el cálculo para un anillo con ambas interacciones EO juntas, en el cual se puede apreciar que las dos interacciones para la corriente actúan como una sola. En estas corrientes observamos que la presencia de estos acoplamientos suavizan los picos observados en la corriente sin interacción EO. En todos los casos las corrientes degradan con el aumento de temperatura. Además calculamos las corrientes de espín para arreglos del anillo con interacción EO actuando de forma separada y luego actuando ambas interacciones; observamos que estas corrientes también degradan con la temperatura y varía el comportamiento según la componente de espín que se estudie.

Palabras Claves:

Grafeno, Tight Binding, Corrientes Persistentes, Corrientes Persistentes de Carga, Corrientes Persistentes de Espín,

Índice general

Lista de figuras	13
Introducción.	19
1. Grafeno	21
1.1. Estructura del Grafeno	21
1.2. Modelo Tight-Binding en el Grafeno	23
1.2.1. Teorema de Bloch.	24
1.2.2. Red con dos átomos por celda unitaria.	24
1.2.3. Elementos diagonales de la matriz Hamiltoniana.	25
1.2.4. Elementos no diagonales de la matriz Hamiltoniana.	27
1.2.5. Bandas energéticas de los electrones en el grafeno.	29
2. Acoplamiento Espín-Órbita.	31
2.1. Acoplamiento Espín-órbita en un átomo.	31
2.2. Acoplamiento Espín-órbita en un sólido.	33
2.2.1. Simetrías de inversión	33
2.2.2. Interacción espín-órbita en dos dimensiones.	34
2.3. Acoplamiento espín órbita en el Grafeno	35
3. Funciones de Green y el método de la ecuación de movimiento.	37
3.1. Valores medios en Mecánica cuántica.	37
3.1.1. Matriz Densidad y Sistemas Macroscópicos.	40
3.1.2. Respuesta lineal.	41
3.2. Funciones de Green.	44
3.2.1. Ecuaciones de movimiento	45
3.2.2. Equilibrio termodinámico.	46

4. Corrientes Persistentes	49
4.1. Corrientes persistentes de Carga.	52
4.1.1. Corrientes persistentes de carga para un Anillo de Grafeno con interacción Espín-Órbita (EO) tipo Intrínseco y Rashba.	54
4.1.2. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno.	60
4.1.3. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco.	61
4.1.4. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Rashba.	65
4.1.5. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco y Rashba.	68
4.2. Corrientes Persistentes de Espín.	71
4.2.1. Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo de Grafeno con interacción Espín-Órbita (EO) tipo Intrínseco y Rashba.	72
4.2.2. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco.	75
4.2.3. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Rashba.	86
4.2.4. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco y Rashba.	90
Conclusiones.	100
A. Cuentas.	107
A.1. Operadores de creación y aniquilación escritos de forma matricial	107
A.2. Cuenta de los términos de Acoplamiento Espín-Órbita en el Grafeno	107
A.2.1. El término de acoplamiento EO Intrínseco.	107
A.2.2. El término de acoplamiento EO Rashba.	108
A.3. Conmutador.	110
A.4. Valor medio de la ecuación (4.15) y definición de las funciones de Green para el mismo.	110
A.5. Anticonmutador.	112
A.6. Funciones de Green	115
A.7. Matriz.	116

Índice de figuras

1.1. Estructura del Grafeno	21
1.2. La celda unitaria	22
1.3. La primera zona de Brillouin.	22
1.4. Vectores de un átomo A a un átomo B a primeros primeros vecinos.	28
1.5. Banda de energía en el grafeno. Imagen tomada de [1] el valor del parámetro $\gamma_0 = 3,033eV$, $s_0 = 0,129$, $\epsilon_{2p} = 0$	30
4.1. Gráfica de energía para el electrón en el anillo. Los puntos verdes son los valores permitidos de energía en el anillo; la línea denota la forma del espectro proveniente de un Hamiltoniano cuadrático en el momento $\mathbf{P}$	50
4.2. Anillo unidimensional.	51
4.3. Comparación de Gráficas de energía para un electrón en un anillo sin presencia de campo magnético (puntos verdes) y con presencia de campo magnético (puntos rosados).	52
4.4. Corriente de carga pura.	53
4.5. Sistema en estudio.	55
4.6. Conteo de sitios en el anillo.	59
4.7. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno variando la temperatura con $t = 1$	60
4.8. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno variando la temperatura.	61
4.9. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura.	62
4.10. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco variando la magnitud del acoplamiento con $K_B T = 0$	63

4.11. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,7$ variando la temperatura.	64
4.12. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura.	64
4.13. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 5$ variando la temperatura.	66
4.14. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.	67
4.15. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.	67
4.16. Gráfica de densidad corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$	68
4.17. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	69
4.18. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ y variando el acoplamiento EO Intrínseco.	70
4.19. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y variando el acoplamiento EO Rashba.	70
4.20. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado de Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	71
4.21. Corriente de espín pura.	72
4.22. Comparación del desdoblamiento de energía en espín en precencia de acoplamiento espín-órbita sin presencia de campo magnético (puntos verdes). Con el desdoblamiento de energía en espín en precencia de acoplamiento espín-órbita con presencia de campo magnético (puntos rosados).	73
4.23. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$	76

4.24. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco y temperatura $K_B T = 0$ variando el parámetro de acoplamiento.	77
4.25. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	78
4.26. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$	80
4.27. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	81
4.28. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$. Integrando a valores cercanos de la energía de Fermi. . .	82
4.29. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$. Integrando a valores cercanos de la energía de Fermi. . .	83
4.30. Gráfica de la densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ variando el acoplamiento EO tipo Intrínseco, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	84
4.31. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	85
4.32. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	85
4.33. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$	86
4.34. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	88
4.35. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba a temperatura $K_B T = 0$ variando el parámetro de acoplamiento.	89

4.36. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura. . . .	89
4.37. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.	91
4.38. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$	92
4.39. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$	93
4.40. Gráfica corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	94
4.41. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	96
4.42. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$	97
4.43. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$	97
4.44. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_{EO} = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$	98
4.45. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	100
4.46. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	101

4.47. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	101
4.48. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	102
4.49. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$	102
A.1. Vectores a primeros vecinos.	108

INTRODUCCIÓN.

En la última década se ha incrementado el estudio de nuevos materiales con posibles aplicaciones para el desarrollo de nuevas tecnologías. Tal es el caso del Grafeno, un material bidimensional de átomos de carbono, con una estructura hexagonal. Este fue descrito por primera vez alrededor de 1930 y no fue sino hasta el año 2004 que fue sintetizado por Andre Geim y Konstantin Novoselov [2], razón por la cual se les otorga el premio Nobel de Física en el año 2010. Este material puede presentar dos tipos de acoplamiento Espín-Órbita (EO): a) tipo Intrínseco propio del material, que depende de campos eléctricos inherentes a su estructura cristalina y b) tipo Rashba, producida por un campo eléctrico externo que rompe la simetría de inversión en el plano [3].

Una forma de caracterizar este material, es diagonalizando el Hamiltoniano para conseguir el espectro de energía [3]. En el caso del Grafeno, cuando se tienen las dos interacciones espín-órbita, la diagonalización del Hamiltoniano resulta demasiado compleja, por lo que la caracterización resulta poco trivial.

Si se toma un anillo mesoscópico, el cual está sujeto a un flujo magnético que no interactúa directamente con los electrones en el anillo, se generaran unas corrientes persistentes. Este es un efecto cuántico descrito originalmente por Buttiker en anillos metálicos [4]. Esta corriente se genera por el corrimiento del estado base en el anillo, debida a la fase introducida por el flujo magnético. Al desplazarse el estado base el valor esperado del momento angular es distinto de cero [5]. Estas corrientes son características para cada tipo de material y su respectivo espectro de energía.

Así como existen las corrientes de carga que se deben al movimiento de una partícula cargada, también existen las corrientes de espín, debidas al movimiento de al menos una partícula con un espín asociado. En presencia de un acoplamiento EO que rompa la simetría de inversión temporal en el material, es posible que estas corrientes sean relevantes, ya que esto separa los niveles de energía degenerados en espín, introduciendo corrientes de carga polarizadas para cada nivel desdoblado.

En el siguiente trabajo primero estudiaremos la estructura del grafeno y su Hamiltoniano sin interacciones. Seguidamente revisaremos la interacción Espín-Órbita e introduciremos las interacciones propias del Grafeno. Estudiaremos el formalismo de las funciones de Green y la técnica de la ecuación de movimiento. Finalmente realizaremos

los cálculos para corrientes persistentes de carga y de espín en un anillo unidimensional basado en Grafeno con cuatro sitios.

Primero, reproduciremos los resultados ya conocidos de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en grafeno sin acoplamiento EO. Luego, se calcularán las corrientes persistentes de carga y espín para las siguientes interacciones:

1. Sólo acoplamiento EO Intrínseco.
2. Sólo acoplamiento EO Rashba.
3. Acoplamiento EO Intrínseco y Rashba.

Objetivo General.

Cálculo de corrientes persistentes de carga y de espín en anillos mesoscópicos basados en grafeno utilizando el formalismo de las funciones de Green en el equilibrio.

Objetivos Específicos.

- Cálculo de las corrientes persistentes de carga en un anillo de grafeno, utilizando la técnica del formalismo de las funciones de Green en el equilibrio.
- Cálculo de las corrientes persistentes de carga y de espín para un anillo sujeto a interacciones espín órbita tipo Rashba e intrínseca, utilizando la técnica del formalismo de las funciones de Green en el equilibrio.
- Relevancia y discusión del presente enfoque con respecto a resultados experimentales.

Capítulo 1

Grafeno

El grafeno fue descrito por primera vez en la década de 1930, en relación a su estructura y sus enlaces químicos; en 1949 Wallace calculó por primera vez la estructura de bandas electrónicas, en ese entonces a este material se le conocía como monocapa de grafito, no fue sino hasta 1994 que se le llamó de manera oficial grafeno [6].

El grafeno fue sintetizado por primera vez en 2004, mediante exfoliación micromecánica por Andre Geim y su estudiante de doctorado Konstantin Novoselov [2]. Este descubrimiento dio lugar al premio Nobel de Física en el año 2010 para Geim y Novoselov. Para poder estudiar este sistema, debemos entender algunas propiedades del grafeno.

1.1. Estructura del Grafeno

El grafeno es un nanomaterial bidimensional de átomos de carbono fuertemente cohesionados en una superficie uniforme, plana de un átomo de espesor, con una estructura que asemeja a la de un panal de abejas, como se muestra en la figura 1.1.

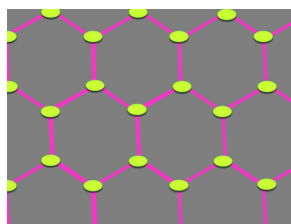


Figura 1.1: Estructura del Grafeno

En la figura 1.2 se muestra la celda unitaria del grafeno representada por un hexágono que contiene a dos átomos de carbono que denotaremos A (rosados) y B (morados). La red

hexagonal no forma una red de Bravais, por lo tanto, se usarán dos sub-redes triangulares, las cuales sí forman redes de Bravais. Todos los átomos A forman una sub-red triangular, al igual que los átomos B, con un átomo por celda unitaria; al superponer la sub-red A con la sub red B formarán la red de panal de abejas.

Los vectores de la red son: $\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, \frac{1}{2}a\right)$ y $\vec{a}_2 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}a, -\frac{1}{2}a\right)$; con el parámetro de red $a = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = \sqrt{3}a_0$, donde $a_0 = 1,42\text{\AA}$, entonces $a = 2,46\text{\AA}$ es la separación atómica entre los átomos de carbono.

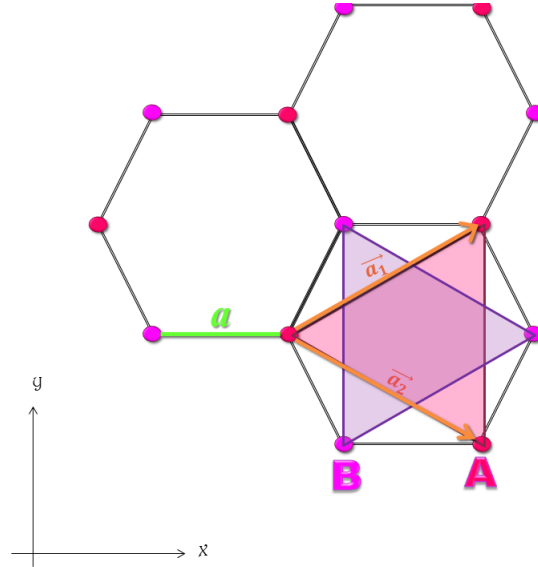


Figura 1.2: La celda unitaria

En la figura 1.3 se muestra la primera zona de Brillouin del grafeno cuyos vectores de red recíproca vienen dados por: $\vec{b}_1 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \frac{2\pi}{a}\right)$ y $\vec{b}_2 = \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, -\frac{2\pi}{a}\right)$; se puede observar que la primera zona de Brillouin también tiene forma hexagonal.

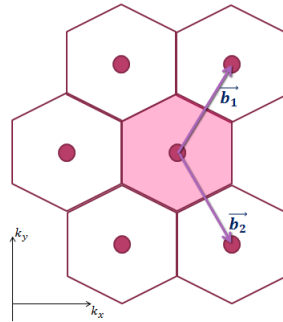


Figura 1.3: La primera zona de Brillouin.

1.2. Modelo Tight-Binding en el Grafeno

En general el modelo tight-binding es un enfoque para calcular la estructura de bandas usando como aproximación una base de funciones de onda localizada, $\Phi(\vec{r} - \vec{R}_j)$, basado en una combinación lineal de estas. Con un arreglo atómico que forma una red particular descrito por los vectores de la red de Bravais $(\vec{a}_1, \vec{a}_2)$, podemos tomar combinaciones lineales de estos vectores $\vec{R}_j = m_j \vec{a}_1 + n_j \vec{a}_2$, para trasladarnos en la red, donde m_j y n_j son números enteros. Para explicar el método consideramos, por simplicidad, el caso de una red de Bravais con un átomo por celda unitaria y un electrón por átomo.

El Hamiltoniano para un electrón arbitrario, marcado por el número entero l viene dado por:

$$\mathbf{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_l^2 + \sum_{j=1}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j), \quad (1.1)$$

donde ∇_l^2 es el operador laplaciano en 2D, la posición del electrón $\vec{r}_l = (x_l, y_l)$ y m es la masa del electrón. Cada ión en el sitio $\vec{R}_j$ produce un potencial electrostático que siente el electrón, y su energía potencial global $\sum_{j=1}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j)$, donde N es el número de sitios de la red. Dicho potencial es una función periódica con respecto a una traslación arbitraria para un vector de la red $\vec{R}_i$ en el límite termodinámico $N \rightarrow \infty$. El Hamiltoniano del sistema es la suma sobre todos los electrones,

$$\mathbf{H} = \sum_l^N \mathbf{H}_l. \quad (1.2)$$

El enfoque tight-binding se basa en la suposición de que el átomo l se une a un ión particular en el sitio de la red $\vec{R}_l$, y es descrito por un estado (atómico) ligado del Hamiltoniano

$$\mathbf{H}_l^a = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_l^2 + V(\vec{r}_l - \vec{R}_l).$$

Las contribuciones a la energía potencial de los otros iones en los sitios $\vec{R}_j$, $j \neq l$ vienen dadas por $\Delta V = \sum_{j \neq l}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j)$. El estado ligado asociado a H_l^a es descrito por la función de onda $\Phi^{(a)}(\vec{r} - \vec{R}_j)$.

1.2.1. Teorema de Bloch.

El teorema de Bloch describe el movimiento de los electrones en un sólido. Los átomos del cristal forman una estructura periódica y ocupan las posiciones de una red de Bravais descritas por el vector $\vec{r}$; la función de onda de prueba debe cumplir con la simetría de traslación dado por el vector de traslación $\vec{R}_i$; esta traslación puede ser descrita por el operador:

$$\mathcal{T}_{\vec{R}_i} = e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \vec{R}_i}. \quad (1.3)$$

Es conveniente para este caso usar $\mathbf{p} = \hbar \vec{k}$, con k restringido a la primera zona de Brillouin [7].

La función de onda de prueba, construida a partir de las funciones de onda anteriores $\Phi^{(a)}(\vec{r} - \vec{R}_j)$, es

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Phi(\vec{r} - \vec{R}_j). \quad (1.4)$$

Esta función cumple con los requisitos antes mencionados, es un autoestado del operador de traslación $\mathcal{T}_{\vec{R}_i}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{\vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \psi_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{R}_i) \\ &= \sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Phi(\vec{r} - (\vec{R}_j - \vec{R}_i)) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \Phi(\vec{r} - \vec{R}_m) \\ &= e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_i} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}), \end{aligned}$$

donde la primera línea es la traslación dada por el vector de traslación $\vec{R}_i$ en el argumento de la función de onda y definimos $\vec{R}_m = \vec{R}_j - \vec{R}_i$.

1.2.2. Red con dos átomos por celda unitaria.

Si tenemos más de un átomo por celda unitaria en la red, como es el caso de la red de panal de abeja del grafeno, la función de prueba (1.4) queda como:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = a_k \psi_{\vec{k}}^{(A)}(\vec{r}) + b_k \psi_{\vec{k}}^{(B)}(\vec{r}), \quad (1.5)$$

donde a_k y b_k son funciones complejas del momento $\vec{k}$, $\psi_k^{(A)}(\vec{r})$ y $\psi_k^{(B)}(\vec{r})$ son funciones de Bloch con

$$\psi_k^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_m} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_m} \Phi^{(j)}(\vec{r} - \vec{R}_m),$$

donde $j = A, B$ son las etiquetas de las subredes A y B . La ecuación de Schrödinger para este sistema se escribe:

$$\mathbf{H}|\psi_k(\vec{r})\rangle = \epsilon_k |\psi_k(\vec{r})\rangle. \quad (1.6)$$

Multiplicamos a ambos lados por $\langle \psi_k(\vec{r}) |$ y nos queda:

$$\langle \psi_k(\vec{r}) | \mathbf{H} | \psi_k(\vec{r}) \rangle = \epsilon_k \langle \psi_k(\vec{r}) | \psi_k(\vec{r}) \rangle,$$

reescribiendo en la forma matricial:

$$\begin{pmatrix} a_k^* & b_k^* \end{pmatrix} \mathcal{H}_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} a_k^* & b_k^* \end{pmatrix} \mathcal{S}_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}, \quad (1.7)$$

donde el Hamiltoniano escrito en forma matricial queda escrito como

$$\mathcal{H}_k \equiv \begin{pmatrix} \psi_k^{*(A)} \mathbf{H} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(A)} \mathbf{H} \psi_k^{(B)} \\ \psi_k^{*(B)} \mathbf{H} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(B)} \mathbf{H} \psi_k^{(B)} \end{pmatrix} = \mathcal{H}_k^\dagger, \quad (1.8)$$

y la matriz:

$$\mathcal{S}_k \equiv \begin{pmatrix} \psi_k^{*(A)} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(A)} \psi_k^{(B)} \\ \psi_k^{*(B)} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(B)} \psi_k^{(B)} \end{pmatrix} = \mathcal{S}_k^\dagger, \quad (1.9)$$

es llamada la matriz de solapamiento y representa la no ortogonalidad de las funciones de onda de prueba. Para resolver la ecuación de Schrödinger se debe cumplir:

$$\det[\mathcal{H}_k - \epsilon_k^\lambda \mathcal{S}_k] = 0, \quad (1.10)$$

que debe satisfacer $a_k \neq 0$ y $b_k \neq 0$. La etiqueta λ denota las bandas de energía, hay tantas bandas de energía como soluciones a la ecuación existan, dos bandas para el caso de dos átomos por celda unitaria.

1.2.3. Elementos diagonales de la matriz Hamiltoniana.

Escribiremos los elementos diagonales de la matriz correspondientes a la sub red A como:

$$\mathcal{H}_{AA} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{A,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,j}) \rangle, \quad (1.11)$$

donde $\vec{k} = (k_x, k_y)$ es el vector de onda en el plano del grafeno. La ecuación (1.11) incluye una doble sumatoria sobre todos los sitios A de la red. Si asumimos que la contribución dominante surge del mismo sitio $j = i$ dentro de cada celda unitaria, entonces:

$$\mathcal{H}_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) \rangle, \quad (1.12)$$

Estos elementos de matriz tienen el mismo valor para cada sitio A , independientemente del sitio i . Se propone que sea igual a un parámetro [1]:

$$\langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) \rangle = \epsilon_{2p}, \quad (1.13)$$

que es igual a la energía del orbital $2p_z$. Luego,

$$\mathcal{H}_{AA} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \epsilon_{2p} = \epsilon_{2p}. \quad (1.14)$$

Evaluando para la sub red B , de modo similar, obtenemos:

$$\mathcal{H}_{BB} = \mathcal{H}_{AA} \approx \epsilon_{2p}. \quad (1.15)$$

Los elementos diagonales de la matriz de solapamiento vienen dados por:

$$\langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) \rangle = 1. \quad (1.16)$$

Esto, asumiendo que tenemos el mismo índice,

$$\begin{aligned} S_{AA} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{A,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,j}) \rangle \\ &\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N 1 \\ &= 1. \end{aligned}$$

De modo similar para la sub-red B nos queda que:

$$S_{AA} = S_{BB} = 1. \quad (1.17)$$

1.2.4. Elementos no diagonales de la matriz Hamiltoniana.

Sustituyendo en la expresión de la función de Bloch, podemos escribir los elementos no diagonales de la matriz como

$$\mathcal{H}_{AB} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,j}) \rangle, \quad (1.18)$$

que describe el salto de una sub red A a una sub red B , con la traslación a los sitios A dada por el vector $\vec{R}_{A,i}$ y para la traslación a los sitios B con el vector $\vec{R}_{B,j}$.

Si consideramos que la mayor contribución viene dada por los primeros vecinos, entonces para cada átomo se toman en cuenta tres vecinos, por lo que usaremos un nuevo índice l ($l = 1, 2, 3$), con esto, podemos escribir la ecuación (1.18) como:

$$\mathcal{H}_{AB} \approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle. \quad (1.19)$$

El elemento de matriz entre átomos vecinos $\langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathcal{H} | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle$, el estado de B a A , es el mismo valor independientemente de los índices i y l . Igualandolo a un parámetro t .

$$t = \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \mathbf{H} | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle.$$

Esto puede ser calculado por cálculos a primeros principios [8]. Como el parámetro t es menor a cero [1], es común y práctico expresarlo con un término positivo $\gamma_0 = -t$; a partir de aquí escribimos los elementos no diagonales de la matriz como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB} &\approx -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \gamma_0 \\ &= \frac{-\gamma_0}{N} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_l} \\ &= -\gamma_0 f(\vec{k}), \end{aligned}$$

donde $f(\vec{k})$ se define

$$f(\vec{k}) = \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_l},$$

y el vector posición que va de un átomo A a un átomo B lo denotamos como $\vec{\delta}_l = \vec{R}_{B,l} - \vec{R}_{A,i}$ que será el mismo vector posición que va de un átomo A a un átomo B , estos vectores son:

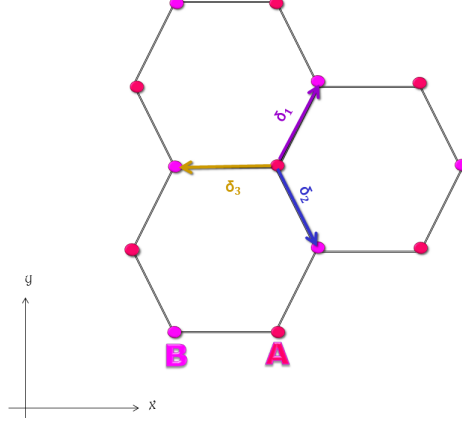


Figura 1.4: Vectores de un átomo A a un átomo B a primeros vecinos.

$$\vec{\delta}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3}); \quad \vec{\delta}_2 = \frac{a}{2}(1, -\sqrt{3}); \quad \vec{\delta}_3 = a(1, 0). \quad (1.20)$$

Nótese que $|\vec{\delta}_1| = |\vec{\delta}_2| = |\vec{\delta}_3| = a$.

La función $f(\vec{k})$ describe los saltos a primeros vecinos y podemos evaluarla como:

$$\begin{aligned} f(\vec{k}) &= \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_l} \\ &= e^{\frac{ia}{2}(k_x + \sqrt{3}k_y)} + e^{\frac{ia}{2}(k_x - \sqrt{3}k_y)} + e^{-iak_x} \\ &= e^{-iak_x} + \left(e^{\frac{ia\sqrt{3}}{2}k_y} + e^{-\frac{ia\sqrt{3}}{2}k_y} \right) e^{\frac{ia}{2}k_x} \\ &= e^{-iak_x} + \cos\left(\frac{a\sqrt{3}}{2}k_y\right) e^{\frac{ia}{2}k_x}. \end{aligned}$$

El otro elemento no diagonal de la matriz H_{BA} es el complejo conjugado de H_{AB}

$$\mathcal{H}_{AB} \approx -\gamma_0 f(\vec{k}), \quad \mathcal{H}_{BA} \approx -\gamma_0 f^*(\vec{k}). \quad (1.21)$$

El cálculo de los elementos no diagonales de la matriz de solapamiento viene dado por:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{S}_{AB} &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle \\
 &\approx \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{l=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot (\vec{R}_{B,j} - \vec{R}_{A,i})} \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle \\
 &= s_0 f(\vec{k}),
 \end{aligned}$$

donde el parámetro $s_0 = \langle \Phi^{(A)}(\vec{r} - \vec{R}_{A,i}) | \Phi^{(B)}(\vec{r} - \vec{R}_{B,l}) \rangle$ y,

$$\mathcal{S}_{AB} \approx s_0 f(\vec{k}), \quad \mathcal{S}_{BA} \approx s_0 f^*(\vec{k}). \quad (1.22)$$

1.2.5. Bandas energéticas de los electrones en el grafeno.

Con los resultados obtenidos anteriormente, los elementos de la matriz del Hamiltoniano (1.21) y los elementos de la matriz de solapamiento (1.22) tenemos;

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \epsilon_{2p} & -\gamma_0 f(\vec{k}) \\ -\gamma_0 f^*(\vec{k}) & \epsilon_{2p} \end{pmatrix}, \quad (1.23)$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 1 & s_0 f(\vec{k}) \\ s_0 f^*(\vec{k}) & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.24)$$

el valor de la autoenergía viene dada por $\det(\mathbf{H} - E\mathbf{S}) = 0$,

$$\begin{vmatrix} \epsilon_{2p} - E & -(\gamma_0 + Es_0)f(\vec{k}) \\ -(\gamma_0 + Es_0)f^*(\vec{k}) & \epsilon_{2p} - E \end{vmatrix} = 0,$$

$$E_{\pm} = \frac{\epsilon_{2p} \pm \gamma_0 |f(\vec{k})|}{1 \mp s_0 |f(\vec{k})|}. \quad (1.25)$$

Los valores para esta expresión fueron tomados de [1] en donde $\gamma_0 = 3,033\text{eV}$, $s_0 = 0,129$, $\epsilon_{2p} = 0$. El valor de ϵ_{2p} es igualado a cero para que el cero de la energía sea igual a la energía del orbital $2p_z$.

La gráfica de la estructura de bandas de la ecuación (1.2.5) se muestra en la Figura 1.2.5. El nivel de Fermi en el grafeno se encuentra en la energía cero; hay dos bandas de energía, a las cuales haremos referencia como la banda de conducción (E_+) y la banda de valencia (E_-). Como se puede observar en la figura, no hay una separación entre las bandas mencionadas en las seis esquinas de la Zona de Brillouin, los puntos K los cuales

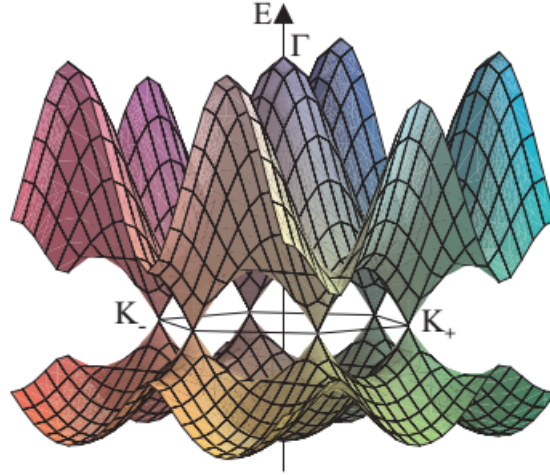


Figura 1.5: Banda de energía en el grafeno. Imagen tomada de [1] el valor del parámetro $\gamma_0 = 3,033eV$, $s_0 = 0,129$, $\epsilon_{2p} = 0$.

separamos en puntos K_+ y K_- como se ve en la gráfica, las esquinas del Grafeno. Cerca de estos puntos, la dispersión es lineal y pueden ser descritos con una ecuación tipo Dirac, por eso son llamados puntos de Dirac. También se puede observar que la estructura de bandas es asimétrica respecto a la banda de conducción y la banda de valencia.

Capítulo 2

Acoplamiento Espín-Órbita.

2.1. Acoplamiento Espín-órbita en un átomo.

Vamos a estudiar la interacción entre el momento angular intrínseco del electrón y el campo magnético interno en un átomo monoeléctrico. El campo magnético interno que experimenta el electrón en un átomo monoeléctrico es debido a que el núcleo del átomo gira en torno al electrón; este núcleo se encuentra cargado y forma una espira de corriente lo cual produce un campo magnético.

Si el núcleo cargado se mueve con una velocidad $-\vec{v}$, entonces la corriente es:

$$\vec{j} = -e\vec{v}.$$

Según la Ley de Ampere, esto produce un campo Magnético $\vec{B}$ que viene dado por:

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{j} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{e\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3}. \quad (2.1)$$

Recordando la ley de Coulomb, el campo eléctrico $\vec{E}$ viene dado por:

$$\vec{E} = \frac{e}{4\pi\epsilon_0} \frac{\vec{r}}{r^3}, \quad (2.2)$$

sustituyendo en la ecuación (2.1) nos queda:

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}, \quad (2.3)$$

$$\text{con } c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0\epsilon_0}}.$$

El momento magnético dipolar de espín de un electrón pueden tener diferentes orientaciones en el campo magnético interno del átomo y su energía potencial es diferente para

cada una de estas orientaciones. El Hamiltoniano de un átomo monoeléctrico viene dado por:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \mu_s \cdot \vec{B}, \quad (2.4)$$

donde $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(r)$. El Hamiltoniano de un átomo monoeléctrico se puede escribir en términos del momento dipolar magnético del espín del electrón $\mathbf{S}$ donde

$$\mu_s = -\frac{g_s \mu_b}{2\hbar} \mathbf{S},$$

donde g_s es el llamado factor giromagnético de espín y experimentalmente tiene un valor $g_s \simeq 2,0023$ para el electrón [9], y así:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{g_s \mu_b}{2\hbar} \mathbf{S} \cdot \vec{B}. \quad (2.5)$$

Es conveniente escribir el Hamiltoniano en términos de $\mathbf{S}$ y $\mathbf{L}$, veamos las siguientes relaciones:

$$-e\vec{E} = \vec{F} \quad \text{y} \quad \vec{F} = -\frac{dV(r)}{dr} \frac{\vec{r}}{r}.$$

Con estas dos relaciones nos queda que la ecuación (2.3) se puede escribir como:

$$\vec{B} = -\frac{1}{ec^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{v} \times \vec{r}. \quad (2.6)$$

Haciendo una multiplicación y una división por la masa del electrón se puede escribir en términos del momento angular orbital $\mathbf{L}$ que viene dado por $\mathbf{L} = \vec{r} \times m\vec{v} = -m\vec{v} \times \vec{r}$ y así:

$$\vec{B} = -\frac{1}{emc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \mathbf{L}, \quad (2.7)$$

con esto el Hamiltoniano queda escrito como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{g_s \mu_b}{2mec^2 \hbar} \frac{1}{r} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L},$$

con $g_s \approx 2$ y $\mu_b = \frac{e\hbar}{2m}$; entonces

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L}. \quad (2.8)$$

Si ahora consideramos que existe un campo magnético externo, el Hamiltoniano será:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2m^2 c^2} \frac{1}{r} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} - \mu_L \cdot \vec{B} - \mu_S \cdot \vec{B}. \quad (2.9)$$

El segundo término de la ecuación (2.9) es debido a la interacción espín órbita, el tercero es por la interacción entre el momento orbital con el campo magnético externo y el último corresponde a la interacción del momento intrínseco de espín con el campo magnético externo. Esta ecuación puede escribirse como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} + \frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \vec{B} + \frac{e}{m} \mathbf{S} \cdot \vec{B}. \quad (2.10)$$

2.2. Acoplamiento Espín-órbita en un sólido.

2.2.1. Simetrías de inversión

En los sólidos la forma en como se comportan los electrones viene dada por las bandas de energía $E(k)$ y por su vector de onda k . El acoplamiento espín-órbita tiene efectos sobre las bandas de energía; consideremos el Hamiltoniano para la interacción espín-órbita, a la cual se le agrega un potencial simétrico en el espacio $V(r)$ y se puede reescribir de la siguiente manera:

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + \frac{1}{4mc^2} \sigma \times \nabla V(r) \cdot \mathbf{P} + V(r). \quad (2.11)$$

La función de onda para el Hamiltoniano anterior, según el teorema de Bloch tiene la siguiente forma:

$$\Psi_{k,\sigma}(X) = \exp^{ik \cdot r} \eta_{k,\sigma}(r), \quad (2.12)$$

donde $\eta_{k,\sigma}(r)$ es una función periódica, σ denota un índice de espín y es un sistema sin campo magnético externo.

A continuación daremos una descripción de los elementos de las operaciones de inversión espacial y temporal para entender como funcionan estas simetrías en los sólidos; el operador de inversión temporal es $\mathcal{T} = U\mathcal{T}_0$, donde $\mathcal{T}_0$ es la operación de conjugación compleja que convierte al momento $P \rightarrow -P$ y deja invariante la posición $r \rightarrow r$; U es un operador unitario de espín que conmuta con P y r pero cambia la dirección del espín $\sigma \rightarrow -\sigma$.

El hamiltoniano (2.11) es invariante ante transformaciones temporales por lo que conmuta con $\mathcal{T}$ [10]; además, (2.12) es autofunción de dicho hamiltoniano con autoestados reales E , con esto se tiene que:

$$\mathcal{T}\mathbf{H}\Psi_{k,\sigma}(r) = \mathbf{H}\mathcal{T}\Psi_{k,\sigma}(r) = E\mathcal{T}\Psi_{k,\sigma}(r). \quad (2.13)$$

Este operador de inversión temporal, actúa sobre la función de onda de la siguiente manera:

$$\mathcal{T}\Psi_{k,\sigma}(r) = \Psi_{-k,-\sigma}(r), \quad (2.14)$$

lo que genera energías degeneradas:

$$E_{\sigma}(k) = E_{-\sigma}(-k). \quad (2.15)$$

En las inversiones espaciales tenemos el operador $\mathcal{K}$ que cambia $r \rightarrow -r$ $P \rightarrow -P$ y como conmuta con σ no cambia la dirección del espín. El hamiltoniano (2.11) es invariante bajo transformaciones espaciales por lo que conmuta con el operador $\mathcal{K}$ y su autofunción cumple la siguiente relación:

$$\mathcal{K}\Psi_{k,\sigma}(r) = \Psi_{-k,\sigma}(-r), \quad (2.16)$$

por lo que la energía se degenera de la siguiente manera:

$$E_{\sigma}(k) = E_{\sigma}(-k). \quad (2.17)$$

Si aplicamos ambos operadores nos conduce a una degeneración de energía $E_{\sigma}(k) = E_{-\sigma}(k)$, ya que ambas cambian el vector de onda $k \rightarrow -k$. Esto se denomina degeneración de espín. Ahora, si el sistema no tiene simetría de inversión entonces no habrá degeneración de espín $E_{\sigma}(k) \neq E_{-\sigma}(k)$, obteniéndose un gap en la energía que se manifiesta con dos niveles de energía, una para cada componente de espín.

2.2.2. Interacción espín-órbita en dos dimensiones.

En los sólidos la interacción espín órbita puede ser producida por la ausencia de simetrías de inversión en el bulto o por la ausencia de simetrías de inversión estructural en los cristales. Entre estos tipos de interacción se encuentran los acoplamientos tipo Dresselhaus y Rashba. Si consideramos un sistema bidimensional, el Hamiltoniano para una partícula que está en un sistema en ausencia simetría de inversión viene dado por:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_D + \mathbf{H}_R,$$

donde H_D viene dado por:

$$\mathbf{H}_D = \beta k_x (k_y^2 - k_z^2) \boldsymbol{\sigma}_x + p.c. \quad (2.18)$$

La expresión (2.18) corresponde al hamiltoniano de Dresselhaus y es originada por la asimetría en el bulto. El elemento k_i corresponde con el vector de onda sobre los ejes

principales del cristal; $p.c$ son permutaciones cíclicas para los índices. Como estamos en un sistema bidimensional el confinamiento se encuentra en $[001]$, entonces $\langle k_z \rangle = 0$, y $\langle k_z^2 \rangle \approx \pi/d^2$ donde d es el tamaño del confinamiento. Los términos k^3 son despreciados y por lo tanto nos queda una expresión para el hamiltoniano:

$$\mathbf{H}_D = \beta(k_y \boldsymbol{\sigma}_y - k_x \boldsymbol{\sigma}_x). \quad (2.19)$$

Por otro lado, $\mathbf{H}_R$ viene dado por:

$$\mathbf{H}_R = \lambda \boldsymbol{\sigma} \cdot (k \times \nabla V). \quad (2.20)$$

Esta es la expresión para el hamiltoniano de Rashba y se origina por la ausencia de simetría de inversión estructural debido a un potencial V externo no simétrico. Si tomamos un potencial que sólo varíe a lo largo del eje z , la expresión (2.20) tomará la forma:

$$\mathbf{H}_R = \alpha (k_y \boldsymbol{\sigma}_x - k_x \boldsymbol{\sigma}_y). \quad (2.21)$$

Es importante destacar que existe un campo magnético efectivo dentro del material, lo cual hace posible la precesión del espín. El valor de expectación del operador de espín $\mathbf{S}$, $\langle \mathbf{S} \rangle$, nos da la dirección del espín; este valor de expectación es paralelo al campo magnético efectivo, de manera análoga al espín cuando es aplicado un campo magnético externo.

2.3. Acoplamiento espín órbita en el Grafeno

En el grafeno hay dos tipos de interacción espín órbita, de tipo Rashba e intrínseca. En el artículo de Hongki Min y colaboradores [11] se mostró que una interacción espín-órbita Intrínseca puede generar un gap en la energía y convertir el grafeno en un aislante, debido a que ya no se toca la banda de conducción con la banda de valencia.

La interacción espín órbita tipo Rashba, como se estudió en la sección anterior, se genera por la presencia de un campo eléctrico externo $\vec{E}$ perpendicular al plano, eliminando la simetría de inversión en el plano de grafeno, el término del Hamiltoniano correspondiente a esta interacción viene dada por:

$$i\lambda_R \sum_{n\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{d}}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}, \quad (2.22)$$

donde λ_R es la constante de acoplamiento Rashba, $\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger$, $\mathbf{c}_{n+1\sigma}$ son los operadores de creación y aniquilación respectivamente, $\vec{\mathbf{S}}$ el vector de espín y $\hat{\mathbf{d}}_n$ son los vectores unitarios que van de la posición de un átomo a un primer vecino.

El parámetro λ_R viene dado por:

$$\lambda_R = \frac{eEz_0}{3(sp\sigma)}\xi, \quad (2.23)$$

donde E es el campo externo perpendicular al plano del grafeno, z_0 es proporcional al tamaño atómico del carbono, $(sp\sigma)$ es el parámetro de salto de un orbital a otro derivado del modelo tight-binding y ξ determina que tan intenso es este acoplamiento según [11].

La interacción espín óbita intrínseca propia del Grafeno, que depende de campos eléctricos inherentes a su estructura cristalina y viene dado por:

$$i\lambda_{EO} \sum_{n\sigma} \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}, \quad (2.24)$$

donde λ_{EO} es la constante de acoplamiento de la interacción espín-órbita intrínseco que viene dado por:

$$\lambda_{EO} = \frac{|s|}{18(sp\sigma)^2} \xi^2, \quad (2.25)$$

con $|s|$ el parámetro de salto de un orbital a otro derivado del modelo tight-binding, los demás parámetros ya fueron mencionados anteriormente. Según [11] las estimaciones encontradas para λ_R y λ_{EO} sugieren que estos efectos serán fácilmente observables en muestras ideales a temperaturas por debajo de los 0.01 K; por lo que nuestro trabajo se realizará muy bajas temperaturas.

Capítulo 3

Funciones de Green y el método de la ecuación de movimiento.

3.1. Valores medios en Mecánica cuántica.

Para describir la evolución temporal de sistemas físicos comenzaremos con un ejemplo sencillo, el promedio en Mecánica Cuántica. Siguiendo el orden de [12], consideramos un operador A que actúa sobre un sistema:

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) \equiv \langle \Psi(t) | \mathbf{A} | \Psi(t) \rangle, \quad (3.1)$$

donde $|\Psi(t)\rangle$ está normalizado y describe el estado del sistema en un tiempo t . A continuación introduciremos el **Operador de Evolución temporal** el cual se define a través de su acción sobre el estado $|\Psi(t')\rangle$, en cierto instante t' , del sistema:

$$|\Psi(t)\rangle \equiv \mathbf{U}(t, t') |\Psi(t')\rangle. \quad (3.2)$$

Este operador evoluciona en el tiempo el estado desde t' hasta t . Algunas propiedades del operador de evolución temporal:

1. $\mathbf{U}^{-1}(t, t') = \mathbf{U}(t', t)$.
 2. $\mathbf{U}^\dagger(t, t') = \mathbf{U}^{-1}(t, t')$.
 3. Por las dos propiedades anteriores $\mathbf{U}^\dagger(t, t') = \mathbf{U}(t', t)$.
 4. $\mathbf{U}(t_0, t_0) = \mathbf{1}$.
 5. $\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{U}(t, t'') \mathbf{U}(t'', t')$.
-

6. Aplicando la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}(t, t')}{\partial t} = \mathbf{H}_t \mathbf{U}(t, t'), \quad i\hbar \frac{\partial \mathbf{U}(t, t')}{\partial t'} = -\mathbf{H}_t \mathbf{U}(t, t'),$$

donde $\mathbf{H}_t$ es el Hamiltoniano que describe el sistema en estudio y el índice t indica una dependencia temporal.

Con la tercera propiedad, de las mencionadas anteriormente, se obtiene;

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t') | \mathbf{U}(t', t). \quad (3.3)$$

Usando las propiedades 1 y 6 podemos escribir la forma integral del operador de evolución temporal como [13]:

$$\mathbf{U}(t, t') = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \mathbf{H}_{t_1} \mathbf{U}(t, t'). \quad (3.4)$$

Luego de varias interacciones la ecuación (3.4) puede escribirse como:

$$\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{H}_{t_1} \mathbf{H}_{t_2} \dots \mathbf{H}_{t_n} \quad (3.5)$$

$$(t \geq t_1 \geq t_2 \geq \dots \geq t_n \geq t').$$

El orden temporal debe ser observado, ya que los operadores $\mathbf{H}_{t_i}$ para diferentes tiempos no necesariamente conmutan.

Para más reordenamientos, se introduce un operador especial [13]:

Operador cronológico de Dyson.

$$\mathbf{T}_D(\mathbf{A}(t_1)\mathbf{B}(t_2)) = \begin{cases} \mathbf{A}(t_1)\mathbf{B}(t_2) & \text{para } t_1 > t_2, \\ \pm \mathbf{B}(t_2)\mathbf{A}(t_1) & \text{para } t_2 > t_1. \end{cases} \quad (3.6)$$

donde $\pm$ indica si es un operador bosónico o fermiónico respectivamente. Veamos por ejemplo, como actúa $\mathbf{T}_D$ sobre un producto de tres operadores fermiónicos ($\mathbf{A}(t_1), \mathbf{B}(t_2), \mathbf{C}(t_3)$)

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}_D \mathbf{A}(t_1) \mathbf{B}(t_2) \mathbf{C}(t_3) &= \Theta(t_1, t_2) \Theta(t_2, t_3) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{B}(t_2) \mathbf{C}(t_3) \\
&- \Theta(t_1, t_3) \Theta(t_3, t_2) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{C}(t_3) \mathbf{B}(t_2) \\
&- \Theta(t_2, t_1) \Theta(t_1, t_3) \mathbf{B}(t_2) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{C}(t_3) \\
&+ \Theta(t_2, t_3) \Theta(t_3, t_1) \mathbf{B}(t_2) \mathbf{C}(t_3) \mathbf{A}(t_1) \\
&+ \Theta(t_3, t_1) \Theta(t_1, t_2) \mathbf{C}(t_3) \mathbf{A}(t_1) \mathbf{B}(t_2) \\
&- \Theta(t_3, t_2) \Theta(t_2, t_1) \mathbf{C}(t_3) \mathbf{B}(t_2) \mathbf{A}(t_1).
\end{aligned}$$

En general este resultado consiste en $n!$ términos cuando el operador $\mathbf{T}_D$ se aplica a n operadores. De este modo, el operador de evolución temporal se puede representar de forma compacta en la forma siguiente:

$$\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{T}_D \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt'' \mathbf{H}_{t''} \right). \quad (3.7)$$

Un caso especial es un sistema cerrado:

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0 \rightarrow \mathbf{U}_0(t, t') = \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(t - t') \right). \quad (3.8)$$

Luego, la ecuación (3.1) se puede escribir como:

$$\langle \mathbf{A} \rangle(t) = \langle \Psi(t') | \mathbf{U}(t', t) \mathbf{A} \mathbf{U}(t, t') | \Psi(t') \rangle; \quad (3.9)$$

Esta combinación de $\mathbf{U}(t', t) \mathbf{A} \mathbf{U}(t, t')$ es conocida como la **Representación de Heisenberg** del operador $\mathbf{A}$, que se denota como [12] :

$$\mathbf{A}(t) = \mathbf{U}(t', t) \mathbf{A} \mathbf{U}(t, t'), \quad (3.10)$$

en $\mathbf{A}(t)$ no se considera la dependencia en t' ya que con frecuencia se consideran situaciones donde t' es un instante de tiempo dado [12]. El operador dependiente de t satisface la ecuación de movimiento de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = [\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]. \quad (3.11)$$

la cual se obtiene usando la ecuación (3.10) y la sexta propiedad del operador de evolución temporal mencionada anteriormente.

3.1.1. Matriz Densidad y Sistemas Macroscópicos.

Los promedios temporales en Mecánica Cuántica pueden ser reescritos convenientemente en términos de la **Matriz Densidad** $\rho(t)$ para el estudio de sistemas macroscópicos. Usando una base arbitraria $\{|\alpha\rangle\}$, el promedio temporal (3.1) puede reescribirse:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{A} \rangle(t) &= \langle \Psi(t) | \mathbf{A} | \Psi(t) \rangle \\ &= \langle \Psi(t) | \mathbf{A} \left(\sum_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha| \right) | \Psi(t) \rangle \\ &= \sum_{\alpha} \langle \alpha | \Psi(t) \rangle \langle \Psi(t) | \mathbf{A} | \alpha \rangle \\ &= \text{Tr}(|\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)| \mathbf{A}).\end{aligned}$$

Se denomina **Matriz Densidad** a:

$$\rho(t) \equiv |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (3.12)$$

La cual satisface:

1. Condición de normalización $\text{Tr}(\rho(t)) = 1$.
2. Ecuación de Von Neumann $i\hbar \frac{d\rho(t)}{dt} = [\mathbf{H}, \rho(t)]$.

Es fácil ver que $\rho^2(t) = \rho(t)$, por ende $\text{Tr}(\rho^2(t)) = 1$.

Para un Hamiltoniano de la forma:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V_t, \quad (3.13)$$

se cumple que:

$$\rho(t) = \mathbf{U}(t, t') \rho_D(t') \mathbf{U}(t', t), \quad (3.14)$$

donde $\rho_D(t')$ es la matriz densidad en la representación de Dirac (representación de interacción) y

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{A} \rangle(t) &= \text{Tr}(\rho(t) \mathbf{A}) \\ &= \text{Tr}(\rho_D(t') \mathbf{A}_D(t)) \\ &= \text{Tr}(\rho_D(t') \mathbf{U}(t', t) \mathbf{A}_D(t) \mathbf{U}(t, t')).\end{aligned}$$

3.1.2. Respuesta lineal.

Para introducir las funciones de Green lo conectaremos con un problema físico, ejemplo tomado de [13]:

Vamos a introducir la respuesta-lineal teórica. El sistema será descrito por el siguiente Hamiltoniano:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V_t, \quad (3.15)$$

donde V_t describe la interacción del sistema con un campo aplicado (una perturbación). $\mathbf{H}_0$ describe al sistema libre. Debido a las interacciones entre partículas, los valores medios de $\mathbf{H}$ no siempre se puede resolver de manera exacta.

Se asume el campo escalar F_t para acoplarse con el observable $\mathbf{B}$ del sistema de la siguiente manera:

$$V_t = \mathbf{B}F_t, \quad (3.16)$$

donde $\mathbf{B}$ es un operador y F_t es un número complejo. Sea $\mathbf{A}$ un observable no dependiente explícitamente del tiempo, cuyo valor de expectación $\langle \mathbf{A} \rangle$ está asociado con una cantidad medible. Se desea conocer como $\langle \mathbf{A} \rangle$ responde a la perturbación V_t . Sin el campo aplicado tenemos:

$$\langle \mathbf{A} \rangle_0 = Tr(\boldsymbol{\rho}_0 \mathbf{A}), \quad (3.17)$$

donde $\boldsymbol{\rho}_0$ es la matriz de densidad del sistema sin campo:

$$\boldsymbol{\rho}_0 = \frac{\exp(-\beta \mathbf{H}_0)}{Tr(\exp(-\beta \mathbf{H}_0))}. \quad (3.18)$$

Promediamos sobre el conjunto gran canónico:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \mu \mathbf{N}, \quad (3.19)$$

donde μ es el potencial químico. Ahora, si encendemos el campo F_t , la matriz densidad se corresponde con:

$$\boldsymbol{\rho}_0 \rightarrow \boldsymbol{\rho}_t.$$

Esto afecta al valor de expectación de $\langle \mathbf{A} \rangle$ de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{A} \rangle_t = Tr(\boldsymbol{\rho}_t \mathbf{A}). \quad (3.20)$$

La ecuación de movimiento para la matriz densidad viene dada por:

$$i\hbar \frac{d\rho_t}{dt} = [\mathbf{H}_0, \rho_t]_- + [V_t, \rho_t]_- . \quad (3.21)$$

Si asumimos que el campo fue encendido en un momento t arbitrario, podemos usar en la ecuación (3.21) la condición de contorno:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t = \rho_0. \quad (3.22)$$

Ahora, cambiaremos a la representación de Dirac de la siguiente manera, en donde $t_0 = 0$:

$$\rho_t^D(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right) \rho_t \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right). \quad (3.23)$$

La ecuación de movimiento viene dada por:

$$\frac{d\rho_t^D(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [V_t^D(t), \rho_t^D(t)]_- , \quad (3.24)$$

con la condición (3.22) y (3.24) tenemos que:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t^D(t) = \rho_0, \quad (3.25)$$

lo que resulta:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V_{t'}^D, \rho_{t'}^D(t')]_- . \quad (3.26)$$

Esta ecuación puede ser resuelta con precisión iterando:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \rho_t^{D(n)}(t), \quad (3.27)$$

donde,

$$\rho_t^{D(n)}(t) = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \left[V_{t_1}^D(t_1), \left[V_{t_2}^D(t_2), \left[\dots, [V_{t_n}^D(t_n), \rho_0]_- \dots \right]_- \right]_- \right]_- . \quad (3.28)$$

Esta fórmula es exacta, con infinitos términos. Por ende, si asumimos que las perturbaciones externas son lo suficientemente pequeñas como para poder limitarnos a los términos lineales en la perturbación V , queda entonces:

$$\rho_t \approx \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right) [V_{t'}^D(t'), \rho_0]_- \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right). \quad (3.29)$$

En esta expresión ya hemos transformado nuevamente la matriz densidad a la representación de Schrödinger. Ahora podemos insertar (3.29) en (3.20) para calcular el valor de expectación perturbado:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{A} \rangle_t &= \langle \mathbf{A} \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left\{ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right) [V_{t'}^D(t'), \rho_0]_- \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}_0 t\right) \mathbf{A} \right\} \\ &= \langle \mathbf{A} \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left\{ [\mathbf{B}^D(t'), \rho_0]_- \mathbf{A}^D(t) \right\} \\ &= \langle \mathbf{A} \rangle_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \text{Tr} \left\{ \rho_0 [\mathbf{A}^D(t), \mathbf{B}^D(t')]_- \right\}. \end{aligned}$$

Hemos usado la invariancia cíclica de la traza varias veces. Conocemos ahora la reacción del sistema a la interacción, al medir el observable $\mathbf{A}$

$$\Delta A_t = \langle \mathbf{A} \rangle_t - \langle \mathbf{A} \rangle_0 = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' F_{t'} \langle [\mathbf{A}^D(t), \mathbf{B}^D(t')]_- \rangle_0. \quad (3.30)$$

Obsérvese que la reacción del sistema está determinada por un valor esperado del sistema no perturbado. La representación de Dirac de los operadores $\mathbf{A}^D(t), \mathbf{B}^D(t')$ corresponde a la representación de Heisenberg cuando el campo está desactivado.

Definimos ahora una función de Green retardada como:

$$G_{AB}^{ret}(t, t') = \langle \langle A(t); B(t') \rangle \rangle = -i\Theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_- \rangle_0. \quad (3.31)$$

Los operadores aquí siempre están escritos en la representación de Heisenberg en ausencia de interacciones.

La función de Green retardada $G_{AB}^{ret}(t, t')$ describe la reacción del sistema, tal como se manifiesta en el observable $\mathbf{A}$ cuando la perturbación actúa sobre el observable $\mathbf{B}$.

$$\Delta A_t = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' F_{t'} G_{AB}^{ret}(t, t'). \quad (3.32)$$

Usando la transformada de Fourier $F(\omega)$ en la perturbación:

$$F_t = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\omega + i0^+)t\right) F(\omega). \quad (3.33)$$

Como la función de Green en sí misma depende sólo de la diferencia de tiempos $t - t'$, cuando el Hamiltoniano no es explícitamente dependiente del tiempo podemos escribir la ecuación (3.32) de la siguiente forma:

$$\Delta A_t = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) G_{AB}^{ret}(\omega + i0^+) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\omega + i0^+)t\right), \quad (3.34)$$

el término $i0^+$ garantiza el cumplimiento de la condición de contorno de la ecuación (3.22).

3.2. Funciones de Green.

Dado un sistema físico y un par de operadores $\mathbf{A}(t)$ y $\mathbf{B}(t')$ asociados a tal sistema, definimos la función de Green asociada de la forma [12] :

$$G(t, t') \equiv -i\langle \mathbf{T}_c \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle, \quad (3.35)$$

con $\hbar = 1$, la función de Green es un promedio tiempo ordenado sobre las variables del sistema. con la definición (3.6) del operador cronológico de Dyson (también se puede escribir como $\mathbf{T}_c$), la función de Green se escribe como:

$$G(t, t') = -i\Theta(t, t')\langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle \mp i\Theta(t', t)\langle \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) \rangle, \quad (3.36)$$

el símbolo $\mp$ dependerá de si los operadores son bosónicos o fermiónicos respectivamente. La ecuación (3.36) se puede separar en dos nuevas funciones la función de Green:

Función de Green Mayor

$$G^>(t, t') \equiv -i\langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle. \quad (3.37)$$

Función de Green Menor

$$G^<(t, t') \equiv \mp i \langle \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.38)$$

Quedando entonces:

$$G(t, t') = -i\Theta(t, t')G^>(t, t') \mp i\Theta(t', t)G^<(t, t'). \quad (3.39)$$

De la definición de función de función de Green mayor y menor, se pueden obtener las funciones retardadas y avanzadas.

Función de Green Retardada.

$$G^r(t, t') = \Theta(t - t')[G^>(t, t') - G^<(t, t')]. \quad (3.40)$$

Función de Green Avanzada.

$$G^a(t, t') = -\Theta(t' - t)[G^>(t, t') - G^<(t, t')]. \quad (3.41)$$

3.2.1. Ecuaciones de movimiento

La ecuación de movimiento es la variación temporal de la función de Green y se obtiene derivando la ecuación (3.36) respecto a los tiempos (t y t'):

$$\begin{aligned} i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} &= \delta(t, t') \langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle + \Theta(t, t') \left\langle \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \mathbf{B}(t') \right\rangle \\ &\mp \delta(t', t) \langle \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) \rangle \pm \Theta(t', t) \left\langle \mathbf{B}(t') \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.42)$$

$$\begin{aligned} -i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} &= \delta(t, t') \langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle - \Theta(t, t') \left\langle \mathbf{A}(t) \frac{d\mathbf{B}(t')}{dt'} \right\rangle \\ &\mp \delta(t', t) \langle \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) \rangle \mp \Theta(t', t) \left\langle \frac{d\mathbf{B}(t')}{dt'} \mathbf{A}(t) \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.43)$$

Recordando que la evolución temporal de los operadores viene dada por:

$$\mathbf{P}(t) \equiv \exp(i\mathbf{H}t)\mathbf{P}\exp(-i\mathbf{H}t).$$

Donde $\mathbf{H}$ es el Hamiltoniano, por lo tanto:

$$\frac{d\mathbf{P}(t)}{dt} = -i [\mathbf{P}(t), \mathbf{H}].$$

Entonces, la ecuación de movimiento respecto de t queda:

$$i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle - i \Theta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t) \mathbf{H}]_{-} \mathbf{B}(t') \rangle \\ \mp i \Theta(t', t) \langle \mathbf{B}(t') [\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]_{-} \rangle. \quad (3.44)$$

$$i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle - i \langle \mathbf{T}_c [\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]_{-} \mathbf{B}(t') \rangle. \quad (3.45)$$

Donde $[P, Q]_{\mp} = PQ \mp QP$ es el conmutador o el anticonmutador respectivamente entre P y Q .

La ecuación de movimiento respecto de t' queda:

$$-i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle + i \Theta(t, t') \langle \mathbf{A}(t) [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_{-} \rangle \\ \pm i \Theta(t', t) \langle [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_{-} \mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.46)$$

$$-i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle + i \langle \mathbf{T}_c \mathbf{A}(t) [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_{-} \rangle. \quad (3.47)$$

Del segundo término en las ecuaciones de movimiento surge una nueva función de Green por el nuevo promedio de pares de operadores, entonces se obtendrá un sistema de ecuaciones de movimiento, con tantas ecuaciones como funciones de Green estén presentes. Podría darse el caso en el que aparezcan infinitas funciones de Green, de ser así, es necesario que se impongan condiciones en el sistema físico para reducir el problema a un sistema de finitas ecuaciones. Una vez obtenido el sistema de ecuaciones de movimiento asociado a todas las funciones de Green del problema, tenemos un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden acoplado. En general cualquier método de resolución es válido, pero en nuestro caso tomaremos la transformada de Fourier del sistema. Esto resulta en un sistema algebraico de ecuaciones acopladas, escrito convenientemente en el espacio de frecuencias.

3.2.2. Equilibrio termodinámico.

En equilibrio termodinámico los promedios se evalúan de la forma:

$$\langle \mathbf{A}_0(t) \mathbf{A}_1(t) \dots \mathbf{A}_{n-1}(t) \rangle \equiv \frac{\text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H} \mathbf{A}_0(t) \dots))}{\text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}))}. \quad (3.48)$$

donde $\mathbf{A}(t) \equiv \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}t)$, $\hbar = 1$, $\beta = 1/k_B T$, T es la temperatura del sistema y $\mathbf{H}$ es el Hamiltoniano del sistema.

Se tiene la siguiente propiedad:

$$[\exp(\pm i\mathbf{H}t), \exp(-\beta \mathbf{H})] = 0. \quad (3.49)$$

Esta propiedad (3.49) simplifica las evaluaciones de los promedios:

Las funciones $G_{AB}^{\oplus}(t, t')$, con $\oplus = >, < (a), (r)$; dependen solo de la diferencia de sus argumentos $(t-t')$ en estado estacionario, ya que:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t')) &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}t) \exp(i\mathbf{H}t') \mathbf{B} \exp(-i\mathbf{H}t')) \\ &= \text{Tr}(\exp(-i\mathbf{H}t') \exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}(t-t')) \mathbf{B}) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(-i\mathbf{H}t') \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}(t-t')) \mathbf{B}) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(i\mathbf{H}(t-t')) \mathbf{A} \exp(-i\mathbf{H}(t-t')) \mathbf{B}) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{A}(t-t') \mathbf{B}). \end{aligned}$$

Con esto:

$$G_{AB}^{\oplus}(t, t') = G_{AB}^{\oplus}(t-t', 0) = G_{AB}^{\oplus}(0, t'-t). \quad (3.50)$$

Así, la transformada de Fourier es diagonal en frecuencias:

$$G_{AB}^{\oplus}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{1}{2\pi} \exp(-i\omega(t-t')) G_{AB}^{\oplus}(\omega). \quad (3.51)$$

Veamos una relación interesante y conveniente entre la función de Green mayor y menor [12].

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t')) &= \text{Tr}(\mathbf{B}(t') \exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(\beta \mathbf{H}) \mathbf{B}(t') \exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \exp(i\mathbf{H}(-i\beta)) \mathbf{B}(t') \exp(-i\mathbf{H}(-i\beta)) \mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta \mathbf{H}) \mathbf{B}(-i\beta) \mathbf{A}(t)). \end{aligned} \quad (3.52)$$

Luego usando (3.50) y (3.52) podemos llegar a:

$$G_{AB}^>(t, t') = \pm G_{AB}^<(t, t' - i\beta), \quad (3.53)$$

con esto, vemos que las transformadas de Fourier de las funciones de Green mayor y menor obedecen a la siguiente relación:

$$G_{AB}^>(\omega) = \pm \exp(\beta\omega) G_{AB}^<(\omega). \quad (3.54)$$

Veamos relaciones entre las funciones de Green avanzada (ecuación (3.41)) y retardada (ecuación (3.40)):

$$G_{AB}^r(t, t') - G_{AB}^a(t, t') = G_{AB}^>(t, t') - G_{AB}^<(t, t'), \quad (3.55)$$

con la propiedad (3.54) la diferencia entre la función de Green mayor y la función de Green menor queda escrita como:

$$G_{AB}^>(t, t') - G_{AB}^<(t, t') = \pm \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-i\omega(t - t')) (\exp(\beta\omega)) G_{AB}^<(\omega). \quad (3.56)$$

Por ende, con (3.55) y (3.56) se obtiene que:

$$G_{AB}^<(\omega) = \pm \frac{G_{AB}^r(\omega) - G_{AB}^a(\omega)}{\exp(\beta\omega) \mp 1}. \quad (3.57)$$

Es muy conveniente esta relación pues como vimos en el ejemplo de la sección anterior, los sistemas físicos mayormente son descritos por la función de Green menor; pero es mucho más simple hallar las funciones avanzadas y retardadas por el método de la ecuación de movimiento.

Capítulo 4

Corrientes Persistentes

Las corrientes persistentes son aquellas, que como su nombre lo dice, no varían en el tiempo. Es un efecto cuántico en sistemas microscópicos y mesoscópicos, en el cual una partícula cargada se mueve en una geometría cerrada, como un anillo y en presencia de un flujo magnético. Específicamente, estudiaremos la corriente sin interacción electrón-electrón. Esta corriente se produce para cualquier configuración del anillo, ya que el estado base para el electrón en el anillo es distinto de cero siempre, debido al corrimiento producido por la fase introducida como consecuencia del flujo magnético, y por ende, su momento angular es distinto de cero. Al ser el electrón una partícula cargada con momento angular tiene una corriente asociada sobre el anillo. El cálculo de la corriente en un anillo con varios electrones se puede reducir al cálculo de la corriente asociada a la energía de un electrón para luego sumar cada una de estas corrientes. A continuación describiremos cómo se genera una corriente persistente en un anillo metálico para un solo electrón.

El modelo es un anillo microscópico unidimensional en el que circula un electrón con masa m y carga $-e$ y en donde las condiciones de frontera para la función de onda del electrón son periódicas. Parametrizaremos el anillo de circunferencia L usando la coordenada u . La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que proviene de un Hamiltoniano dado por $\mathbf{H} = \frac{\mathbf{P}^2}{2m}$, viene dada por:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_n(u)}{\partial u^2} = \epsilon_n \psi_n(u), \quad (4.1)$$

en donde la función $\psi_n(u)$ cumple con la condición de periodicidad:

$$\psi_n(u + L) = \psi_n(u).$$

Las autofunciones $\psi_n(u)$ son [5]:

$$\psi_n(u) = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp\left(2\pi i n \frac{u}{L}\right), \quad (4.2)$$

y sus autoenergías ϵ_n son:

$$\epsilon_n = \frac{h^2}{2mL^2} n^2. \quad (4.3)$$

con donde n es el número cuántico principal

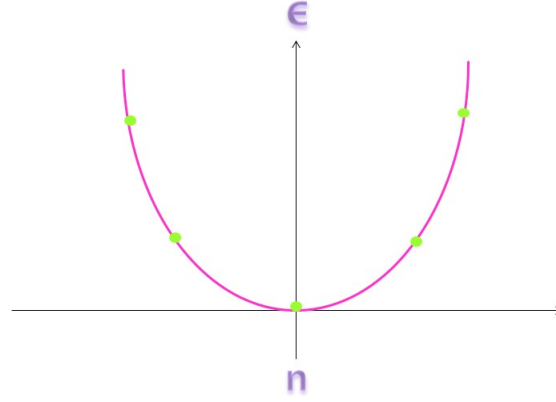


Figura 4.1: Gráfica de energía para el electrón en el anillo. Los puntos verdes son los valores permitidos de energía en el anillo; la línea denota la forma del espectro proveniente de un Hamiltoniano cuadrático en el momento $\mathbf{P}$

Ahora, consideramos los efectos de aplicar un campo magnético uniforme y constante $\vec{B}$ al sistema. Elegimos las coordenadas tal y como se muestran en la figura 4.2 en donde el campo magnético es paralelo al eje Z, siendo perpendicular al plano del anillo. El campo magnético es confinado de tal manera que no interactúa directamente con el anillo, más el Vector Potencial asociado a este sí.

Cuando una partícula cargada, de masa m y carga $-e$ se encuentra en presencia de un campo magnético, el momento canónico cambia para ser $\mathbf{P}_{can} = \mathbf{P}_{mec} - e\vec{A}$, donde $\mathbf{P}_{mec} = m\mathbf{v}$ es el momento mecánico de la partícula asociado a la velocidad $\mathbf{v}$ y $\vec{A}$ es el vector potencial asociado al campo magnético que cumple con la condición $\mathbf{B} = \nabla \times \vec{A}$. Entonces el Hamiltoniano pasa a ser

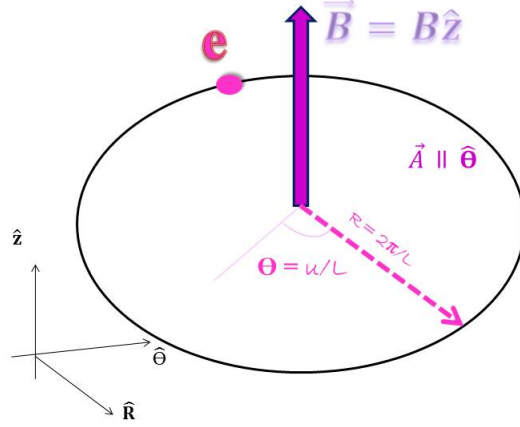


Figura 4.2: Anillo unidimensional.

$$\mathbf{H} = \frac{(\mathbf{P}_{mec} - e\vec{A})^2}{2m}.$$

Para $\vec{B} = B\hat{z}$ podemos definir $\vec{A} = \frac{Br}{2}\hat{\theta}$. También podemos escribir $\vec{A} = \frac{\phi}{L}\hat{\theta}$, donde $\phi = \frac{L^2}{4\pi}B$ es el flujo encerrado por el anillo. La coordenada $u = \frac{L\theta}{2\pi}$ sigue la circunferencia del anillo, de forma que la derivada d/du es siempre tangente al anillo y por ende paralela a $\hat{\theta}$. Con esto, la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo queda escrita como:

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{d}{du} - e\frac{\phi}{L} \right)^2 \psi_n(u) = \epsilon_n \psi_n(u). \quad (4.4)$$

Las autofunciones vienen dadas nuevamente por la ecuación (4.2) mientras que las autoenergías vienen dadas por [5]:

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \left(n - \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2, \quad (4.5)$$

aquí introducimos el cuanto de flujo magnético $\phi_0 = \frac{h}{e}$.

Como se puede observar, para $n = 0$ la energía es distinta de cero, como se observa en la gráfica de la figura 4.3, por ende siempre tiene un mometo angular distinto de

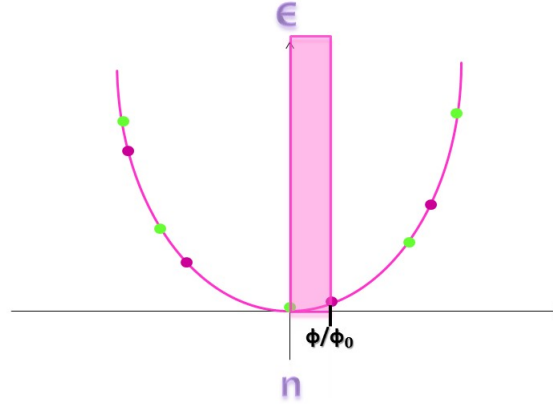


Figura 4.3: Comparación de Gráficas de energía para un electrón en un anillo sin presencia de campo magnético (puntos verdes) y con presencia de campo magnético (puntos rosados).

ceros, lo que da lugar al movimiento perpetuo de la partícula en el anillo y se producen las corrientes persistentes.

4.1. Corrientes persistentes de Carga.

Los electrones tienen una carga asociada $-e$, además del espín, si estos electrones poseen una velocidad, entonces el movimiento de las cargas dará lugar a una corriente de carga. Un ejemplo de esta corriente es la generación de una corriente de carga “pura”, como se ilustra en la figura 4.4. Si tenemos una corriente de carga polarizada con todos los espines hacia arriba que circula hacia la derecha y una corriente de carga polarizada con todos los espines hacia abajo que también circula hacia a la derecha, al sumarlas, los espines se cancelan entre sí quedando una corriente de carga pura.

Para calcular la corriente persistente de carga encontraremos la corriente asociada con cada autoestado. Un electrón, con carga $-e$ que se mueve a una velocidad v a lo largo del anillo, tarda un tiempo $\Delta t = L/v$ en recorrer toda la longitud del anillo (siendo L la longitud de circunferencia del anillo), entonces la corriente media es la carga que pasa por cualquier punto del anillo por unidad de tiempo en un período, $i = -e/\Delta t = -ev/L$. La velocidad de una partícula cargada en un campo magnético se puede escribir como

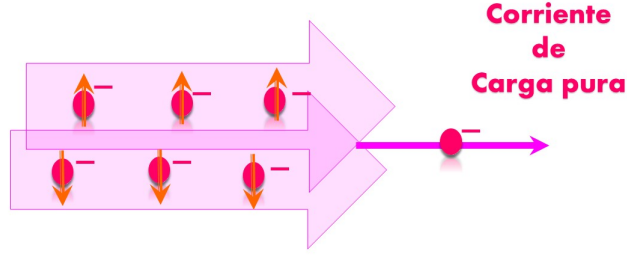


Figura 4.4: Corriente de carga pura.

$v = P_{mec}/m = (P_{can} + eA)/m$, para el sistema que hemos estado considerando, la velocidad v_n asociada con el n -ésimo estado satisface [5, 14]:

$$\begin{aligned}
 v_n \psi_n(u) &= \frac{(P_{can} + eA)}{m} \psi_n(u) \\
 &= \frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{d}{du} + e \frac{\phi}{L} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left(2\pi i n \frac{u}{L} \right) \right) \\
 &= \frac{h}{mL} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right) \frac{1}{\sqrt{L}} \exp \left(2\pi i n \frac{u}{L} \right),
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

entonces la corriente nos queda:

$$\begin{aligned}
 i_n &= \frac{-ev_n}{L} \\
 &= -\frac{eh}{mL^2} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right).
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

De donde se observa que es posible escribir la corriente en términos de la ecuación (4.5) de la siguiente manera:

$$i_n = -\frac{\partial \epsilon_n}{\partial \phi}. \tag{4.8}$$

Ahora consideremos el caso de un anillo con varios electrones, asumimos que los electrones no interactúan. Para encontrar la corriente total I a una temperatura T , sumamos todas las contribuciones de cada nivel con el factor de ponderación $f(\epsilon, \mu, T)$ dada por la función de distribución de Fermi-Dirac.

$$\begin{aligned}
I &= \sum_n i_n f(\epsilon_n, \mu, T) \\
&= \left(1 + \exp \left(-\frac{(\mu - \epsilon_n)}{K_B T} \right) \right)^{-1} \\
&= -\frac{\partial \Omega}{\partial \phi},
\end{aligned} \tag{4.9}$$

donde $\Omega = -K_B T \sum_n \left(\ln \left(1 + \exp \left(\frac{(\mu - \epsilon_n)}{K_B T} \right) \right) \right)$ es el potencial termodinámico gran canónico, donde el índice n también engloba a ambos estados de espín. Suponemos que la temperatura está muy por debajo de la temperatura de Fermi, para que el potencial químico $\mu \approx \epsilon_F$, donde ϵ_F es la energía de Fermi. En el límite de temperaturas bajas $T \rightarrow 0$, la función de distribución de Fermi-Dirac $f(\epsilon_n, \epsilon_F, T)$ se convierte en la función de Heaviside $\Theta(\epsilon_F - \epsilon_n)$. Así la suma de la ecuación (4.9) se convierte en una suma sobre las corrientes de todos los niveles de energía por debajo del nivel de Fermi.

La expresión de la corriente persistente de carga entonces queda [14]:

$$I_c(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} J_c(E) dE, \tag{4.10}$$

donde $J_c(E)$ es la densidad de corriente de carga en general y viene dada por:

$$J_c = \frac{e}{N} \mathbf{V}. \tag{4.11}$$

4.1.1. Corrientes persistentes de carga para un Anillo de Grafeno con interacción Espín-Órbita (EO) tipo Intrínseco y Rashba.

Se desea conseguir las corrientes persistentes en un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento Espín-Órbita tipo Rashba e Intrínseco del grafeno, el cual es atravesado por un flujo de campo magnético de forma perpendicular al plano del anillo como se muestra en la figura 4.5. El sistema en estudio está compuesto por cuatro átomos de carbono, espaciados por el valor del parámetro de red $a = 2,46 \text{Å}$ lo que nos da una longitud de la circunferencia igual a $L \approx 4a$ y un ángulo de separación entre los átomos de $\theta = \pi/2$.

Primero trabajaremos con la densidad de corriente de carga, la ecuación (4.11), con $\mathbf{V}$ dado por:

$$\mathbf{V} = \frac{i}{\hbar} \langle [\mathbf{H}, \mathbf{x}] \rangle,$$

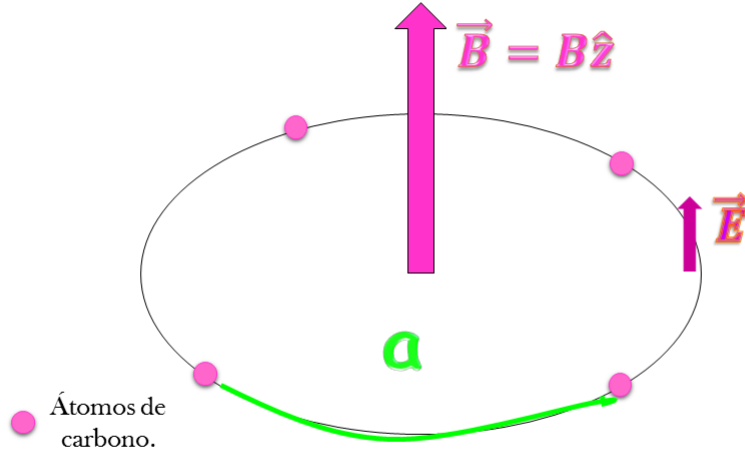


Figura 4.5: Sistema en estudio.

donde $\mathbf{H}$ es el hamiltoniano del grafeno con interacción EO, el cual viene dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & t' \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} + t \sum_n (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger e^{i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma} + h.c.) + i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma} \\ & + i\lambda_R \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

El operador posición $\mathbf{x}$:

$$\mathbf{x} = \sum_j \mathbf{c}_j^\dagger j \mathbf{c}_j, \quad (4.13)$$

así, la densidad de corriente es:

$$J_c = \frac{ie}{\hbar N} [\mathbf{H}, \mathbf{x}]. \quad (4.14)$$

Para calcular el conmutador de $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$ se dividirá el hamiltoniano en cuatro términos de la siguiente manera:

$$\mathbf{H} = \underbrace{t \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}}_{\mathcal{A}} + \underbrace{t \sum_n (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger e^{i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma} + h.c.)}_{\mathcal{B}} + \underbrace{i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}}_{\mathcal{C}} + \underbrace{i\lambda_R \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{\mathbf{d}}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}}_{\mathcal{D}}.$$

El término $\mathcal{A} = t' \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}$ es el de autoenergía¹, t' es el parámetro de salto sobre el mismo sitio, $\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger$ es el operador de creación en el sitio² n , $\mathbf{c}_{n\sigma}$ es el operador de aniquilación sobre el sitio³ n ; el conmutador con el operador $\mathbf{x}$ da como resultado,

$$[\mathcal{A}, \mathbf{x}] = 0 \quad ^4,$$

El término $\mathcal{B} = t \sum_n (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger e^{i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma} + h.c.)$ es el de energía cinética en donde t es el parámetro de salto entre sitios y $\mathbf{c}_{n+1\sigma}$ es el operador de aniquilación en el sitio $n+1$ (primer vecino), y ϕ es la fase debida al flujo de campo magnético presente en el anillo; el conmutador con el operador posición $\mathbf{x}$ es:

$$[\mathcal{B}, \mathbf{x}] = t \sum_n \left(e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} - e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} \right).$$

El término $\mathcal{C} = i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger S_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}$ corresponde al acoplamiento EO tipo Intrínseco del Grafeno^{5 6}, donde λ_{EO} es la magnitud del acoplamiento, S_z es la matriz de espín en la base de $\mathbf{z}$ y $\mathbf{c}_{n+2\sigma}$ es el operador de aniquilación en el sitio $n+2$ (segundos vecinos); $\nu_n = \frac{2}{\sqrt{3}} \mathbf{d}_{n,n+1} \times \mathbf{d}_{n+1,n} = \pm 1$ ^{7 8}. Luego, el conmutador con el operador posición queda:

$$[\mathcal{C}, \mathbf{x}] = i\lambda_{EO} \sum_{n\sigma} \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma},$$

siendo $\sigma = \pm 1$ y $\sigma = 1$ simboliza $\uparrow$ y $\sigma = -1$ simboliza $\downarrow$.

¹Ver apéndice A, ecuación (A.3)

²Ver apéndice A, ecuación (A.1)

³Ver apéndice A, ecuación (A.2)

⁴Ver Apéndice A, ecuación (A.10)

⁵Ver apéndice A, ecuación (A.5)

⁶Ver apéndice A, ecuación (A.6)

⁷Ver apéndice A, ecuación (A.7)

⁸Ver apéndice A, ecuación (A.8)

El término de EO tipo Rashba $\mathcal{D} = i\lambda_R \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{S} \times \mathbf{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}$, donde λ_R es la magnitud del acoplamiento y $\vec{S}$ es el vector de espín⁹. Luego, el conmutador viene dado por:

$$[\mathcal{D}, \mathbf{x}] = -\frac{i}{2}\lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right).$$

Finalmente, el conmutador queda:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, \mathbf{x}] = & t \sum_n \left(e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} - e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} \right) + i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma} \\ & - \frac{i}{2}\lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Al sacar el valor medio de la ecuación (4.15)¹⁰ y definiendo las funciones de Green respectivas para el valor medio de cada par de operadores, la expresión de la densidad de corriente de carga queda:

$$\begin{aligned} J_c = & \frac{ie}{N} \sum_n \left[t \left(e^{i\phi} G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) \right. \\ & \left. - \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.16)$$

Para conseguir el valor de las funciones de Green, procedemos a aplicar la ecuación de movimiento¹¹:

$$i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma, n\sigma}(t)}{dt} = \sum_n \left(\delta(t, 0) \langle \{ \mathbf{c}_{n+1\sigma}, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \} \rangle - i \langle T_c [\mathbf{c}_{n+1\sigma}, \mathbf{H}] \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \right), \quad (4.17)$$

quedando,

$$\begin{aligned} i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma, n\sigma}(t)}{dt} = & -it' \sum_n \langle T_c \mathbf{c}_{n+1\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - it \sum_n e^{i\phi} \langle T_c \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - it \sum_n e^{-i\phi} \langle T_c \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \\ & - i(i) \frac{\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \sigma \langle T_c \mathbf{c}_{n+3\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \\ & - i \frac{\lambda_R}{2} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - \langle T_c \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \right). \end{aligned}$$

⁹Ver apéndice A, ecuación (A.9)

¹⁰Ver apéndice A, sección A.4

¹¹ $\hbar \equiv 1$

Redefiniendo los valores medios como las siguientes funciones de Green:

$$\begin{aligned}
G_{n+2\sigma,n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n\sigma,n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+3\sigma,n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n+3\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n(-\sigma),n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+2(-\sigma),n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n(-\sigma),n\sigma}(t) &\equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle.
\end{aligned}$$

Entonces la ecuación de movimiento queda:

$$\begin{aligned}
i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma,n\sigma}(t)}{dt} &= t' \sum_n G_{n+1\sigma,n\sigma}(t) + t \sum_n (e^{i\phi} G_{n+2\sigma,n\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{n\sigma,n\sigma}(t)) \\
&\quad + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \sigma G_{n+3\sigma,n\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{\lambda_R}{2} \sum_n e^{-i\sigma\theta} (G_{n(-\sigma),n\sigma}(t) - G_{n+2(-\sigma),n\sigma}(t)).
\end{aligned}$$

Realizando este procedimiento para cada función de Green, encontramos una expresión general de la ecuación de movimiento para nuestro sistema:

$$\begin{aligned}
i \sum_n \frac{dG_{n+N(\xi\sigma),n\sigma}(t)}{dt} &= \delta_{n+N(\xi\sigma),n\sigma} \delta(t, 0) + t' \sum_n G_{n+N(\xi\sigma),n\sigma}(t) + t \sum_n (e^{i\phi} G_{n+N+1(\xi\sigma),n\sigma}(t) \\
&\quad + e^{-i\phi} G_{n+N-1(\xi\sigma),n\sigma}(t)) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_{ij} \xi \sigma G_{n+N+2(\xi\sigma),n\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\xi\sigma\theta} \sum_n (G_{n+N-1(-\xi\sigma),n\sigma}(t) - G_{n+N+1(-\xi\sigma),n\sigma}(t)),
\end{aligned} \tag{4.18}$$

con $\xi = \pm 1$.

Para cerrar el sistema de ecuaciones que proviene de las ecuaciones de movimiento para cada función de Green generada, en un sistema de cuatro sitios, veremos el conteo de los mismos en el ejemplo mostrado en la figura 4.6,

Al tener cuatro sitios el número de funciones de Green se cuentan desde $n = 1$ hasta $n = 4$, como se puede apreciar en la ecuación (A.14) y cada función de Green generará un sistema de ecuaciones como el de (A.15). En este sistema se puede ver que aparece al menos una función de Green generada por cada una de las sumas sobre n , correspondientes

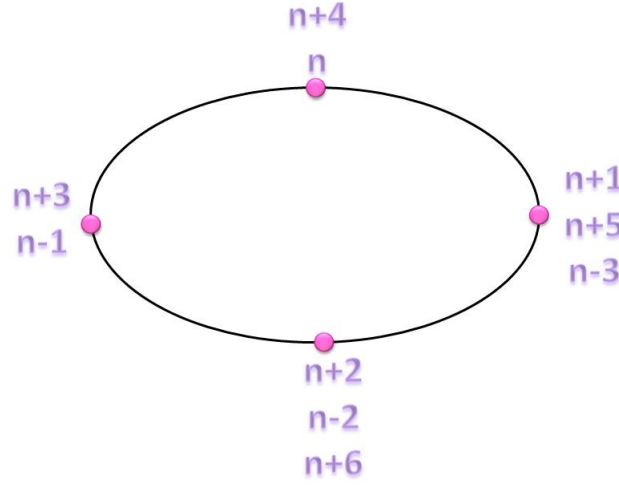


Figura 4.6: Conteo de sitios en el anillo.

a las funciones de Green en la densidad de corriente de carga (4.16), por lo que se reduce a cuatro sistemas de ecuaciones. Los sistemas de ecuaciones resultantes arrojan que todas las funciones de Green que se están sumando, son la misma función, es decir:

$$\sum_{n=1}^4 G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) = G_{2\sigma, \sigma}^<(0) + G_{3\sigma, 2\sigma}^<(0) + G_{4\sigma, 3\sigma}^<(0) + G_{\sigma, 4\sigma}^<(0)$$

$$G_{2\sigma, \sigma}^<(0) = G_{3\sigma, 2\sigma}^<(0) = G_{4\sigma, 3\sigma}^<(0) = G_{\sigma, 4\sigma}^<(0),$$

entonces se puede decir que:

$$\sum_{n=1}^4 G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) = 4G_{2\sigma, \sigma}^<(0),$$

por lo que sólo usaremos un sistema de ecuaciones y reducimos la densidad de corriente de carga a:

$$J_c = i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma, \sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{4\sigma, \sigma}^<(0) \right) + i\lambda_{EO}\nu_n\sigma G_{3\sigma, \sigma}^<(0) \right. \\ \left. + \frac{\lambda_R}{2}\sigma \left(G_{2(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{4(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) \right) \right]. \quad (4.19)$$

4.1.2. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno.

Para el caso en el que no hay interacción EO, la ecuación (4.19) se reduce a:

$$J_c = it \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(0) \right), \quad (4.20)$$

en la cual, una vez resuelto el sistema de ecuaciones y realizando las transformadas de Fourier queda:

$$J_c = \frac{t}{e^{\beta\omega} + 1} \left(\cos(\phi) \left(\pi(\delta(\omega + 2t\sin(\phi)) - \delta(\omega - 2t\sin(\phi))) - \pi(\delta(\omega - 2t\sin(\phi)) - \delta(\omega + 2t\sin(\phi))) \right) - 2\pi\sin(\phi)(\delta(\omega + 2t\cos(\phi)) - \delta(\omega - 2t\cos(\phi))) \right) \quad (4.21)$$

En la gráfica 4.7 vemos como la densidad de corriente de carga se degrada con la temperatura. Para ciertos valores de flujo magnético observamos cambios abruptos en los valores de la densidad, estos puntos se corresponden con los puntos de Dirac en el espectro de energía, donde aunque es continua la derivada no está definida.

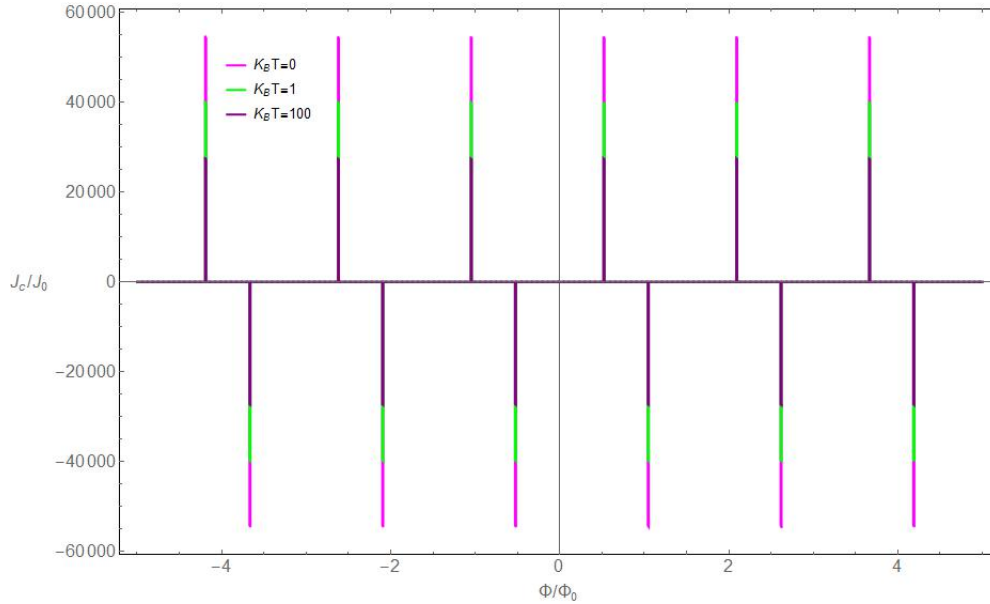


Figura 4.7: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno variando la temperatura con $t = 1$.

Realizamos una integración numérica de la densidad de corriente de carga para obtener la corriente. Como se muestra en la gráfica 4.8 la corriente realiza cambios abruptos

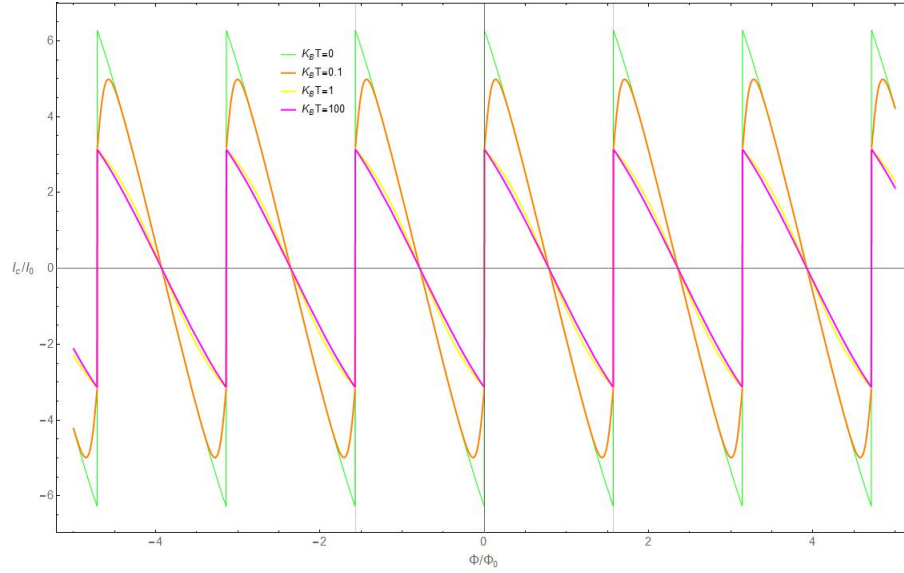


Figura 4.8: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno variando la temperatura.

de signo, al igual que en la densidad, para determinados valores de flujo. Una vez realizados estos cambios abruptos, la corriente tiene una pendiente que cambia de signo más "suavemente", asemejando a unos dientes de sierra. Vemos que si aumentamos un poco la temperatura hasta llegar a $K_B T = 1$, los picos se suavizan, disminuyendo la amplitud de la corriente. Para valores muy altos de temperatura, como $K_B T = 100$, la amplitud de la corriente disminuye considerablemente y se regresa a la forma de dientes de sierra.

4.1.3. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco.

Para el caso en el que solo hay interacción EO tipo intrínseco, la ecuación (4.19) se reduce a:

$$J_c = i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(0) \right) + i \lambda_{EO} \nu_n \sigma G_{3\sigma,\sigma}^<(0) \right], \quad (4.22)$$

en la cual, una vez resuelto el sistema de ecuaciones y realizando las transformadas de Fourier con $\nu_n = 1$ queda:

$$J_c = \frac{4t \sin \phi \cos \phi (\lambda_{EO}^2 + 4t^2 \sin^2 \phi + (1 - 2t)\omega^2)}{(e^{\beta\omega} + 1) (\lambda_{EO}^2 + 4t \sin \phi (t \sin \phi - \omega) + \omega^2) (\lambda_{EO}^2 + 4t \sin \phi (t \sin \phi + \omega) + \omega^2)}. \quad (4.23)$$

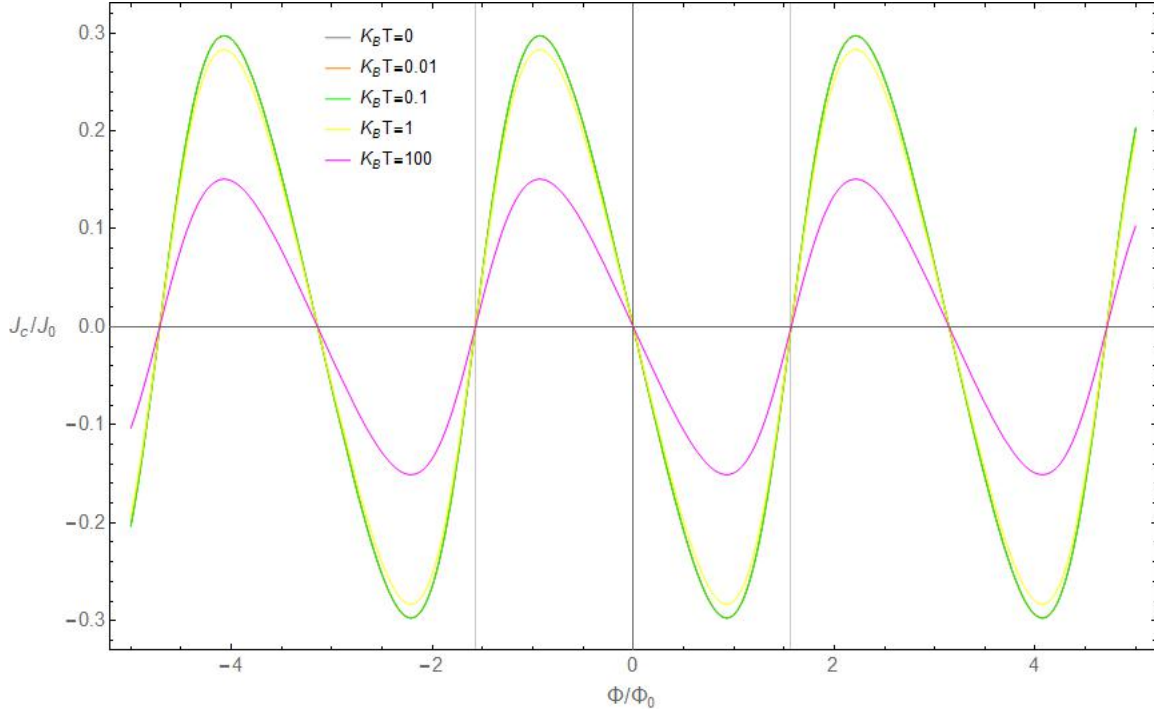


Figura 4.9: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura.

En la gráfica 4.9 se observa cómo la densidad de corriente de carga se degrada con la temperatura. La asimetría en los picos cercanos a valores enteros del flujo magnético nos indica que los electrones superficiales en estos niveles tienden a cambiar de la banda de valencia a la banda de conducción de forma más abrupta, en comparación con los electrones que se encuentran en niveles alrededor de flujo igual a cero y valores semi enteros. Lo que nos dice que en los puntos cercanos a valores enteros del flujo el cambio de la derivada de la energía es menos suave, comportamiento típico del Grafeno al rededor de los puntos de Dirac donde en el caso de cero acoplamiento EO es una discontinuidad como se observa en la gráfica 4.7.

Los efectos de temperatura son más relevantes alrededor de estos puntos, obteniéndose estados “protegidos” contra la temperatura en las cercanías de los puntos con valores semi-enteros del flujo. Claramente la densidad de corriente no degrada para aumentos pequeños de temperatura, se necesitan 4 órdenes de magnitud para obtener una disminución de aproximadamente la mitad en la intensidad de la densidad. Para esta comparación utilizamos un valor para el parámetro de acoplamiento EO Intrínseco de $\lambda_{EO} = 0,07$, pero usualmente es 3 órdenes más pequeño en magnitud; esto da evidencia de que la presencia de un acoplamiento EO grande ensancha la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción produciendo así que los electrones en los niveles poco profundos

necesiten energías mayores para promoverse a la banda de conducción. Esto implica que la ocupación dependiente de temperatura en estos niveles disminuye, protegiendo así la corriente para valores del parámetro de EO entre 0.00007 y 0.07. Como se observa en la gráfica 4.10. Para valores mayores del acoplamiento EO se abre más la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción y la forma de la corriente converge a una con oscilaciones típicas de un semiconductor. Esto da pie a pensar que el espectro de energía pasa de ser lineal a tomar una forma parabólica y con un ancho de brecha suficiente para degradar la corriente.

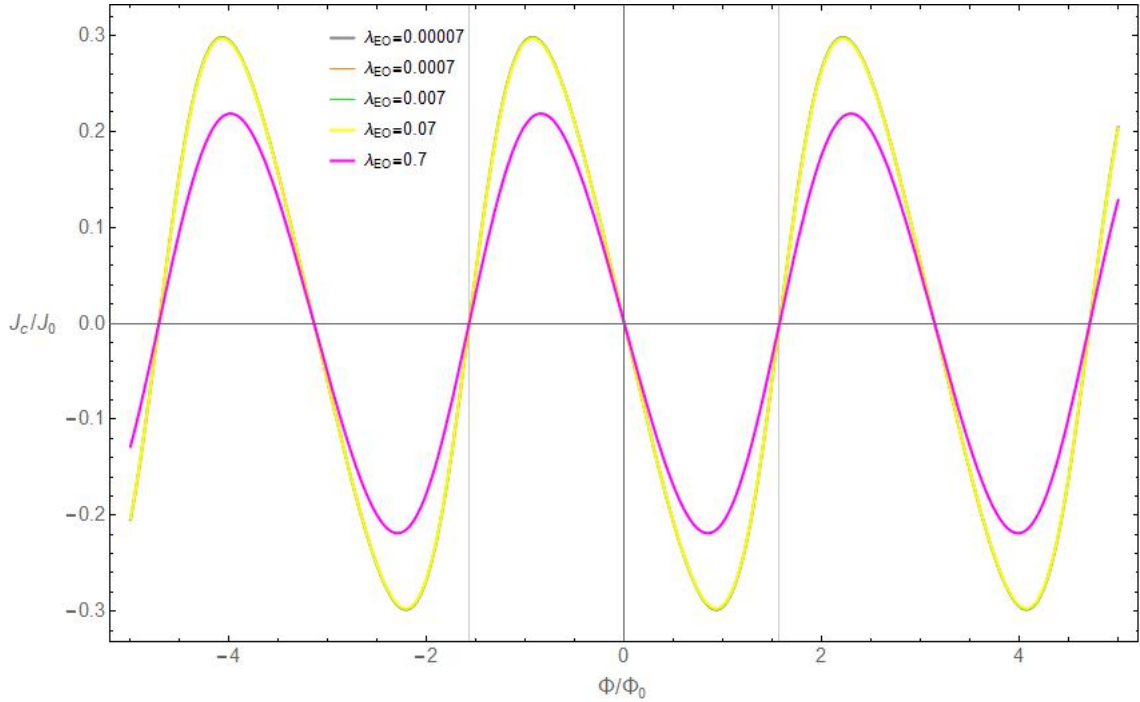


Figura 4.10: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco variando la magnitud del acoplamiento con $K_B T = 0$.

Se puede apreciar en los gráficos 4.10 y 4.11 como recuperamos la simetría alrededor de los picos al aumentar el acoplamiento EO, clara indicación de que el espectro es parabólico.

La corriente de carga viene dada por $I_c(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} J_c(E) dE$, realizando la integración de forma numérica obtuvimos la gráfica 4.12. La corriente de carga muestra la degradación en temperatura esperada, los valores en temperatura deben ser muy altos para obtener una degradación significativa, comportamiento observado también en la densidad de corriente. Los cambios se observan especialmente alrededor de cero y valores impares del flujo magnético. Cambios alrededor de valores en los que la corriente se hace cero

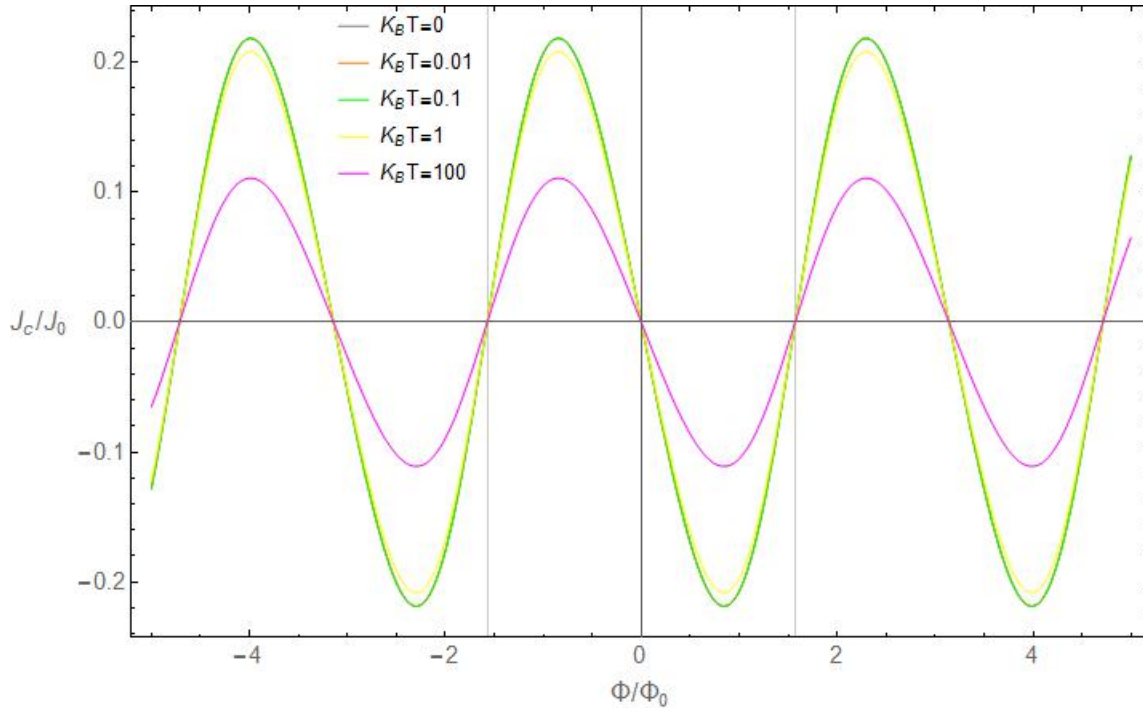


Figura 4.11: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,7$ variando la temperatura.

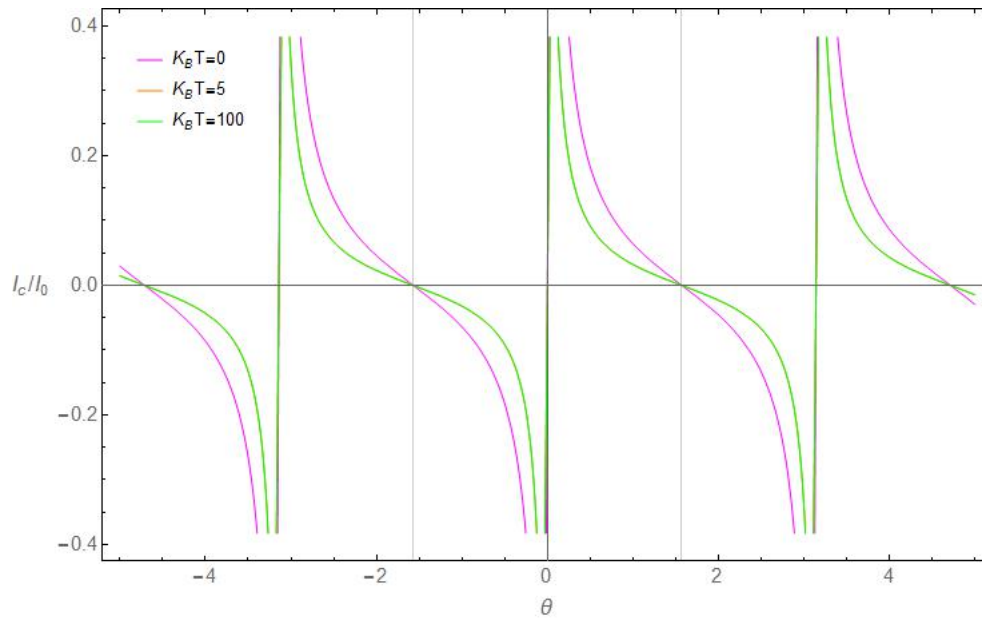


Figura 4.12: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura.

son más robustos, similares a los reportados en [3]. Cerca de valores de flujo pares, los electrones están más hundidos en la banda de valencia, por los que los electrones disponibles cerca del nivel de Fermi disminuyen, protegiendo así las corrientes contra cambios en temperatura. Como se puede observar en la expresión (4.23) no tiene ninguna relevancia la polarización de espín a pesar de tener un acoplamiento EO que se esperaría desdoblase la energía para valores de espín, dando como resultado la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín.

4.1.4. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Rashba.

Para el caso en el que solo hay interacción EO tipo Rashba, la ecuación (4.19) se reduce a:

$$J_c = i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(0) \right) + \frac{\lambda_R}{2} \sigma \left(G_{2(-\sigma),n\sigma}^<(0) + G_{4(-\sigma),n+1\sigma}^<(0) \right) \right]. \quad (4.24)$$

en la cual, una vez resuelto el sistema de ecuaciones y realizando las transformadas de Fourier queda:

$$J_c = \frac{t^2 \sin(2\phi) (4\lambda_R^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2 + \omega^2)}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega - 2\lambda_R)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2) ((2\lambda_R + \omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2)}. \quad (4.25)$$

Como se observa en la gráfica 4.13 para temperaturas muy altas la densidad de corriente se degrada. Cambios pequeños en la temperatura no afectan la densidad. Es notable que al igual que en el caso del acoplamiento EO intrínseco, para valores grandes del acoplamiento el comportamiento es similar a una densidad de corriente en un semiconductor.

En la gráfica 4.14 se puede ver que para un valor menor del acoplamiento EO Rashba el comportamiento es similar al anterior. En este caso, la temperatura sólo se lleva hasta $K_B T = 1$ y la densidad de corriente es bastante robusta contra cambios de temperatura. La diferencia fundamental con el caso anterior es la forma de la corriente; en este caso la simetría entre los picos y el cero se desvanece, vemos que al igual que en un sistema con acoplamiento EO Intrínseco únicamente, la forma cambia, deformando los picos en un sentido. Esto denota que el espectro no tiene una forma parabólica pero aun así es lineal, dando como resultado una corriente continua pero deformada. Este comportamiento se sostiene incluso para órdenes de magnitud mayores y menores del acoplamiento EO Rashba, al igual que la magnitud de la corriente.

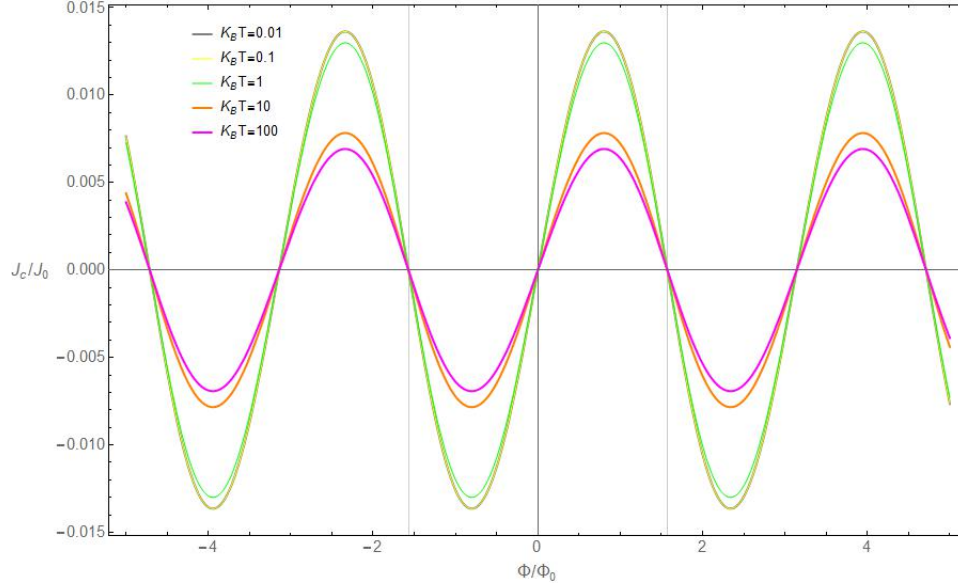


Figura 4.13: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 5$ variando la temperatura.

Realizamos la integración de la densidad de corriente de carga se obtiene la corriente de carga vista en la gráfica 4.15, en la cual se observa que para el valor de acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$, la corriente que proviene de las contribuciones de los niveles de energía más superficiales se ve poco afectada frente a cambios de temperatura. Esto es consistente con la apertura de una brecha donde la dispersión difusa del nivel de Fermi no alcanza niveles muy profundos que afecten la corriente.

En la corriente es evidente como la dispersión no cuadrática afecta su forma. Valores cercanos a enteros impares del flujo magnético reflejan la dispersión cuasi-lineal del espectro [3]. La degradación de las corrientes ocurre en mayor grado alrededor de valores semi-enteros del flujo magnético. Alrededor de valores enteros la degradación es menor, debido que los niveles que contribuyen son más profundos en la banda de valencia, protegiéndolos contra cambios de temperatura. Como se puede observar en la expresión (4.25) la polarización de espín no tiene ninguna relevancia a pesar de tener un acoplamiento EO que desdobla la energía para valores de espín, dando como resultado la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín, resultado similar al caso de EO Intrínseco.

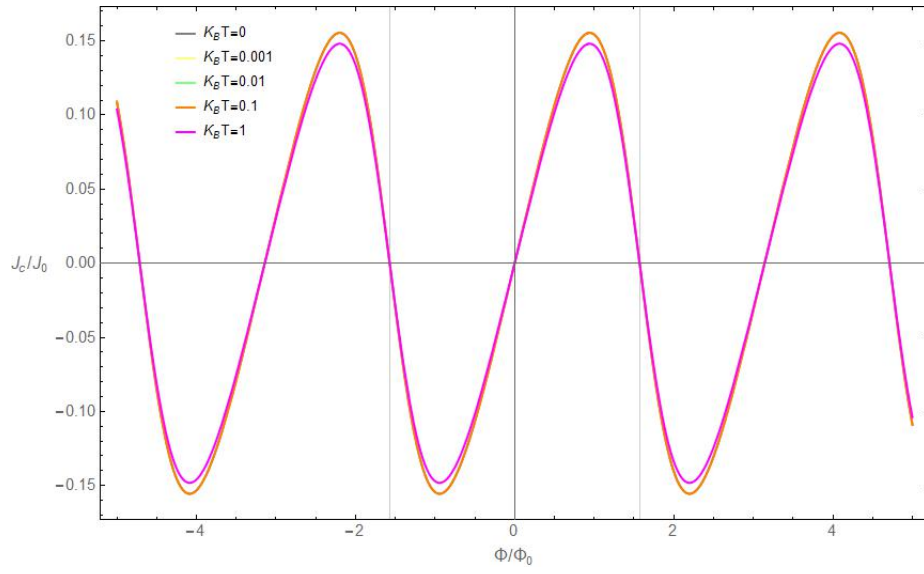


Figura 4.14: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.

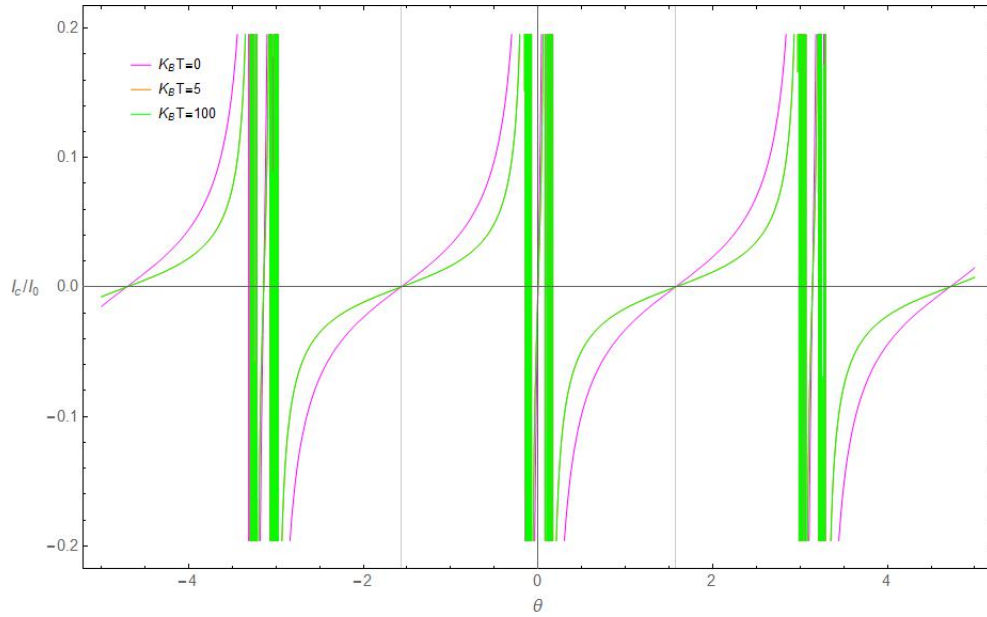


Figura 4.15: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.

4.1.5. Resultados de Corrientes Persistentes de Carga para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco y Rashba.

Para el caso en el que se tiene interacciones EO tipo Intrínseco y Rashba, se resuelve el sistema de ecuaciones y realizando las transformadas de Fourier, con $\nu_n = 1$ la ecuación (4.19) queda:

$$J_c = \frac{t^2 \sin(2\phi) \left((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2 + \omega^2 \right)}{(e^{\beta\omega} + 1) \left(\left((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_R^2) + \omega^2 \right)^2 + 2t^4 \cos(4\phi) + 6t^4 + 4t^2 \cos(2\phi) \left((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2 \right) - 4t^2 \left((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2 \right) \right)}. \quad (4.26)$$

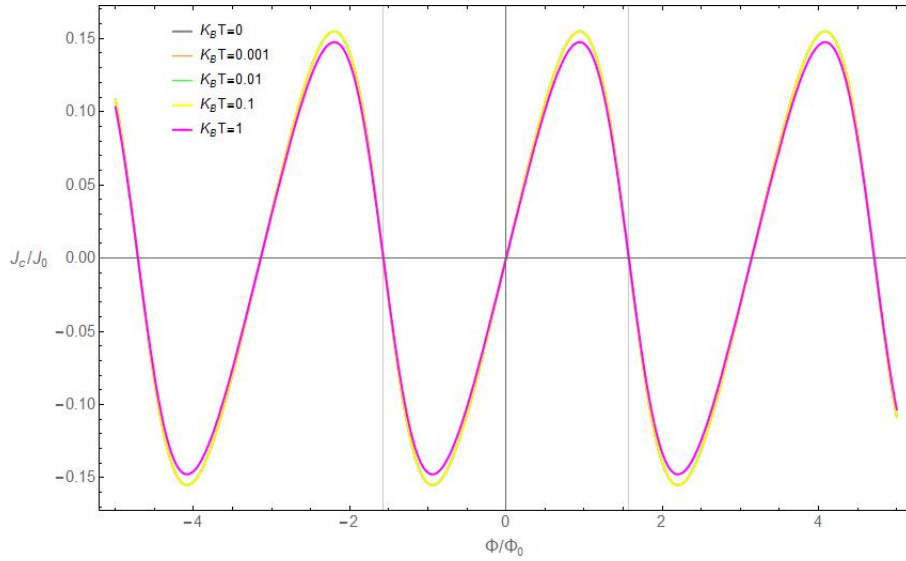


Figura 4.16: Gráfica de densidad corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$.

Considerando ambas interacciones EO en el anillo se obtiene el mismo comportamiento que en la densidad de corriente de carga para el caso con acoplamiento EO Rashba únicamente. Observando los casos de acoplamiento EO por separado vemos que los órdenes de magnitud de las densidades de corriente son diferentes; la separación de la brecha entre bandas debido al acoplamiento EO Rashba impide que los niveles de energía más profundos contribuyan a la corriente. En este caso, como se observa en las gráficas 4.16 y 4.17, se repite el comportamiento descrito, denotando que ambas interacciones juegan el mismo papel, como se ve en la expresión (4.26) $4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2$, en donde se evidencia que la contribución de EO Rashba supera a la contribución de EO intrínseco.

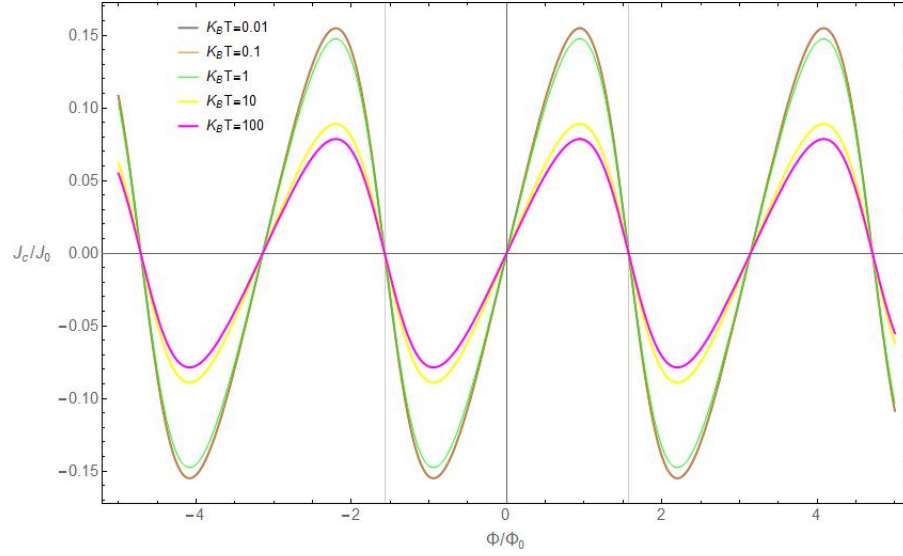


Figura 4.17: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Fijando un valor del parámetro EO Rashba $\lambda_R = 0,12$, se puede observar en la gráfica 4.18 que para la densidad de corriente es indiferente la variación del parámetro EO Intrínseco. Sólo existe una degradación significativa para valores mayores al del EO Rashba, en donde se impone el acoplamiento Intrínseco, abriendo más la brecha de energía, dificultando que los electrones pasen de la banda de valencia a la banda de conducción.

Fijando un valor del parámetro EO Intrínseco en $\lambda_{EO} = 0,07$, se observa en la gráfica 4.19 que la densidad de corriente de carga es robusta para cambios de EO Rashba, salvo para el valor en que se iguala en orden de magnitud con el parámetro de salto de energía Tight-Binding t .

Al realizar la integración numérica de la densidad de corriente de carga, se observa como el rol extrínseco e intrínseco de cada acoplamiento EO se desvanece. Como se observa en la gráfica 4.20, las contribuciones aparecen como diagonales en espín en ambos casos. Un resultado interesante si se recuerda que el término de interacción EO Intrínseca es el único diagonal en espín en el Hamiltoniano del Grafeno. De esta manera esperaríamos que la ruptura de degeneración de espín cambiaría únicamente la magnetización total de la corriente de carga, para ambos valores de sigma.

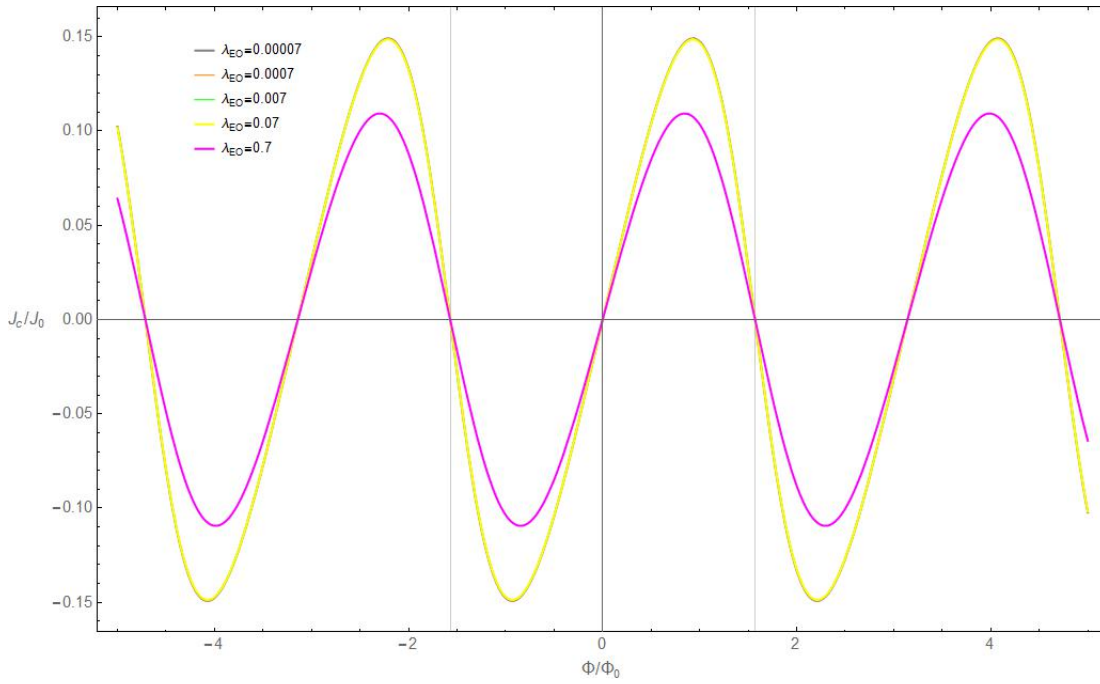


Figura 4.18: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ y variando el acoplamiento EO Intrínseco.

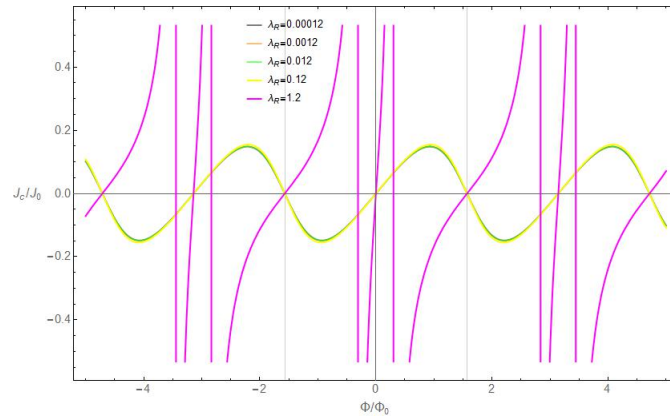


Figura 4.19: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y variando el acoplamiento EO Rashba.

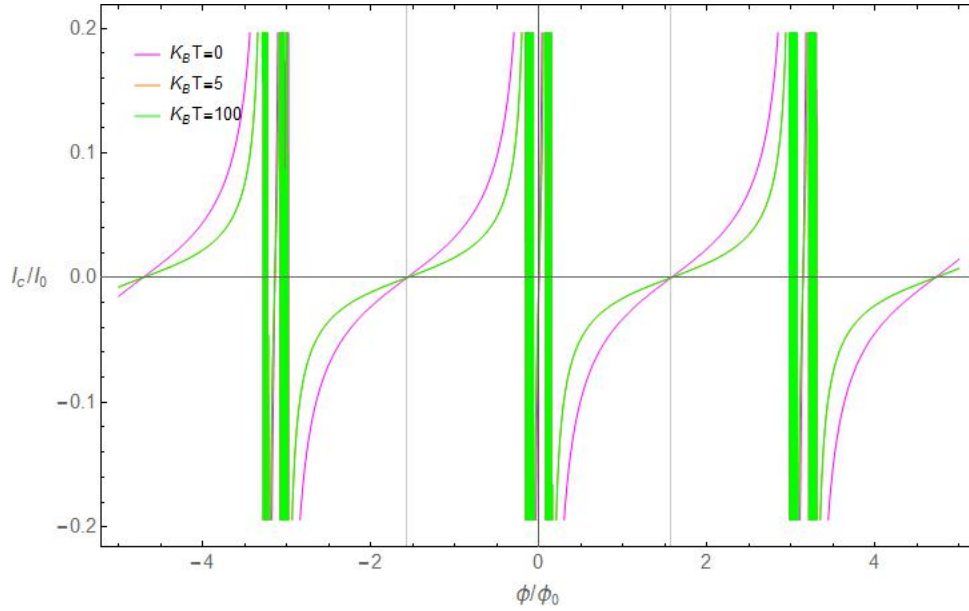


Figura 4.20: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado de Gra-feno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.2. Corrientes Persistentes de Espín.

Los electrones poseen espín, así como la carga, si además tienen una velocidad, entonces el movimiento del espín dará lugar a una corriente de espín adicional a la corriente de carga. Un ejemplo de esta corriente es la generación de una corriente de espín “pura”, como se ilustra en la figura 4.21. Si tenemos una corriente de carga polarizada con todos los espines hacia arriba circulando hacia la derecha y una corriente de carga polarizada con los espines hacia abajo circulando hacia la izquierda, al sumarlas, las corrientes de carga se cancelan quedando una corriente de espín pura polarizada hacia arriba circulando hacia la derecha y una corriente de espín pura polarizada hacia abajo circulando hacia la izquierda.

Se debe tener en cuenta que la corriente de espín tiene un carácter matricial, la velocidad de los electrones en presencia de acoplamiento EO es un operador en el espacio de espín. La componente de la densidad de espín en la representación del espacio real viene dada por $s_v(\vec{r}, t) = \psi^\dagger(\vec{r}, t) \mathbf{s} \psi(\vec{r}, t)$ con $\mathbf{s} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}$ y $\boldsymbol{\sigma}$ es el vector de las matrices de Pauli [14]. La derivada temporal de la densidad de espín es:

$$\frac{ds_v(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\hbar}{2} \left\{ \left[\frac{d\psi^\dagger(\vec{r}, t)}{dt} \right] \boldsymbol{\sigma} \psi(\vec{r}, t) + \left[\psi^\dagger(\vec{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} \right] \right\}. \quad (4.27)$$

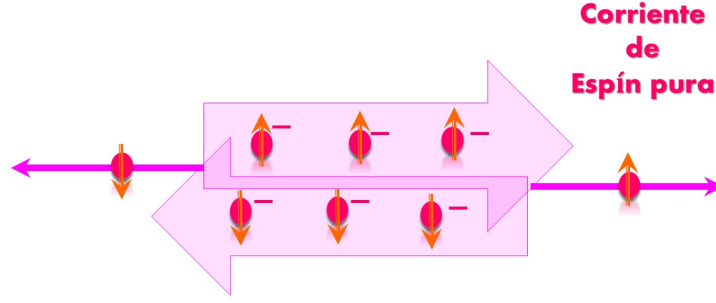


Figura 4.21: Corriente de espín pura.

Algo importante a considerar es que la corriente de espín es relevante sólo en presencia del acoplamiento EO, el cual rompe la simetría de inversión espacial y permite el desdoblamiento de los niveles de energía correspondientes a cada espín [15]. Además, como pudimos ver en la sección anterior, la presencia de un campo magnético en el centro del anillo produce que la energía tenga un término adicional, cambiando el estado base como se observa en la figura 4.22 por lo que se produce una corriente persistente. Por ende si hay acoplamiento EO, en presencia de un campo magnético, se producirá una corriente persistente de espín cuya expresión general viene dada por [14]:

$$I_s(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} \vec{J}_s(E) dE, \quad (4.28)$$

donde $\vec{J}_s(E)$ es la densidad de corriente de espín y viene dada por:

$$\vec{J}_s = \frac{1}{2N} \{ \vec{S}, \mathbf{V} \}. \quad (4.29)$$

4.2.1. Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo de Grafeno con interacción Espín-Órbita (EO) tipo Intrínseco y Rashba.

En esta sección se buscarán las corrientes persistentes de espín en el anillo de grafeno descrito en la sección 4.1.1. Primero, trabajaremos con la densidad de corriente de espín, la ecuación (4.29), que se reescribe:

$$\vec{J}_s = \frac{1}{2\hbar N} \left\{ \vec{S}, [\mathbf{H}, \mathbf{x}] \right\}, \quad (4.30)$$

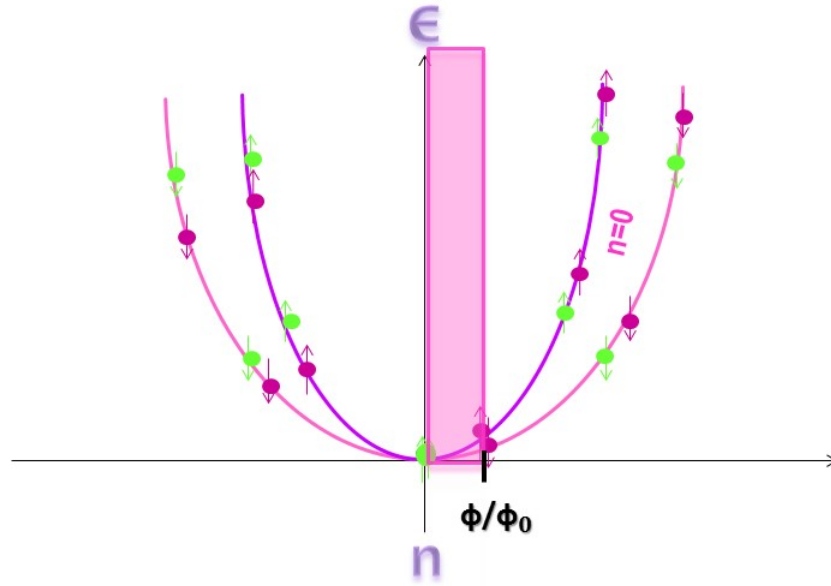


Figura 4.22: Comparación del desdoblamiento de energía en espín en presencia de acoplamiento espín-órbita sin presencia de campo magnético (puntos verdes). Con el desdoblamiento de energía en espín en presencia de acoplamiento espín-órbita con presencia de campo magnético (puntos rosados).

en la sección 4.1.1 realizamos el cálculo de $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$, dio como resultado la ecuación (4.15). Calculando el anticonmutador ¹² nos queda:

¹²Ver apéndice A, sección A.5

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{ab} = \sum_n \frac{1}{2\hbar N} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \sigma_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \sigma_x \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \sigma_x \right. \right. \\
- \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{x} \\
+ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \sigma_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \sigma_y \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \sigma_y \right. \\
+ \frac{\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{y} \\
+ 2 \left[t \left(e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \sigma_z - e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \sigma_z \right) + i\lambda_{EO} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \left. \right\}. \quad {}^{13}
\end{aligned} \tag{4.31}$$

Tomando el valor medio y nombrando diferentes funciones de Green tal y como se hizo en la sección A.4 nos queda:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{ab} = \sum_n \frac{1}{4\hbar N} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{n+1\sigma, n\sigma}^{<}(0) \sigma_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{n\sigma, n+1\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right) \right. \right. \\
+ i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^{<}(0) \sigma_x \\
- \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^{<}(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^{<}(0) \right) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{x} \\
+ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{n+1\sigma, n\sigma}^{<}(0) \sigma_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{n\sigma, n+1\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right. \\
+ \frac{\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^{<}(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^{<}(0) \right) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{y} \\
+ 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{n+1\sigma, n\sigma}^{<}(0) \sigma_z - e^{-i\phi} G_{n\sigma, n+1\sigma}^{<}(0) \sigma_z \right) + i\lambda_{EO} G_{n+2\sigma, n\sigma}^{<}(0) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \left. \right\}.
\end{aligned} \tag{4.32}$$

Como se puede observar, son las mismas funciones de Green que conseguimos en el apéndice A mostradas en (A.14), y reduciremos la densidad de espín de carga a un sólo sistema de ecuaciones procediendo de la misma forma que en la sección 4.1.1, quedando:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{ab} = & \frac{1}{4} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right. \right. \\
& + \left. \frac{\lambda_R \sigma}{2} \sum_{\sigma} (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(0) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(0)) I_{2 \times 2} \right] \hat{x} \\
& + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right. \\
& - \left. \frac{i\lambda_R \sigma}{2} \sum_{\sigma} \sigma (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(0) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(0)) I_{2 \times 2} \right] \hat{y} \\
& + 2 \left[t (e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z) + i\lambda_{EO} G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \Big\}.
\end{aligned} \tag{4.33}$$

4.2.2. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco.

Para el caso en el que solo hay interacción EO tipo intrínseco, la ecuación (4.33), con $\nu_n = 1$ se reduce a:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s = & \frac{1}{4} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right) + i\lambda_{EO} \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right] \hat{x} \right. \\
& + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right) + i\lambda_{EO} \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right] \hat{y} \\
& + 2 \left[t (e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z) + i\lambda_{EO} G_{3\sigma,\sigma}^{<}(0) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \Big\}.
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Componente $\hat{x}$

1. Para la entrada ++ de la matriz ¹⁴,

$$J_{sx}^{++} = 0.$$

2. Para la entrada +- de la matriz,

¹⁴Ver apéndice A, ecuación (A.16)

$$\begin{aligned}
J_{sx}^{+-} = \sum_{\sigma} \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} & \left[\lambda_{EO}\sigma \left(t\text{sen}\phi \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} \right. \right. \right. \\
& - \left. \left. \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} \right) + \lambda_{EO}\sigma \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\text{sen}\phi + \omega)^2} \right. \right. \\
& + \left. \left. \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\text{sen}\phi)^2} + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} \right. \right. \\
& \left. \left. \left. + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} \right) \right) \right]. \quad (4.35)
\end{aligned}$$

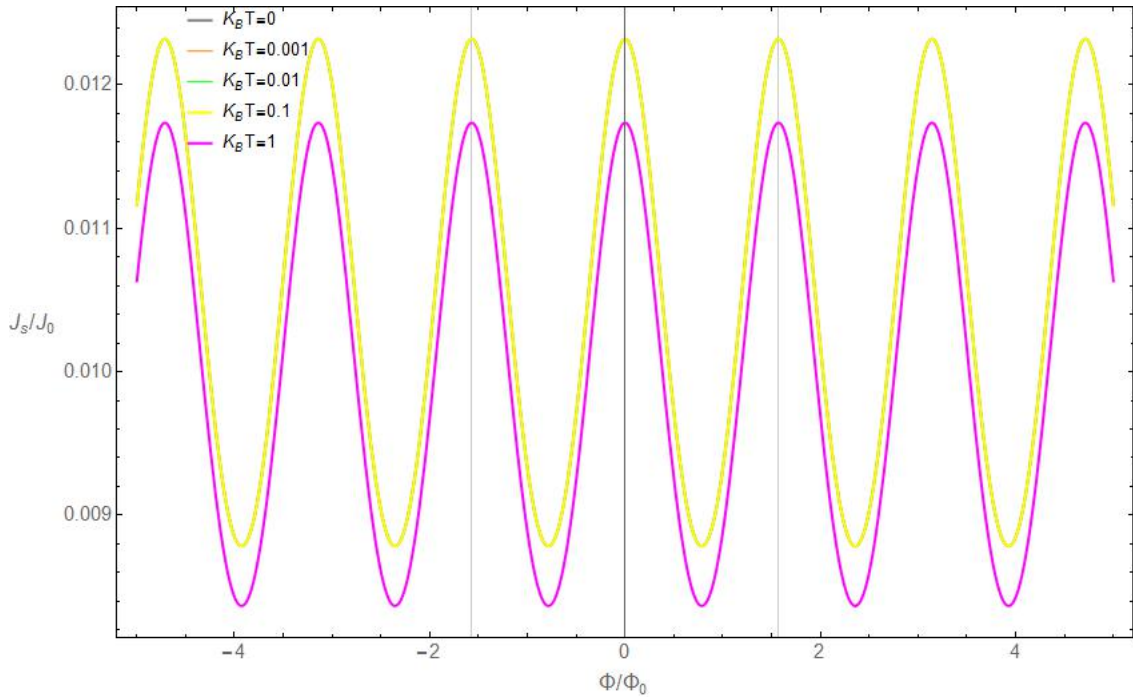


Figura 4.23: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$.

En la gráfica de la densidad de corriente de espín, figura 4.23, con acoplamiento EO Intrínseco, se puede observar como degrada con la temperatura. En la gráfica de la figura 4.24 se observa que para valores pequeños del parámetro del acoplamiento EO Intrínseco la densidad se hace cero, lo que da como evidencia que la corriente de espín sólo es posible bajo la presencia de un acoplamiento EO. Miramos que en las dos gráficas mencionadas, para determinado valor del acoplamiento EO la corriente está desplazada por encima de cero.

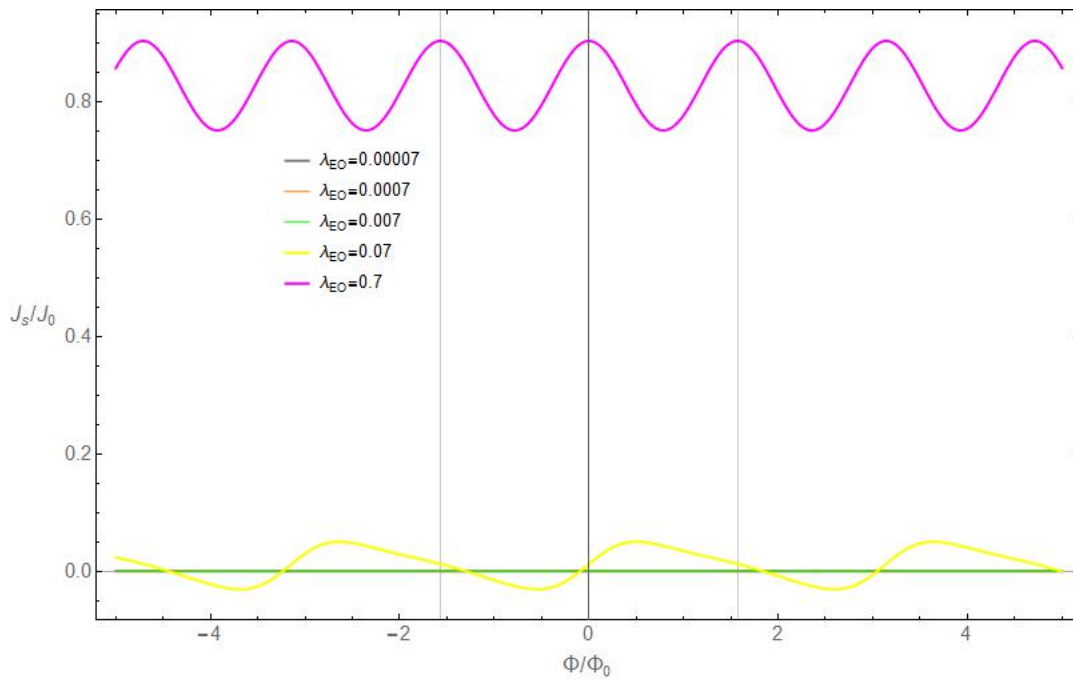


Figura 4.24: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco y temperatura $K_B T = 0$ variando el parámetro de acoplamiento.

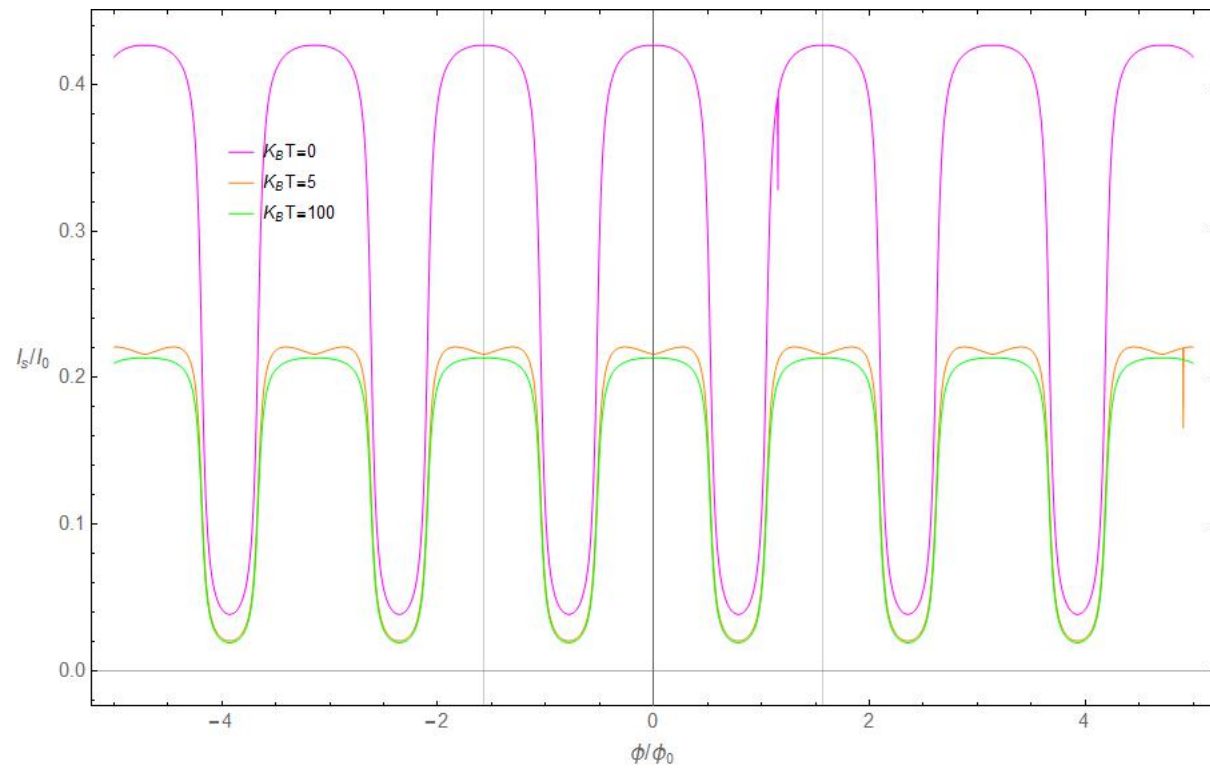


Figura 4.25: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Gra-feno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Realizamos una integración numérica de la densidad de corriente de espín respecto a la energía obteniendo la corriente de espín mostrada en la gráfica de la figura 4.25. Al igual que en las corrientes de carga, los niveles más profundos en la energía contribuyen menos para ciertos valores del flujo magnético. Se evidencia que la corriente de espín aumenta en ciertos valores del flujo, como lo es en cero, cercano a $-3/2$, $3/2$, -3 y 3 ; la corriente toma electrones de los niveles de energía más superficiales, cercanos al nivel de Fermi. Esto ocurre de manera similar a la corriente de carga, pero ésta posee una forma más compleja. Se obtienen máximos en regiones de flujo donde la intensidad de polarización de espín es máxima. Análogamente a las corrientes de carga, la temperatura degrada la corriente de espín.

3. Para la entrada $-+$ de la matriz,

$$J_{sx}^{-+} = J_{sx}^{+-}.$$

4. Para la entrada $--$ de la matriz,

$$J_{sx}^{--} = 0.$$

Componente $\hat{y}$

1. Para la entrada $++$ de la matriz,

$$J_{sy}^{++} = 0.$$

2. Para la entrada $+-$ de la matriz,

$$J_{sy}^{+-} = \frac{2t\sin(2\phi)(\lambda_{EO}^2 + 4t^2\sin^2\phi + (1-2t)\omega^2)}{(e^{\beta\omega} + 1)(\lambda_{EO}^2 + 4t\sin\phi(t\sin\phi - \omega) + \omega^2)(\lambda_{EO}^2 + 4t\sin\phi(t\sin\phi + \omega) + \omega^2)}. \quad (4.36)$$

La densidad de corriente oscila con el flujo como se observa en la gráfica de la figura 4.26, y se comporta de manera similar a la corriente de carga en presencia de acoplamientos EO que ya fueron observados en la sección 4.1.

Realizamos una integración numérica de la densidad de corriente de espín para valores por debajo de la energía de Fermi obteniéndose la corriente mostrada en la gráfica de la figura 4.27. La corriente toma electrones de los niveles más extremos de la banda de energía; se puede apreciar como para valores de temperaturas muy altas, en los valores del flujo magnético en donde se ven los picos de la corriente es más difícil extraer electrones, mientras que, para valores cercanos a cero la corriente

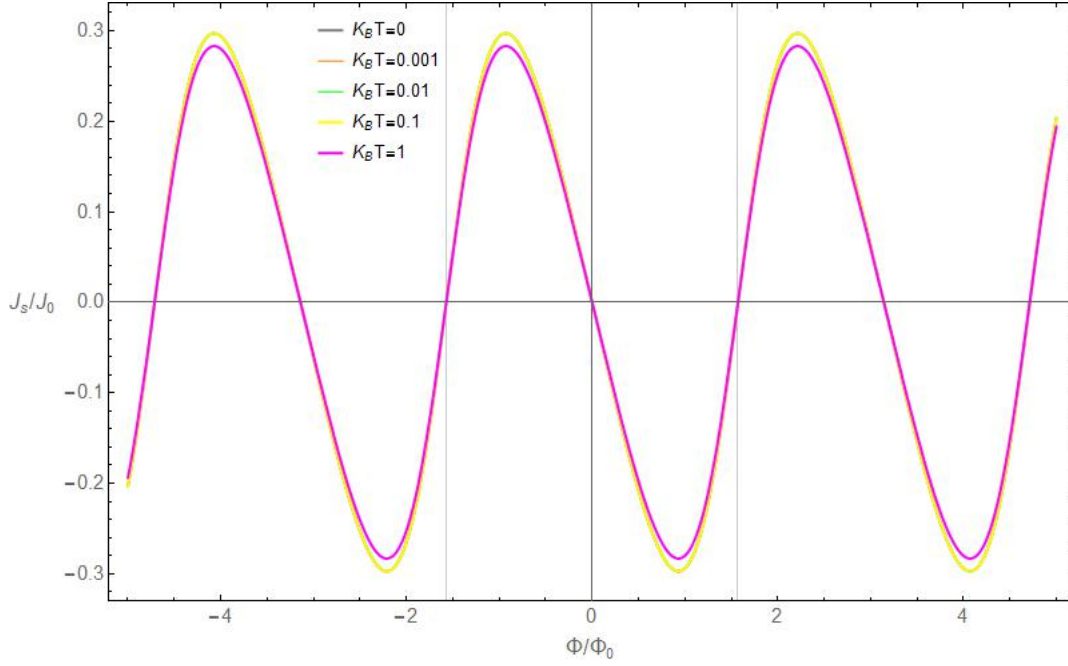


Figura 4.26: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$.

alcanza un mínimo y es robusto a cambios de temperatura, incluso para dos órdenes de magnitud de diferencia. Los valores máximos de corriente se obtienen para valores cercanos de flujos impares, de manera que se puede inferir que la corriente se debe a electrones que provienen de niveles maximamente separados en espín. Si la integración numérica de la densidad se realiza para valores cercanos a la energía de Fermi, aproximándose en el espectro a los puntos de Dirac, se obtiene la gráfica de la figura 4.28; se puede observar que los valores enteros del flujo magnético son los que contribuyen a la corriente tomando electrones de los niveles cercanos a la dispersión lineal y se obtiene una corriente acotada entre cada par de picos.

3. Para la entrada $-+$ de la matriz,

$$J_{sy}^{-+} = -J_{sy}^{+-} \quad (4.37)$$

Como se puede apreciar la expresión de la corriente de carga (4.37) es el negativo de la expresión (4.36), por lo que existe una simetría entre la componente $y+-$ y la componente $y-+$. Por lo que simplemente las corrientes cambian de polarización como se ve en la gráfica 4.29.

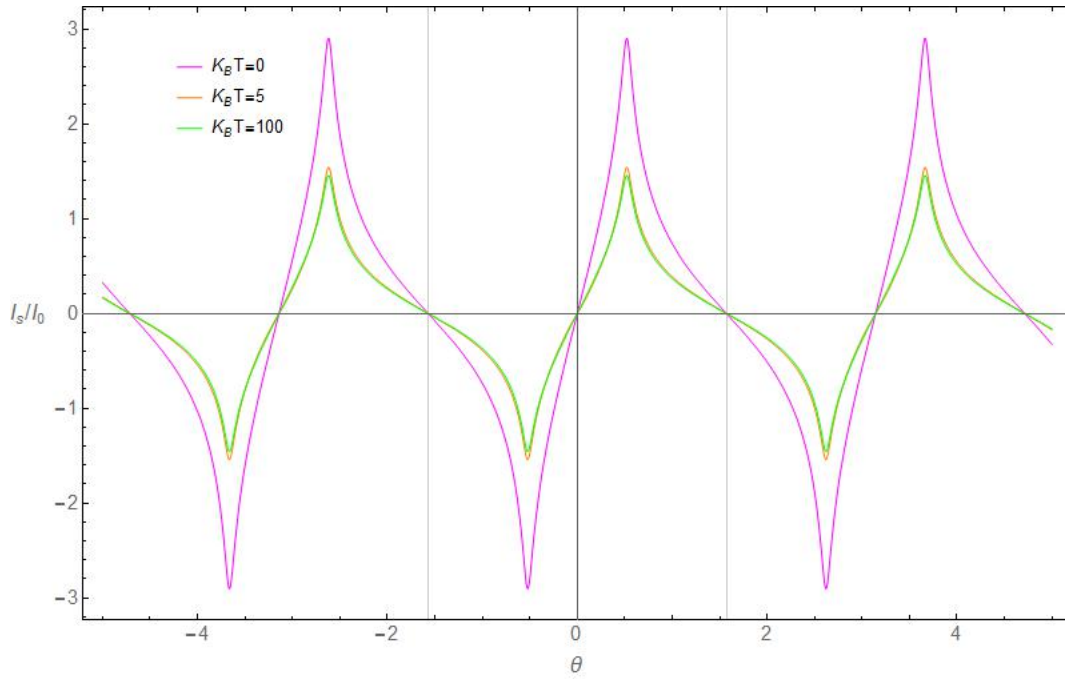


Figura 4.27: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

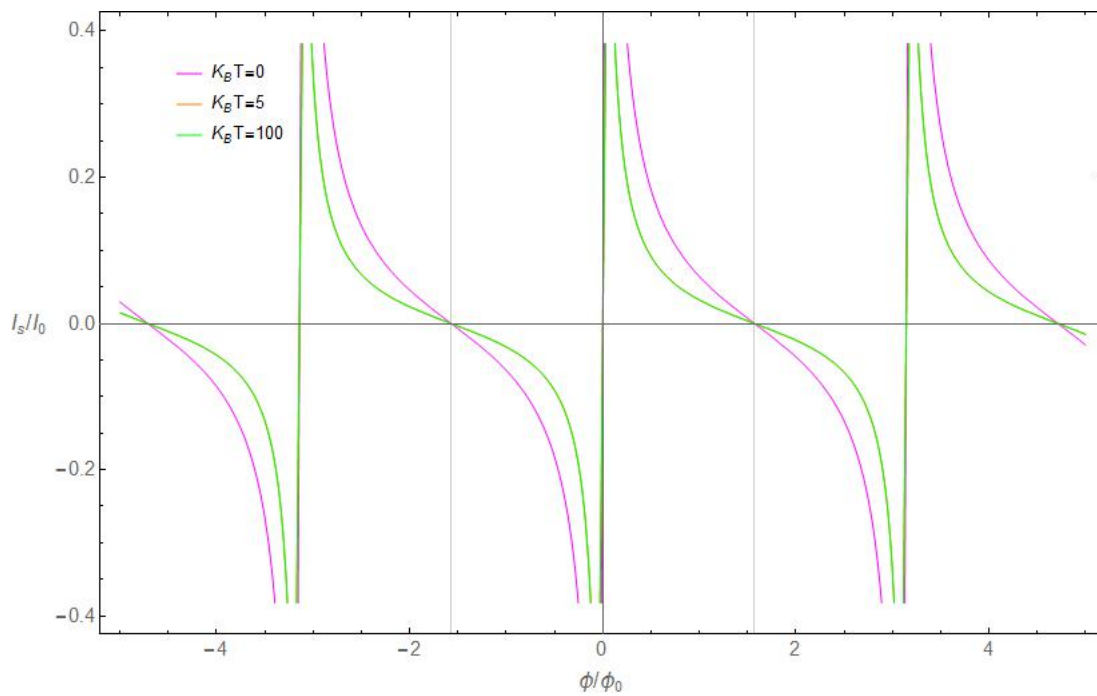


Figura 4.28: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$. Integrando a valores cercanos de la energía de Fermi.

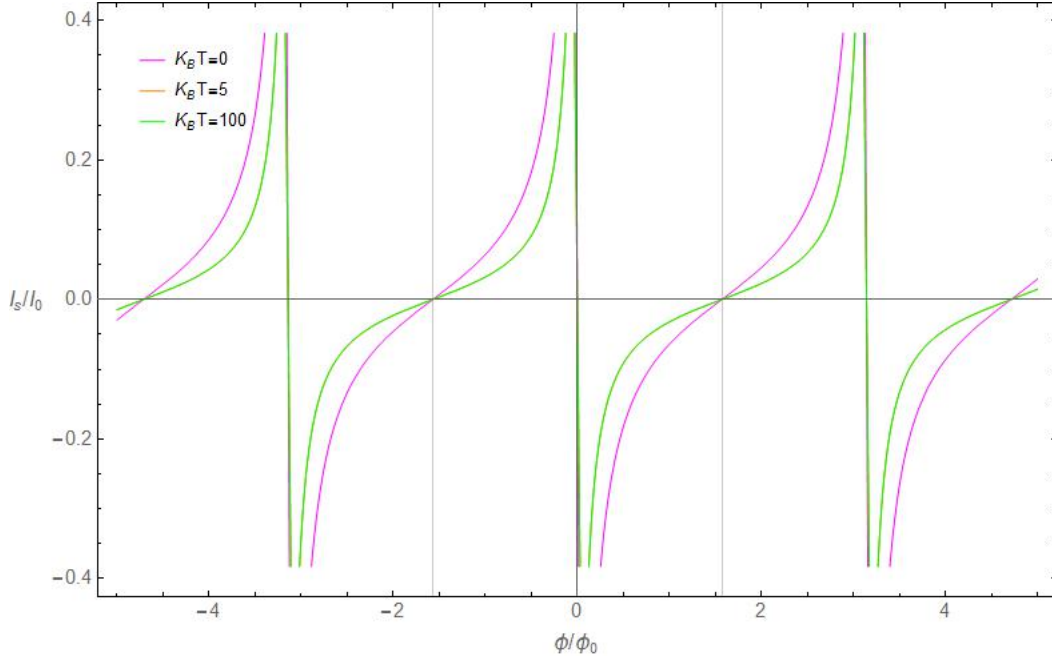


Figura 4.29: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$. Integrando a valores cercanos de la energía de Fermi.

4. Para la entrada - - de la matriz,

$$J_{sy}^{--} = 0.$$

Componente $\hat{z}$

1. Para la entrada ++ de la matriz,

$$J_{sz}^{++} = \frac{1}{(e^{\beta\omega} + 1)^2} \left[\lambda_{EO}\sigma \left(t\text{sen}\phi \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} - \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \lambda_{EO}\sigma \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\text{sen}\phi + \omega)^2} + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\text{sen}\phi)^2} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} \right) \right) \right]. \quad (4.38)$$

Si observamos la expresión para la componente $z--$ (4.39), vemos que es el negativo de la expresión (4.38) por lo que sólo analizaremos la entrada ++.

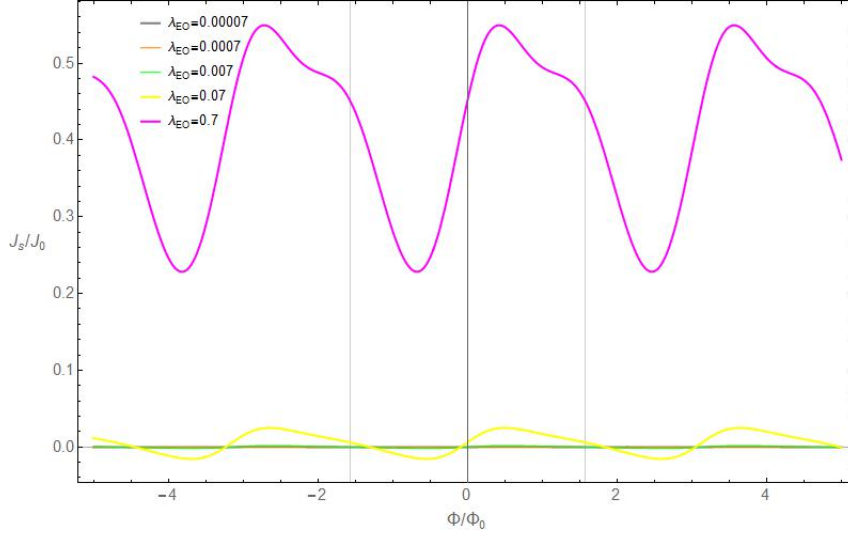


Figura 4.30: Gráfica de la densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno a temperatura $K_B T = 0$ variando el acoplamiento EO tipo Intrínseco, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

Mirando el gráfico 4.30 de la densidad de corriente de espín en donde se varió el parámetro de acoplamiento EO Intrínseco, notamos que ocurre el mismo efecto que en la componente $\hat{x}$, los valores de la densidad de corriente se aproximan a cero a medida que disminuye el parámetro del acoplamiento; la forma de la corriente se deforma para valores muy grandes del parámetro EO.

La densidad de corriente degrada con la temperatura y es menos robusta, en comparación con las otras componentes. Para cambios de un orden de magnitud degrada a menos de la mitad.

Realizamos una integración numérica de la densidad de corriente de espín, obteniéndose la corriente de espín mostrada en la gráfica 4.32, en la cual observamos el efecto de temperatura. Para altas temperaturas la degradación de la corriente satura. En este intervalo de energías cerca de los valores de flujo magnético pares; donde la corriente es cero, los efectos de temperatura son menos pronunciados, para valores de dos órdenes de magnitud degradan poco la corriente. Este es un efecto de protección, donde los niveles de energía que contribuyen están muy por debajo del nivel de Fermi, ofreciendo pocos electrones e inclusive resistiendo los efectos térmicos. En esta gráfica se observa sólo una de las componentes de espín, específicamente la polarización positiva del espectro desdoblado $\sigma = 1$. Para el caso en el que se tiene la polarización negativa $\sigma = -1$ ocurre el mismo efecto, salvo que es el negativo de

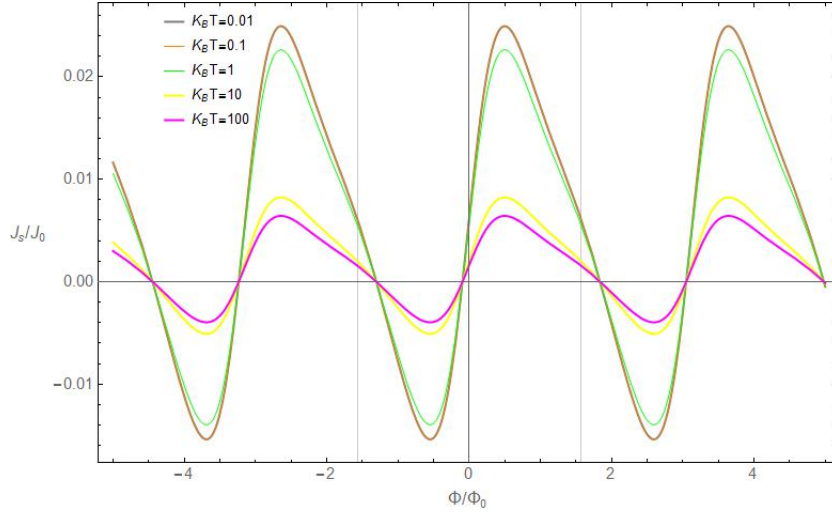


Figura 4.31: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

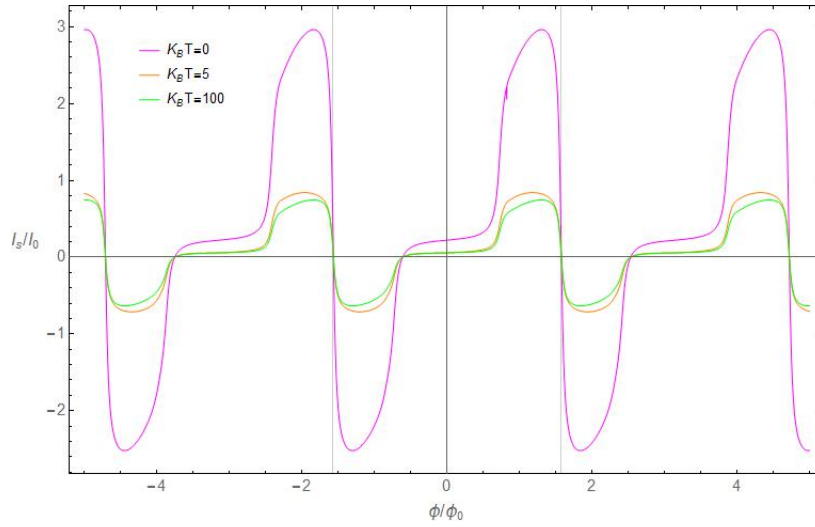


Figura 4.32: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

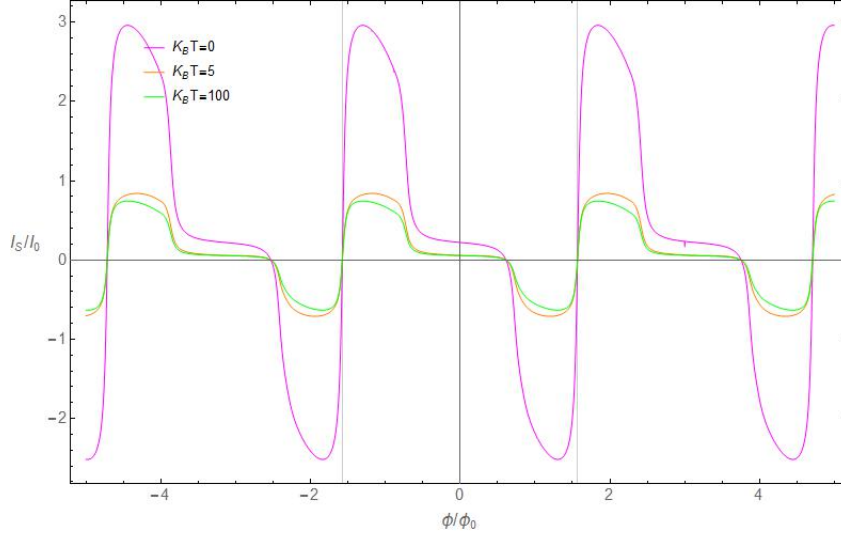


Figura 4.33: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$.

esta, como se aprecia en la gráfica 4.33, en donde la corriente era máxima, para esta polarización de espín ahora será mínima.

2. Para la entrada +- de la matriz,

$$J_{sz}^{+-} = 0.$$

3. Para la entrada -+ de la matriz,

$$J_{sz}^{-+} = 0.$$

4. Para la entrada - - de la matriz,

$$J_{sz}^{--} = -J_{sz}^{++} \quad (4.39)$$

4.2.3. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Rashba.

Para el caso en el que solo hay interacción EO tipo Rashba, la ecuación (4.33) se reduce a:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{ab} = \frac{1}{4} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_x \right) \right. \right. \\
+ \frac{\lambda_R \sigma}{2} \sum_{\sigma} (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(0) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(0)) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{x} \\
+ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_y \right) \right. \\
- \frac{i\lambda_R \sigma}{2} \sum_{\sigma} \sigma (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(0) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(0)) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{y} \\
+ 2 \left[t (e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(0) \sigma_z) \right] \hat{z} \left. \right\}. \tag{4.40}
\end{aligned}$$

Componente $\hat{x} = 0$

Para el caso de esta componente, la corriente da cero; por el arreglo muy particular de nuestro anillo, en el que los átomos se encuentran con un espaciamiento angular de $\pi/2$, como se evidencia en la expresión (4.32). El espaciamiento angular entre los átomos en el anillo tiene un rol importante en la expresión del acoplamiento EO Rashba dentro del Hamiltoniano y por lo tanto en las densidades de corriente de carga y espín¹⁵. Cada componente es funcionalmente perpendicular a la otra ($\hat{x}$ y $\hat{y}$) de manera que observamos que la corriente tendrá variaciones en la intensidad de sus componentes a lo largo del anillo. En nuestro caso muy particular de 4 átomos, nos encontramos que donde la corriente tiene un máximo espacial en la componente $\hat{y}$ tiene un mínimo espacial en la componente $\hat{x}$. Para observar esta dependencia espacial a lo largo del anillo es necesario agregar más átomos, lo que numéricamente está fuera del alcance y los recursos para este trabajo.

Componente $\hat{y}$

1. Para la entrada ++ de la matriz,

$$J_{sy}^{++} = 0.$$

2. Para la entrada +- de la matriz,

$$J_{sy}^{+-} = \frac{2t^2 \sin(2\phi) (4\lambda_R^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2 + \omega^2)}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega - 2\lambda_R)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2) ((2\lambda_R + \omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2)}. \tag{4.41}$$

¹⁵Ver apéndice A, subsección A.2.2

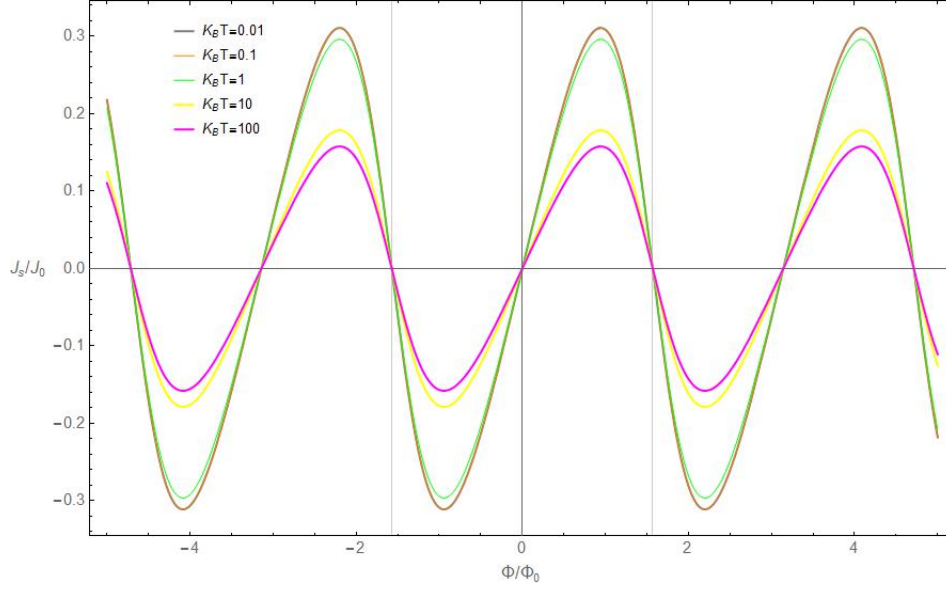


Figura 4.34: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Como se evidencia, la entrada $y - +$ cuya expresión viene dada por (4.42) es la negativa de la expresión (4.41), por lo que sólo analizaremos la entrada $y + -$. En la gráfica 4.34 se observa la degradación de la densidad de corriente cuando se aumenta la temperatura, que disminuye considerablemente para valores muy altos.

En la gráfica 4.35 se observa que la densidad de corriente de espín cambia poco ante variaciones en el parámetro EO Rashba. Sólo cuando el valor del acoplamiento EO iguala en orden magnitud al parámetro de salto t se observa un cambio notorio en la densidad, ampliándose en magnitud y cambiando su forma.

Realizamos una integración numérica para valores cercanos al nivel de Fermi obteniendo la corriente mostrada en la gráfica 4.36. Se observa que en los valores cercanos a flujo magnético impares la corriente tiene una discontinuidad; en estos valores es donde los niveles de energía que contribuyen a la corriente son los más superficiales, cercanos al nivel de Fermi. En estos puntos los electrones tienen un comportamiento cuasi-lineal, lo que podría explicar el cambio abrupto de signo, recordando que la corriente de espín es una superposición de corrientes de carga polarizadas en espín, cuya derivada en estos puntos es discontinua. También se puede observar que la corriente es resistente a cambios de temperatura, se requiere de un aumento de dos órdenes de magnitud para ver una degradación de la corriente de espín.

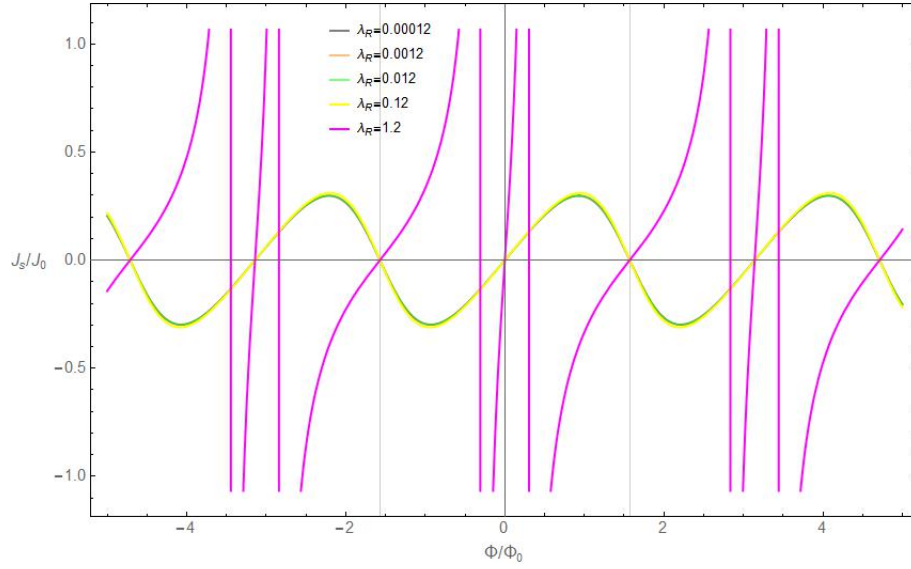


Figura 4.35: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba a temperatura $K_B T = 0$ variando el parámetro de acoplamiento.

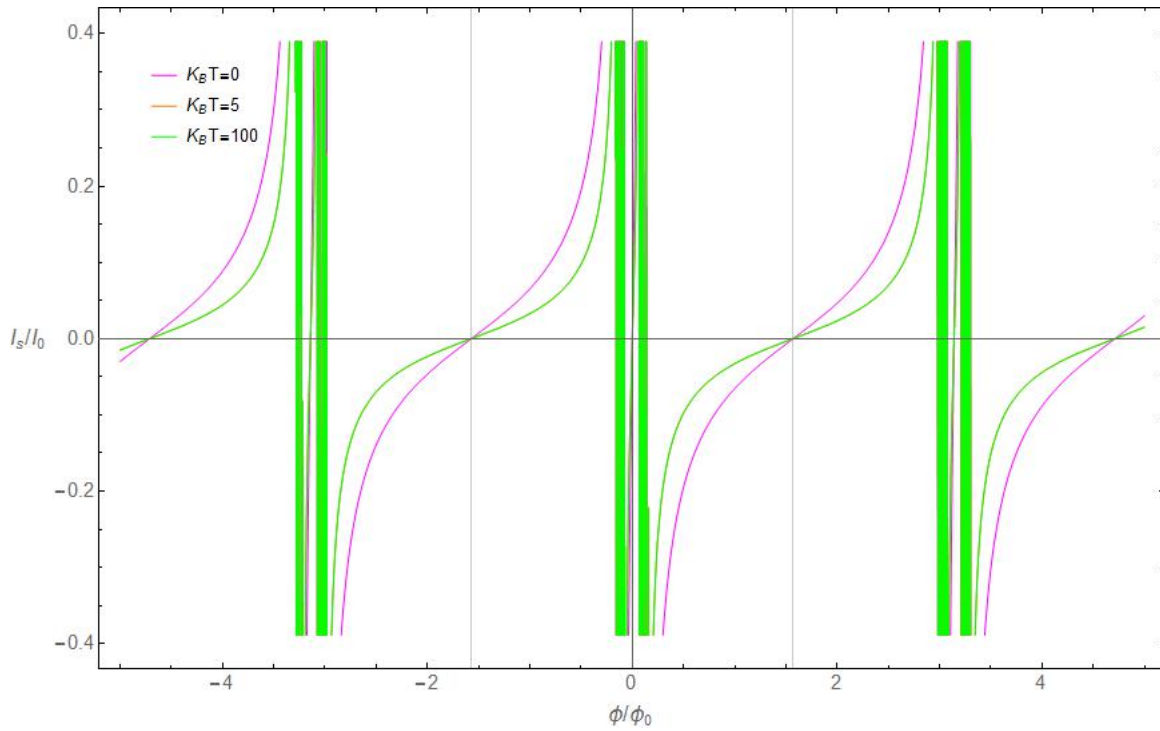


Figura 4.36: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO tipo Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.

3. Para la entrada $-+$ de la matriz,

$$J_{sy}^{-+} = -J_{sy}^{+-} \quad (4.42)$$

4. Para la entrada $--$ de la matriz,

$$J_{sy}^{--} = 0.$$

Componente $\hat{z} = 0$

4.2.4. Resultados de Corrientes Persistentes de Espín para un Anillo basado en Grafeno con acoplamiento EO Intínseco y Rashba.

Para el caso en el que se encuentran presentes ambas interacciones EO, una vez resuelto el sistema de ecuaciones y realizando las Transformadas de Fourier de cada función de Green, la ecuación (4.33) da como resultado:

Componente $\hat{x}$

1. Para la entrada $++$ de la matriz,

$$J_{sx}^{++} = 0.$$

2. Para la entrada $+-$ de la matriz,

$$J_{sx}^{+-} = \sum_{\sigma} \frac{1}{4(e^{\beta\omega} + 1)} \left[\frac{2it^2 \sin(2\phi) - \lambda_{EO}\sigma(\lambda_{EO}\sigma + i\omega)}{(\lambda_{EO}\sigma + i\omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2} + \frac{\lambda_{EO}\sigma(-\lambda_{EO}\sigma + i\omega) - 2it^2 \sin(2\phi)}{(\lambda_{EO}\sigma - i\omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2} - \frac{2\lambda_{EO}^2((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_R^2) - 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2 + \omega^2)}{((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_R^2) + \omega^2)^2 + 2t^4 \cos(4\phi) + 6t^4 + 4t^2 \cos(2\phi)((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2) - 4t^2((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2)} \right]. \quad (4.43)$$

En la gráfica 4.37 se observa como la densidad de corriente de espín es degradada por la temperatura, además vemos que la amplitud de la densidad disminuye para valores entre 10 y 100 en unidades de $K_B T$.

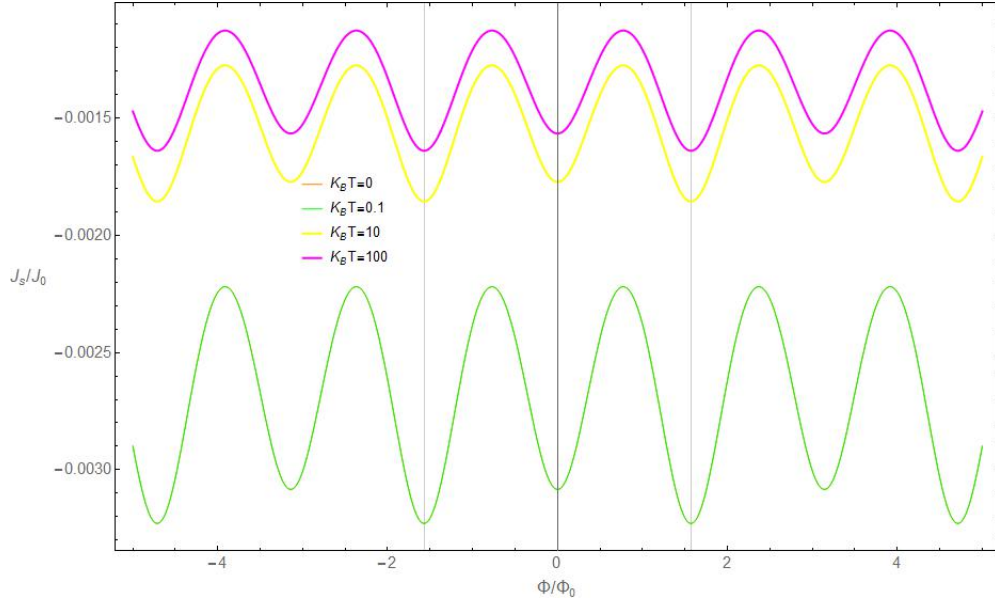


Figura 4.37: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura.

Dejando fijo el parámetro de acoplamiento EO Rashba en $\lambda_R = 0,12$ y variando el intrínseco, observamos en la gráfica 4.38 como se agrega una componente constante a la densidad de corriente de espín por debajo de cero para un valor alto de λ_{EO} . Se evidencia que la densidad depende fuertemente del valor de λ_{EO} , pasando de cero para valores pequeños, hasta tener el comportamiento oscilatorio regular para valores mayores comparables con el parámetro de EO Rashba. Esto es debido al rol que tienen en la expresión de la densidad de corriente de espín (4.43) donde se engloba a ambas interacciones como $4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2$.

Dejando fijo el parámetro de acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y variando el de Rashba, observamos en la gráfica 4.39 como al aumentar el parámetro EO Rashba, aumenta la densidad de corriente. Comparando con la variación del parámetro EO Intrínseco los aumentos son pequeños. Para valores que se aproximan a la energía de salto t la densidad aumenta radicalmente y cambia su forma. Esto deja ver como la presencia de EO Rashba no desdobra más los niveles de energía en espín, sino que al abrir los niveles de energía reduce la brecha creada por la interacción EO Intrínseca en un factor proporcional a la apertura entre los niveles desdoblados; lo que hace que incremente la ocupación de electrones debido a estos niveles en la corriente.

Integrando de forma numérica la densidad de corriente de espín obtenemos la gráfica

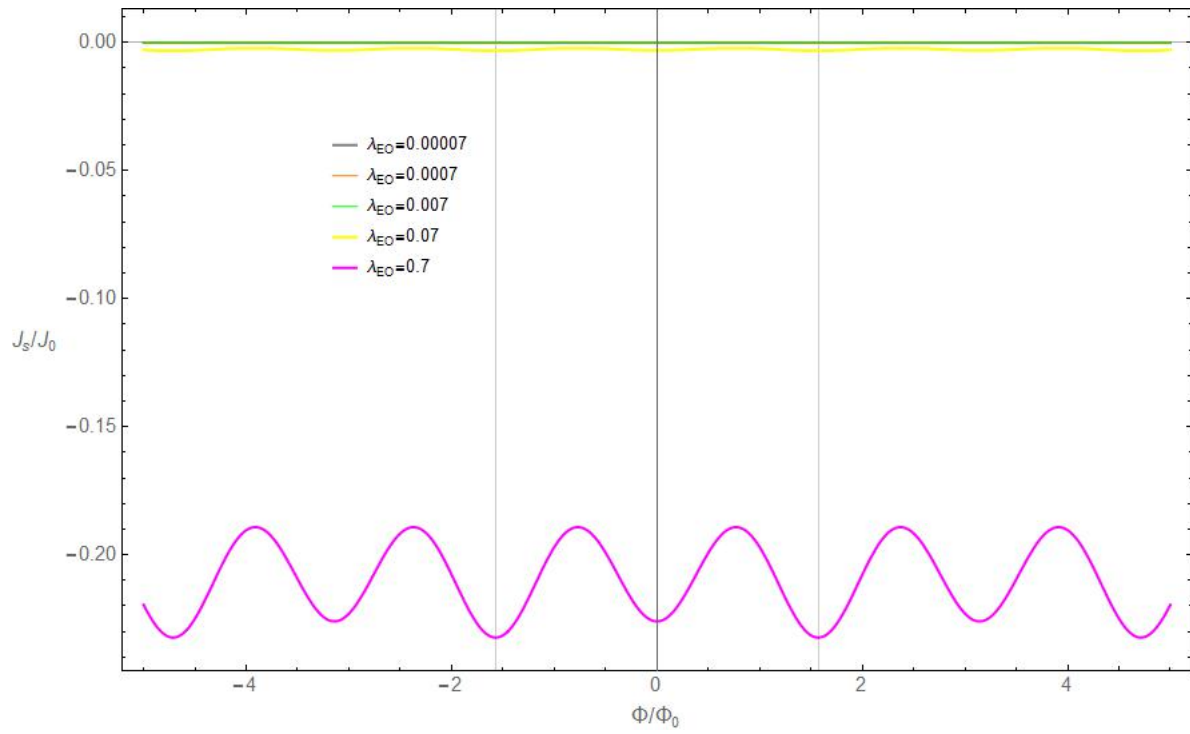


Figura 4.38: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$.

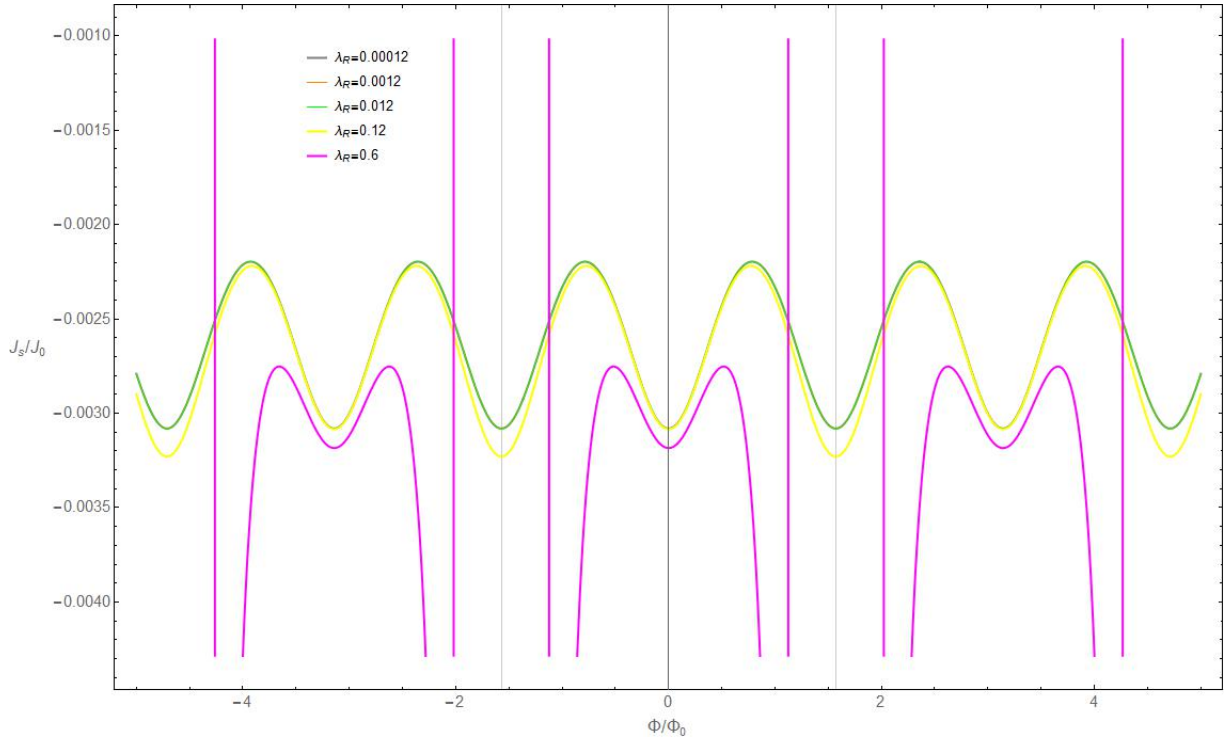


Figura 4.39: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$.

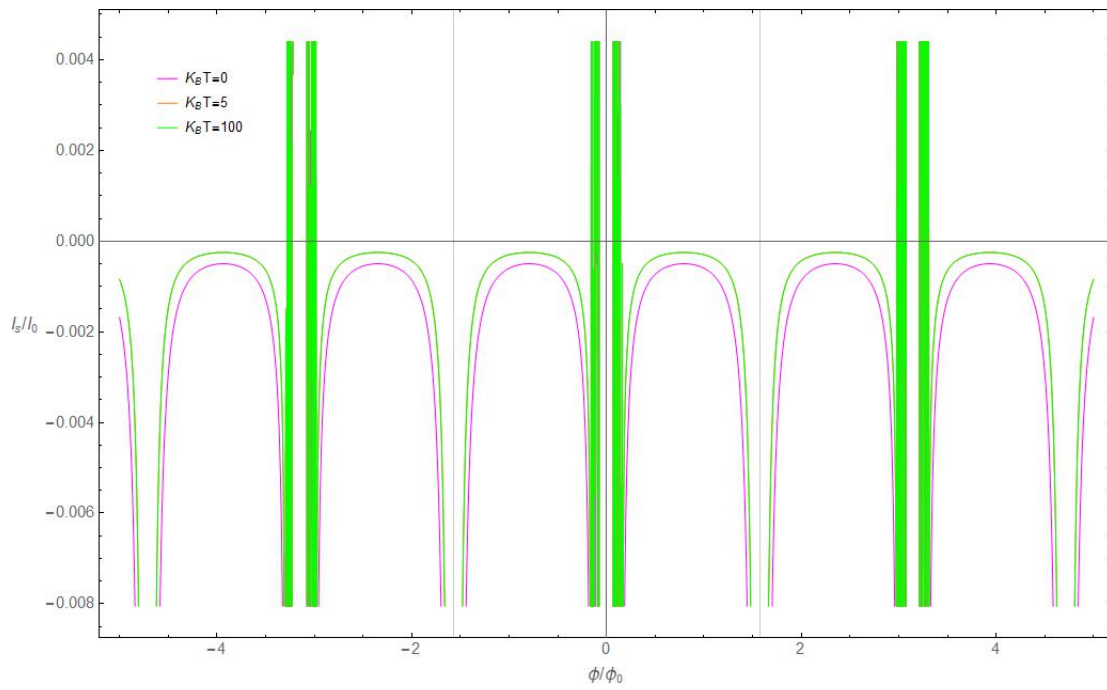


Figura 4.40: Gráfica corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.40, en la que se puede observar que la corriente es robusta para cambios de la temperatura, para aumentos de dos órdenes de magnitud. En las cercanías de valores semi-enteros del flujo magnético se observa una discontinuidad en la corriente de espín, lo que nos indica que en estos valores los niveles de energía que contribuyen a la corriente, son los más cercanos al nivel de Fermi. En estos puntos se tiene un comportamiento cuasi-lineal, lo que podría explicar el cambio abrupto en el signo de la corriente, ya que la derivada de la energía respecto al flujo es discontinua en estos puntos. Para valores de flujo magnético impares la corriente es máxima y para valores cercanos también presenta discontinuidad. Se puede apreciar que existen máximos para valores por debajo de cero en la corriente de espín, mientras que para valores superiores a cero no existen máximos o mínimos; lo que denota esencialmente la presencia del acoplamiento EO Intrínseco tal como se apreció en las densidades de corriente de espín antes mencionadas.

3. Para la entrada $-+$ de la matriz,

$$J_{sx}^{-+} = J_{sx}^{+-}.$$

4. Para la entrada $--$ de la matriz,

$$J_{sx}^{--} = 0.$$

Componente $\hat{y}$

1. Para la entrada $++$ de la matriz,

$$J_{sy}^{++} = 0.$$

2. Para la entrada $+-$ de la matriz,

$$J_{sy}^{+-} = \frac{2t^2 \sin(2\phi) (b + 2t^2 \cos(2\phi) - 2t^2 + \omega^2)}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega^2 - b)^2 + 2t^4 \cos(4\phi) + 6t^4 + 4t^2 \cos(2\phi)(b - 2t^2 + \omega^2) - 4t^2(b + \omega^2))}, \quad (4.44)$$

donde $b = (4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2)$.

Se puede observar en la gráfica 4.41 que la densidad de corriente de espín es robusta para pequeños cambios de temperatura.

Fijando el parámetro EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ en la gráfica 4.42 se observa que la densidad de corriente es insensible a los cambios en el parámetro EO Intrínseco,

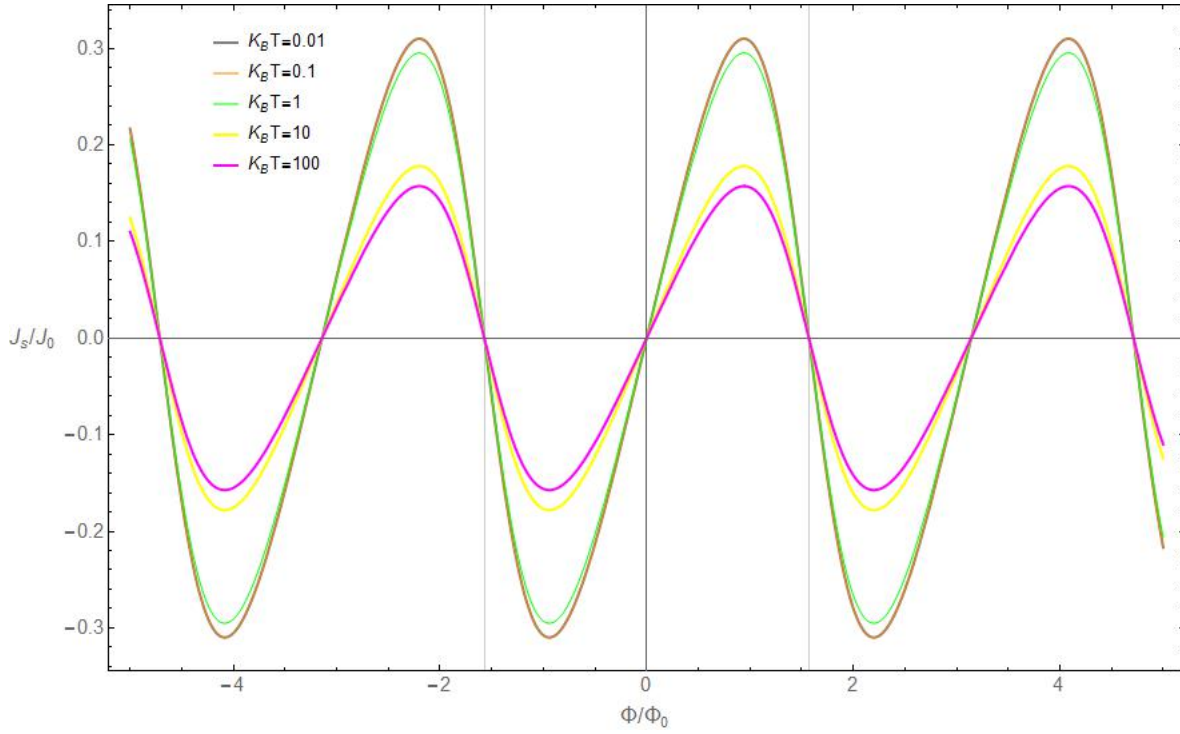


Figura 4.41: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

sólo cuando el parámetro EO Intrínseco está por encima de Rashba se observa una disminución en la intensidad. Esto es debido a la forma en que se complementan ambas interacciones en el parámetro b , que se observa en la expresión (4.44), además del aumento en la brecha entre las bandas de valencia y conducción, dificultando tomar electrones de los niveles desdoblados en espín.

Dejando fijo el valor de parámetro de EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ observamos en la gráfica 4.43 que la densidad de espín es insensible ante variaciones del parámetro EO Rashba, salvo para cuando se iguala en orden de magnitud al parámetro de salto de Tight-Binding, donde se observa que aumenta abruptamente la magnitud y cambia de forma.

Integrando de manera numérica la densidad de corriente de espín se obtiene la corriente mostrada en la gráfica 4.44, en la cual se observa que se degrada con la temperatura y su comportamiento está esencialmente dominado por la interacción EO Rashba.

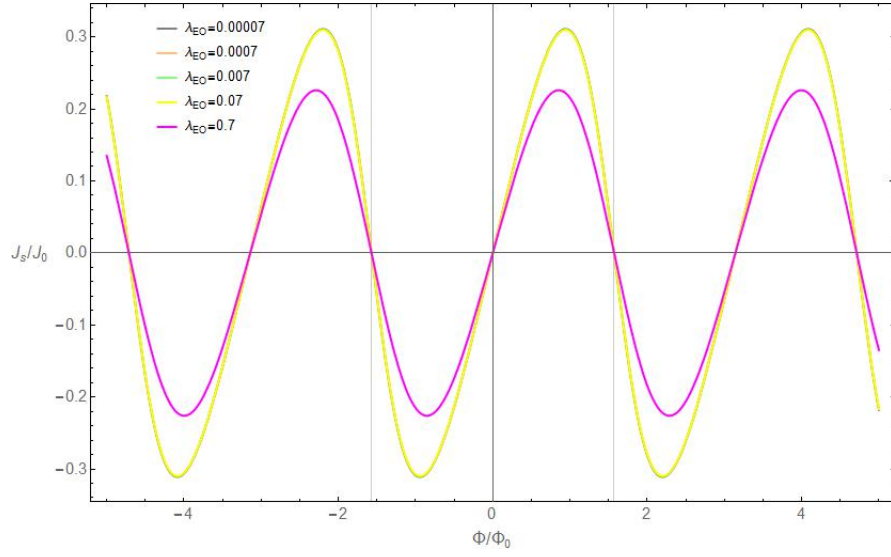


Figura 4.42: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$.

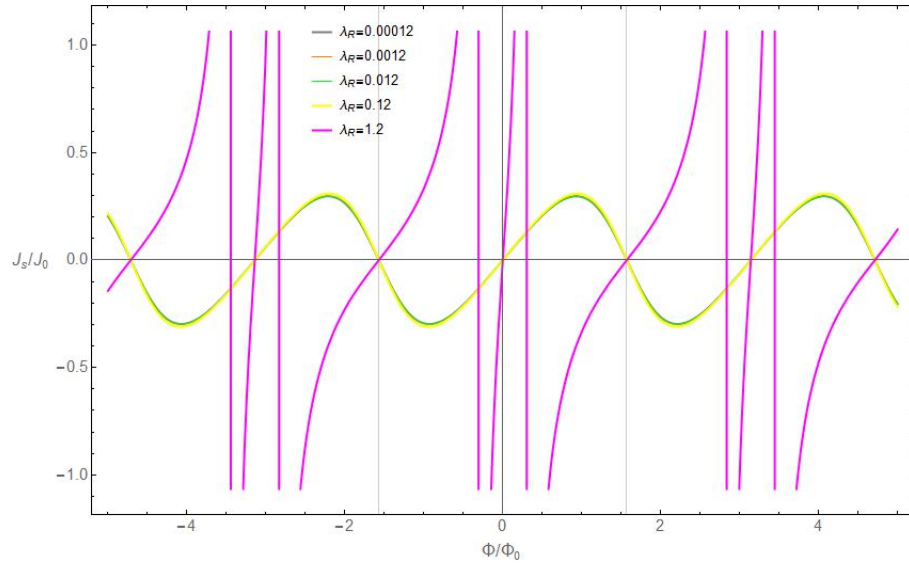


Figura 4.43: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$.

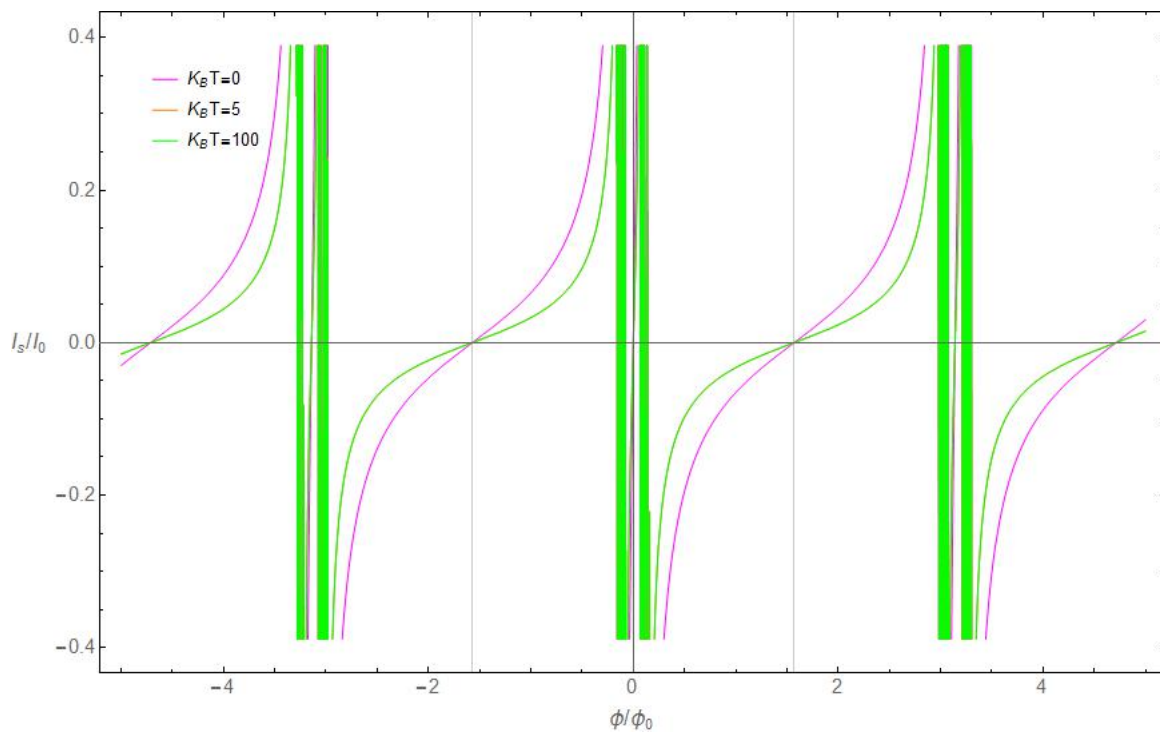


Figura 4.44: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_{EO} = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$.

3. Para la entrada $-+$ de la matriz,

$$J_{sy}^{-+} = -J_{sy}^{+-}, \quad (4.45)$$

donde $a = (4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2)$

4. Para la entrada $--$ de la matriz,

$$J_{sy}^{--} = 0.$$

Componente $\hat{z}$

1. Para la entrada $++$ de la matriz,

$$J_{sz}^{++} = \frac{1}{4(e^{\beta\omega} + 1)} \left[\frac{2it^2 \sin(2\phi) - \lambda_{EO}\sigma(\lambda_{EO}\sigma + i\omega)}{(\lambda_{EO}\sigma + i\omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2} + \frac{\lambda_{EO}\sigma(-\lambda_{EO}\sigma + i\omega) - 2it^2 \sin(2\phi)}{(\lambda_{EO}\sigma - i\omega)^2 + 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2} - \frac{2\lambda_{EO}^2 \left((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_R^2) - 2t^2 \cos(2\phi) + 2t^2 + \omega^2 \right)}{\left((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_R^2) + \omega^2 \right)^2 + 2t^4 \cos(4\phi) + 6t^4 + 4t^2 \cos(2\phi) \left((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2 \right) - 4t^2 \left((4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2 \right)} \right]. \quad (4.46)$$

Se observa en la gráfica 4.45 como la densidad es robusta a pequeños cambios de temperatura y tiene una componente vertical que desplaza un poco la corriente hacia la polarización negativa de la densidad de corriente.

Fijando un valor del parámetro de EO Rashba de $\lambda_R = 0,12$ y variando el Intrínseco, las variaciones en la densidad son muy pronunciadas. Para valores pequeños de EO Intrínseco la densidad es muy baja y no aumenta de manera importante hasta alcanzar tres ordenes de magnitud por encima del caso típico.

Fijando el valor del parámetro EO Intrínseco de $\lambda_{EO} = 0,07$ unidades de energía y variar el de Rashba, el escenario de las componentes anteriores se repite. Es robusta salvo para valores iguales en orden de magnitud del parámetro de salto de Tight-Binding t donde se altera de manera notable la forma y la amplitud de la densidad.

Integrando de forma numérica la densidad de espín respecto a la energía obtenemos la corriente de espín que se ve en gráfica 4.48, en la que observamos que degrada de la forma esperada en temperatura, la cual oscila entre dos polarizaciones de espín. Para este caso con polarización positiva, la corriente toma alternativamente

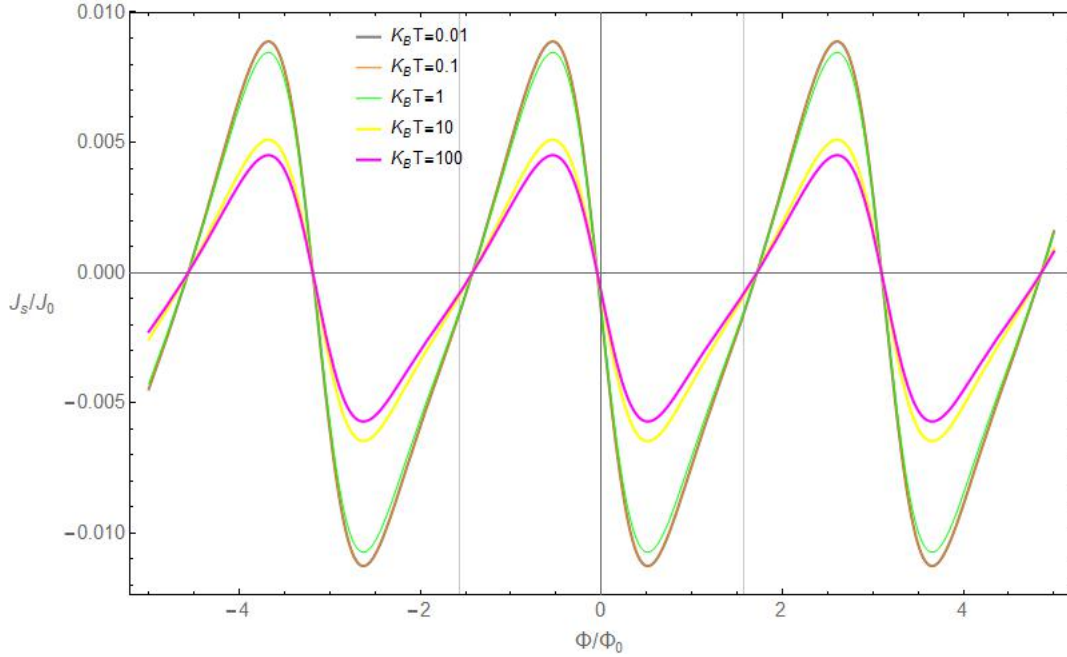


Figura 4.45: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

electrones de niveles de espín no degenerada. Los picos al rededor de cero de deben a ruido numérico en la integración. Para el caso en el que se tiene la polarización negativa en espín, el efecto de la corriente es el mismo, como se aprecia en la gráfica 4.49, en la cual se invierten los máximos y mínimos.

2. Para la entrada +- de la matriz,

$$J_{sz}^{+-} = 0.$$

3. Para la entrada -+ de la matriz,

$$J_{sz}^{-+} = 0.$$

4. Para la entrada -- de la matriz,

$$J_{sz}^{--} = -J_{sz}^{++} \quad (4.47)$$

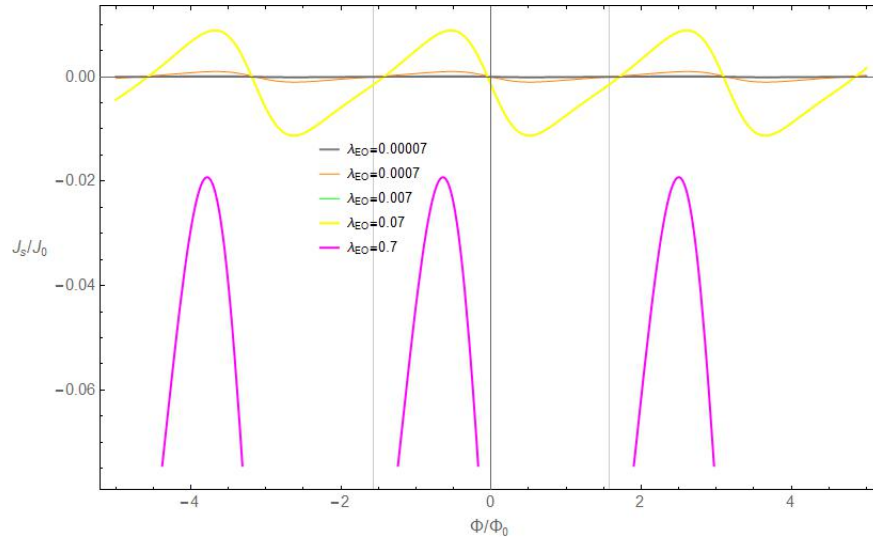


Figura 4.46: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco variable y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

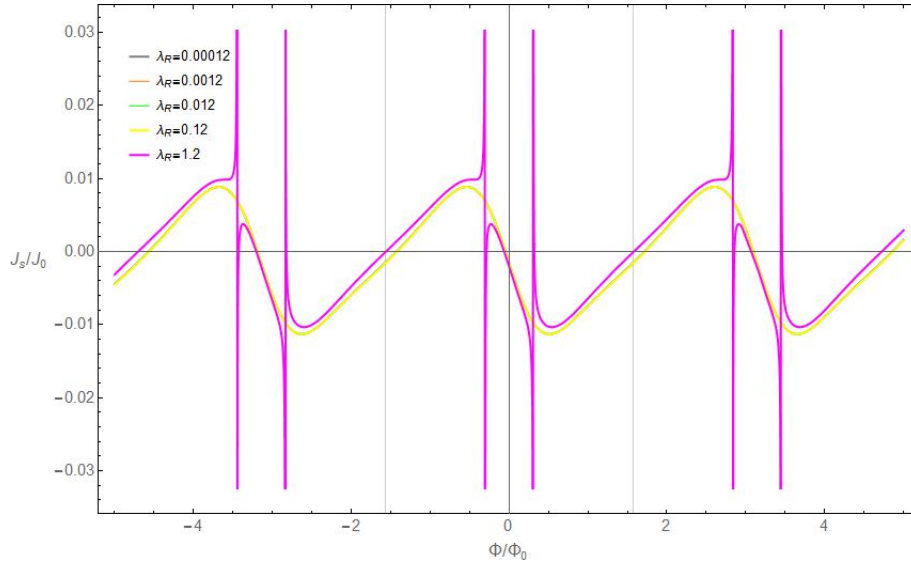


Figura 4.47: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba variable a temperatura $K_B T = 0$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

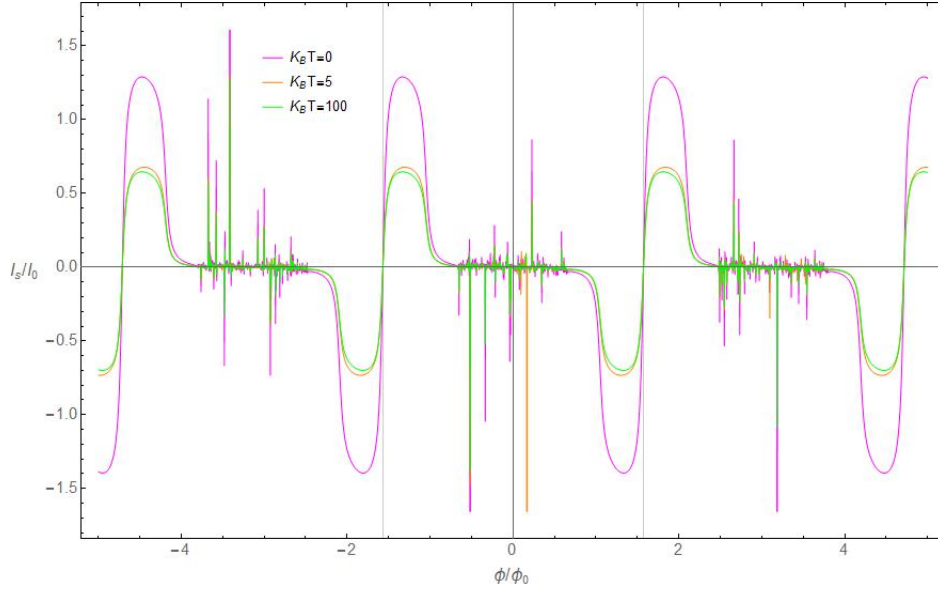


Figura 4.48: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

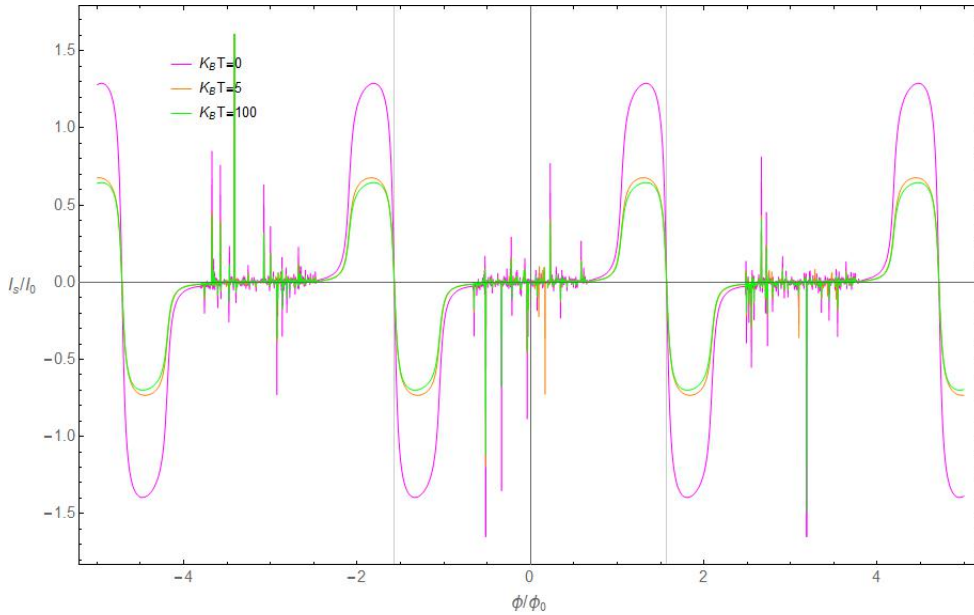


Figura 4.49: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno con acoplamiento EO Intrínseco $\lambda_{EO} = 0,07$ y acoplamiento EO Rashba $\lambda_R = 0,12$ a temperatura variable hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$.

CONCLUSIONES.

En este trabajo calculamos corrientes persistentes de carga y de espín para anillos mesoscópicos de cuatro sitios basados en Grafeno utilizando el formalismo de las funciones de Green en el equilibrio con la técnica de la ecuación de movimiento. La implementación de esta técnica tiene muchas virtudes, entre las que destaca que no es necesario diagonalizar el Hamiltoniano, por lo que pudimos obtener las corrientes persistentes de manera simple. Otra virtud del hecho que al obtener la función de Green menor es posible calcular numerosas cantidades físicas relevantes, ya que todas dependen de dicha función [12].

Se reprodujo el cálculo de una corriente de carga para un anillo basado en Grafeno sin interacción Espín-Órbita (EO), obteniéndose los resultados esperados. Primero, se obtuvo la densidad de corriente, la cual presenta cambios abruptos en el signo cuando se grafica en función del flujo magnético y se obtiene el mismo comportamiento en la corriente de carga. Ambas decaen con el aumento de la temperatura.

Para un anillo con interacciones EO Intrínseca y Rashba por separado, se obtuvieron resultados similares para la densidad de corriente, son robustas a cambios de temperatura por debajo a $K_B T = 1$, pero decaen para temperaturas superiores. En el caso que sólo se tiene EO Rashba, no ocurre un cambio significativo de la densidad de corriente al variar el parámetro, salvo para el caso en el que es comparable con el salto de sitios t , donde la densidad aumenta de forma significativa y cambia su forma. Para el caso en el que sólo se tiene EO Intrínseco ocurre todo lo contrario, al aumentar el valor del parámetro la corriente decae pero mantiene su forma ondulatoria. En el caso de las corrientes, ambas presentan cambios abruptos en los signos y son robustas ante el aumento de la temperatura.

Para un anillo con ambas interacciones EO resulta sumamente interesante el hecho de que en la expresión de la densidad de corriente de carga ambas interacciones entren juntas de la forma $4\lambda_R^2 - \lambda_{EO}^2$, en la cual domina el valor del parámetro EO Rashba λ_R ,

por lo que tanto en la densidad como en la corriente predomina el efecto que tiene este parámetro.

En el caso de las corrientes persistentes de espín el análisis es más complejo, ya que van por componente vectorial y entrada matricial. En el caso de la componente $\hat{x}$ la diagonal es cero, mientras que ambas entradas antidiagonales son equivalentes. En todos los casos, se suman las contribuciones de ambas polarizaciones de espín. Para el caso de un anillo en presencia únicamente del acoplamiento EO Intrínseco la densidad y la corriente están desplazadas por encima de cero a partir de tres órdenes de magnitud de este parámetro por encima del valor común, hecho además acompañado de un aumento en su amplitud. Decaen con el aumento de la temperatura. Para poder observar otras componentes de la corriente cuando se tiene un anillo en presencia de EO Rashba, es necesario aumentar el número de sitios en el anillo, ya que por la simetría de cuatro sitios, esta componente se anula. Para un anillo con ambas interacciones, observamos que la expresión de la densidad de corriente de espín se divide en dos partes, una que involucra únicamente el acoplamiento EO Intrínseco y otra en la que entran juntas con la misma forma que en la corriente de carga, por lo que la densidad de corriente disminuye en amplitud y se acerca más hacia cero desde los negativos al disminuir el valor del EO Intrínseco, pero está por debajo de cero al aumentarlo. La corriente presenta un máximo por debajo de cero y cambios abruptos de signo en todo el dominio, predominando el efecto del acoplamiento EO Intrínseco.

En el caso de la componente $\hat{y}$ la diagonal es cero, y en la antidiagonal, una entrada es el negativo de la otra. En todos los casos, se suman las contribuciones de ambas polarizaciones de espín. La densidad y la corriente presentan un comportamiento similar a la corriente de carga en todos los casos.

En el caso de la componente $\hat{z}$ la antidiagonal es cero y en la diagonal una es el negativo de la otra. En estos casos, se considera una sólo polarización de espín tomando provecho de que una es el negativo de la otra. Para el caso de un anillo en presencia únicamente del acoplamiento EO Intrínseco la densidad para valores muy grandes del acoplamiento está por encima de cero, cambiando por completo su forma. La corriente presenta máximos y mínimos con cambios abruptos de signo y se observa que al aumentar la temperatura disminuye la amplitud. En un anillo en presencia únicamente de EO Rashba esta componente se anula. Para un anillo en presencia de ambas interacciones EO, la densidad de corriente presenta un comportamiento similar al caso de la componente $\hat{x}$ y

por el mismo argumento se impone la interacción EO Intrínseca. En el caso de la corriente existen máximos y mínimos con cambios abruptos de signo.

Un aporte interesante que se presenta, se relaciona con la caracterización del espectro para el caso en el que un anillo de Grafeno u otro material presente interacción EO, recordando que en el régimen de respuesta lineal la derivada del espectro respecto del flujo magnético se corresponde con la densidad de corriente persistente.

Una recomendación para la ampliación de este trabajo, sería reproducir todos estos cálculos para anillos con un mayor número de sitios y así observar las componentes de la corriente de espín que no obtuvimos en este trabajo.

Apéndice A

Cuentas.

A.1. Operadores de creación y aniquilación escritos de forma matricial

Operador de creación en el sitio n :

$$\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

Operador de aniquilación en el sitio n :

$$\mathbf{c}_{n\sigma} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{A.2})$$

Operadores de creación y aniquilación en el sitio n :

$$\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} \quad (\text{A.3})$$

$$\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.4})$$

A.2. Cuenta de los términos de Acoplamiento Espín-Órbita en el Grafeno

A.2.1. El término de acoplamiento EO Intínseco.

$$i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger S_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & -\mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & -\mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}
\end{aligned} \tag{A.5}$$

Quedando entonces:

$$\frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma} \tag{A.6}$$

A.2.2. El término de acoplamiento EO Rashba.

$$i\lambda_R \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\tilde{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}$$

Donde

$$\tilde{\mathbf{S}} = \mathbf{S}_x \hat{x} + \mathbf{S}_y \hat{y} + \mathbf{S}_z \hat{z} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\sigma}_x \hat{x} + \boldsymbol{\sigma}_y \hat{y} + \boldsymbol{\sigma}_z \hat{z})$$

y

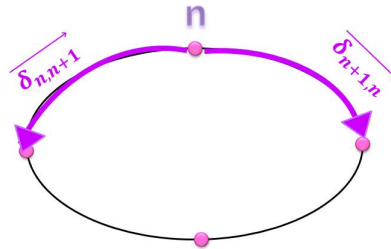


Figura A.1: Vectores a primeros vecinos.

$$\vec{\delta}_{n,n+1} = -a\hat{\theta}, \quad \vec{\delta}_{n+1,n} = a\hat{\theta}, \tag{A.7}$$

cuyos vectores unitarios son:

$$\hat{d}_{n,n+1} = -\hat{\theta}, \quad \hat{d}_{n+1,n} = \hat{\theta}, \quad (\text{A.8})$$

$$i\lambda_R \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \left(\vec{S} \times \mathbf{d}_{12} \right)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \left(\vec{S} \times \mathbf{d}_{21} \right)_z \mathbf{c}_{n\sigma} \right)$$

así

$$\frac{i}{2}\lambda_R \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (-\sigma_x \cos \theta - \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n+1\sigma} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger (\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n\sigma} \right)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \sigma_x \mathbf{c}_{n+1\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \sigma_y \mathbf{c}_{n+1\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\ &= i \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = -i \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \sigma_x \mathbf{c}_{n\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \sigma_y \mathbf{c}_{n\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\ &= i \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n+1\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+1\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = -i \sigma \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \end{aligned}$$

Entonces,

$$\frac{i}{2}\lambda_R \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (-\sigma_x \cos \theta - \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n+1\sigma} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger (\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n\sigma} \right)$$

Finalmente:

$$\frac{i}{2}\lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} - \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right) \quad (\text{A.9})$$

donde θ es el ángulo que hay entre un sitio del anillo y su primer vecino.

A.3. Conmutador.

El conmutador del primer término del Hamiltoniano con el operador posición viene dado explícitamente por:

$$\begin{aligned}
 \left[t \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}, \sum_j \mathbf{c}_{j\sigma'}^\dagger j \mathbf{c}_{j\sigma'} \right] &= t \sum_{nj} [\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}, \mathbf{c}_{j\sigma'}^\dagger \mathbf{c}_{j\sigma'}] j \\
 &= t \sum_{nj} (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger [\mathbf{c}_{n\sigma}, \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_j] + [\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger, \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_j] \mathbf{c}_{n\sigma}) j \\
 &= t \sum_{nj} (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\{\mathbf{c}_{n\sigma}, \mathbf{c}_j^\dagger\} \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_j^\dagger \{\mathbf{c}_{n\sigma}, \mathbf{c}_j\})) \\
 &\quad + (\{\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger, \mathbf{c}_j^\dagger\} \mathbf{c}_j - \mathbf{c}_j^\dagger \{\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger, \mathbf{c}_j\}) \mathbf{c}_{n\sigma}) j \\
 &= t \sum_{nj} (\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_j \delta_{nj} \delta_{\sigma\sigma'} - \mathbf{c}_j^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} \delta_{nj} \delta_{\sigma\sigma'}) j \\
 &= 0
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

A.4. Valor medio de la ecuación (4.15) y definición de las funciones de Green para el mismo.

Procedemos a conseguir el valor medio de la ecuación (4.15) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{H}, \mathbf{x}] &= t \underbrace{\sum_{n\sigma} e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}}_{\mathcal{A}} - t \underbrace{\sum_{n\sigma} e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}}_{\mathcal{B}} + i\lambda_{EO} \underbrace{\sum_{n\sigma} \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}}_{\mathcal{C}} \\
 &\quad - \underbrace{\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}}_{\mathcal{D}} - \underbrace{\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)}}_{\mathcal{E}}.
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

Para el valor medio de $\mathcal{A}$

$$\langle \mathcal{A} \rangle = t \sum_n e^{i\phi} \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} \rangle.$$

Definimos la función de Green:

$$G_{n+1\sigma, n\sigma}(t) \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+1\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle,$$

de modo que:

$$G_{n+1\sigma,n\sigma}^<(t) = i\langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}(t) \rangle,$$

y así:

$$\langle \mathcal{A} \rangle = -it \sum_n e^{i\phi} G_{n+1\sigma,n\sigma}^<(0).$$

Veamos el valor medio de $\mathcal{B}$:

$$\langle \mathcal{B} \rangle = t \sum_n e^{-i\phi} \langle \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} \rangle$$

Definimos:

$$G_{n\sigma,n+1\sigma}(t) \equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \rangle,$$

de modo que,

$$G_{n\sigma,n+1\sigma}^<(t) = i\langle \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \rangle,$$

y así:

$$\langle \mathcal{B} \rangle = t \sum_n e^{-i\phi} G_{n\sigma,n+1\sigma}^<(0),$$

Para el valor medio de $\mathcal{C}$,

$$\langle \mathcal{C} \rangle = i\lambda_{EO} \sum_{n\sigma} \nu_n \sigma \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma} \rangle.$$

Definimos:

$$G_{n+2\sigma,n\sigma}(t) \equiv -i\langle T_c \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle,$$

de modo que:

$$G_{n+2\sigma,n\sigma}^<(t) = i\langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \rangle,$$

y así:

$$\langle \mathcal{C} \rangle = i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \sigma G_{n+2\sigma,n\sigma}^<(0).$$

Para el valor medio de $\mathcal{D}$

$$\langle \mathcal{D} \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

$$G_{n+1(-\sigma),n\sigma}(t) \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle,$$

de modo que:

$$G_{n+1(-\sigma),n\sigma}^<(t) = i \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}(t) \rangle,$$

y así:

$$\langle \mathcal{D} \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\theta\sigma} G_{n+1(-\sigma),n\sigma}^<(0).$$

Para el valor medio de $\mathcal{E}$

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

$$G_{n(-\sigma),n+1\sigma}(t) \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \rangle,$$

de modo que,

$$G_{n(-\sigma),n+1\sigma}^<(t) = i \langle \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \rangle,$$

y así:

$$\langle \mathcal{E} \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_R \sum_n e^{-i\theta\sigma} G_{n(-\sigma),n+1\sigma}^<(0).$$

A.5. Anticonmutador.

El anticonmutador del vector $\tilde{\mathbf{S}}$ con la ecuación (4.15) la cual dividimos como en (A.11), viene dado por:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{A}\} = \frac{t}{2} \sum_n e^{i\phi} (\{\sigma_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}\} \hat{x} + \{\sigma_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}\} \hat{y} + \{\sigma_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}\} \hat{z}), \quad (\text{A.12})$$

resolviendo por separado para cada componente,

$$\begin{aligned}
\{\sigma_x, c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma}\} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} & 0 \\ 0 & c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} & 0 \\ 0 & c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} \\ c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} \\ c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} + c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} \\ c_{n\uparrow}^\dagger c_{n+1\uparrow} + c_{n\downarrow}^\dagger c_{n+1\downarrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & \sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \\ \sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_x,
\end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
\{\sigma_y, c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma}\} &= \sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_y, \\
\{\sigma_z, c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma}\} &= 2c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_z,
\end{aligned}$$

nos queda:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{A}\} = \frac{t}{2} \sum_n e^{i\phi} \left(\sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_x \hat{x} + \sum_\sigma c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_y \hat{y} + 2c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} \sigma_z \hat{z} \right).$$

Luego:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{B}\} = -\frac{t}{2} \sum_n e^{-i\phi} \left(\{\sigma_x, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} \hat{x} + \{\sigma_y, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} \hat{y} + \{\sigma_z, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente,

$$\begin{aligned}
\{\sigma_x, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} &= \sum_\sigma c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \sigma_x, \\
\{\sigma_y, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} &= \sum_\sigma c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \sigma_y, \\
\{\sigma_z, c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}\} &= 2c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma} \sigma_z,
\end{aligned}$$

nos queda:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{B}\} = -\frac{t}{2} \sum_n e^{-i\phi} \left(\sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x \hat{x} + \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y \hat{y} + 2\mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_z \hat{z} \right).$$

Luego,

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{C}\} = \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \left(\{\boldsymbol{\sigma}_x, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{x} + \{\boldsymbol{\sigma}_y, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{y} + \{\boldsymbol{\sigma}_z, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente,

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\sigma}_x, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x, \\ \{\boldsymbol{\sigma}_y, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y, \\ \{\boldsymbol{\sigma}_z, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= 2\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} I_{2 \times 2}, \end{aligned}$$

nos queda:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{C}\} = \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \left(\sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x \hat{x} + \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y \hat{y} + 2\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} I_{2 \times 2} \hat{z} \right).$$

Luego,

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{D}\} = \frac{i}{4} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\{\boldsymbol{\sigma}_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} \hat{x} + \{\boldsymbol{\sigma}_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} \hat{y} + \{\boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} \hat{z} \right)$$

resolviendo por separado para cada componente,

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\sigma}_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} &= \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \{\boldsymbol{\sigma}_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} &= i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \{\boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}\} &= 0 \end{aligned}$$

nos queda:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{D}\} = \frac{i}{4} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

Luego,

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{E}\} = \frac{i}{4} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\left\{ \boldsymbol{\sigma}_x, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{x} + \left\{ \boldsymbol{\sigma}_y, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{y} + \left\{ \boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{z} \right)$$

resolviendo por separado para cada componente,

$$\begin{aligned} \left\{ \boldsymbol{\sigma}_x, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \boldsymbol{\sigma}_y, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \boldsymbol{\sigma}_z, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= 0 \end{aligned}$$

nos queda:

$$\{\tilde{\mathbf{S}}, \mathcal{E}\} = \frac{i}{4} \lambda_R \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

A.6. Funciones de Green

La sumatoria de las diferentes funciones de Green que aparecen en las dendidades de corriente y de espín:

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^4 G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) &= G_{2\sigma, \sigma}^<(0) + G_{3\sigma, 2\sigma}^<(0) + G_{4\sigma, 3\sigma}^<(0) + G_{\sigma, 4\sigma}^<(0) \\ \sum_{n=1}^4 G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) &= G_{\sigma, 2\sigma}^<(0) + G_{2\sigma, 3\sigma}^<(0) + G_{3\sigma, 4\sigma}^<(0) + G_{4\sigma, \sigma}^<(0) \\ \sum_{n=1}^4 G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) &= G_{3\sigma, \sigma}^<(0) + G_{4\sigma, 2\sigma}^<(0) + G_{\sigma, 3\sigma}^<(0) + G_{2\sigma, 4\sigma}^<(0) \\ \sum_{n=1}^4 G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^<(0) &= G_{2(-\sigma), \sigma}^<(0) + G_{3(-\sigma), 2\sigma}^<(0) + G_{4(-\sigma), 3\sigma}^<(0) + G_{-\sigma, 4\sigma}^<(0) \\ \sum_{n=1}^4 G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) &= G_{-\sigma, 2\sigma}^<(0) + G_{2(-\sigma), 3\sigma}^<(0) + G_{3(-\sigma), 4\sigma}^<(0) + G_{4(-\sigma), \sigma}^<(0) \end{aligned} \tag{A.14}$$

Sistema de ecuaciones generado por la primera función de Green:

$$\begin{aligned}
i \frac{dG_{2\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t' G_{2\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4\sigma,\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{-\sigma,\sigma}(t) - G_{3(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= \delta(t, 0) + t' G_{\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(t) \right) \\
&\quad + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3\sigma,\sigma}(t) + \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{4(-\sigma),\sigma}(t) - G_{2(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{3\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t' G_{3\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{\sigma,\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{2(-\sigma),\sigma}(t) - G_{4(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{4\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t' G_{4\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{\sigma,\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2\sigma,\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{3(-\sigma),\sigma}(t) - G_{-\sigma,\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{-\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= +t' G_{-\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(t) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{i\sigma\theta} \left(G_{4\sigma,\sigma}(t) - G_{2\sigma,\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{2(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= +t' G_{2(-\sigma),\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(t) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4(-\sigma),\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{i\sigma\theta} \left(G_{\sigma,\sigma}(t) - G_{3\sigma,\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{3(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= +t' G_{3(-\sigma),\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(t) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{-\sigma,\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{i\sigma\theta} \left(G_{2\sigma,\sigma}(t) - G_{4\sigma,\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{4(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= +t' G_{4(-\sigma),\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(t) + e^{i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(t) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2(-\sigma),\sigma}(t) \\
&\quad + \frac{i\lambda_R}{2} e^{i\sigma\theta} \left(G_{3\sigma,\sigma}(t) - G_{\sigma,\sigma}(t) \right)
\end{aligned} \tag{A.15}$$

A.7. Matriz.

Denotaremos las entradas de una matriz 2×2 de la siguiente manera:

$$M_{2 \times 2}^{ab} = \begin{pmatrix} ++ & +- \\ -+ & -- \end{pmatrix} \tag{A.16}$$

con ab representando las entradas de las matrices.

Bibliografía

- [1] Edward McCann. Electronic properties of monolayer and bilayer graphene. arXiv:12054849v1 [cond-mat.mes-hall]:3–11, 2012.
 - [2] A.K. Geim et al. K.S. Novoselov. Room-temperature electric field effect and carrier-type inversion in graphene films. 2004.
 - [3] N Bolívar et al. Persistent charge and spin currents in the long-wavelength regime for graphene rings. 10.1103/PhysRevB.89.125413:6–9, 2014.
 - [4] Y. Imry M. Buttiker and R. Landauer. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. 96, Issue 7:365–367, 1983.
 - [5] William Ennis Shanks. Persistent Currents in Normal Metal Rings. arXiv:1112.3395v1 [cond-mat.mes-hall]:6–10, 2011.
 - [6] Mikhail I. Katsnelson. Graphene chemistry. page <https://www.britannica.com/science/graphene>.
 - [7] Jean-Noel and Mark Oliver. Introduction to the physical properties of graphene. pages 21–41.
 - [8] Ernesto Medina. Derivation of the Kane and Mele Hamiltonian beginning from the second quantized form. 03.65.Ud, 34.80.Qb, 2012.
 - [9] Robert Eisberg and Robert Resnick. Física cuántica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleo y partículas. 220, 4598:319–419, 2011.
 - [10] Vanessa Torres. EFECTOS TOPOLÓGICOS Y CUANTIZACIÓN EN CORRIENTES DE ESPÍN. pages 17–20, 2010.
 - [11] et al Hongki Min. Intrinsic and Rashba spin-orbit interactions in graphene sheets.
 - [12] Félix P. Marín G. Keldysh Elemental. 3.1:3–59, 2008.
-

- [13] Wolfgang Nolting. Fundamentals of Many-body Physics. pages 107–117, 2009.
 - [14] Janine Splettstoesser y colaboradores. Persistent current in ballistic mesoscopic rings with Rashba spin-orbit coupling. arXiv:0305310v1 [cond-mat.mes-hall]:2–6, 2003.
 - [15] Qing feng Sun y colaboradores. Definition of the spin current: The angular spin current and its physical consequences. 10.1103/PhysRevB.72.245305:2–4, 2005.
-