

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA



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

Trabajo Especial de Grado presentado por
Dayanna Pereira
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

Octubre-2017
Caracas-Venezuela

UNIVERSIDAD CENTRAL DE VENEZUELA
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA



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

Trabajo Especial de Grado presentado por
Dayanna Pereira
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

Octubre-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 **Dayanna Vanesa Pereira Henríquez**, Cédula de Identidad **V-21120767**, bajo el título **“Corrientes Persistentes de Carga y de Espín en Siliceno usando la técnica de las Funciones de Green en el equilibrio”**, a los fines de cumplir con el requisito legal para optar al grado de **Licenciada en Física**, dejan constancia de lo siguiente:

1. Leído como fue dicho trabajo por cada uno de los miembros del Jurado, éste fijó el día 5 de octubre de 2017, a las 2:00 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 5 días del mes de octubre 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 Bolívar Cova.

Firma del jurado evaluador

Prof Hely Arnal Cordero
UCV

Prof Alberto José Bellorín
UCV

Prof Nelson Enrique Bolívar
UCV



Agradecimientos

En este trabajo especial de grado, primeramente quiero agradecer a Dios, que me dio la oportunidad de recorrer todo este camino que, aunque en algunos momentos ha estado lleno de obstáculos, me ayudó a ver cada circunstancia con claridad, siempre guiada por la fe y la seguridad de que en la vida las metas se pueden lograr. A mis padres, por darme amor, cariño, apoyo, consejos, ánimo, comprensión, ayuda en los momentos difíciles y sobre todo el soporte necesario con los recursos cuando más los necesitaba.

A mi hermana gemela Cassandra, mi mejor amiga, quien me soportó en este trayecto y por darme ánimos para seguir esforzándome. A mis mejores amigos Jovanna Moya, Herimar Bellera, Fabiana Fortino, Rocío Mora y Jorge Dasilva quienes siempre confiaron en mí y cuyas amistades perduraran a pesar del tiempo y la distancia. A mi novio Richert Bompert, por darme su cariño, comprensión y siempre apoyarme en todo momento.

Para finalizar, a mis tutores Nelson Bolívar y David Verrilli por servirme de guía y apoyo durante la realización de este trabajo especial de grado, por exigirme a tope, para lograr un trabajo de investigación de calidad y hacerme entender que, aunque se vea oscuro, con constancia, trabajo y sacrificio se logra lo propuesto; y muchas otras personas.

RESUMEN.

En el presente trabajo estudiamos las corrientes persistentes de carga y de espín para anillos mesoscópicos de cuatro sitios basado en siliceno sujeto a interacciones Espín-Órbita tipo intrínseca y Rashba extrínseca e intrínseca, el cual es atravesado por un flujo de campo magnético de forma perpendicular al plano del anillo. Para ello utilizamos el formalismo de las funciones de Green en el equilibrio con la técnica de la ecuación de movimiento. Primero realizamos el cálculo de las corrientes persistentes de carga sin interacción Espín-Órbita. Luego realizamos los cálculos para los casos cuando las interacciones EO intrínseca y Rashba extrínseca actúan de manera separa, y cuando sólo se tiene presente las interacciones EO extrínseca e intrínseca de Rashba en el anillo. Para este último caso, se obtiene una oscilación modulada con el parámetro de Rashba intrínseco en la densidad de corriente respecto al flujo magnético. Posteriormente procedimos a realizar los cálculos en presencia de todas las interacciones EO, observando en el comportamiento de la corriente que las interacciones intrínseca y Rashba extrínseca proceden como una sola interacción, predominado ante el acoplamiento Rashba intrínseco. Para todos los casos la presencia de un acoplamiento EO grande abre más la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción, ocasionando que los electrones en los niveles pocos profundos necesiten energías mayores para ascender a la banda de conducción. Por último siguiendo el mismo procedimiento, calculamos cada componente vectorial de la corriente de espín para los casos de acoplamiento EO separados y cuando las interacciones actúan de manera simultánea, en donde observamos que el comportamiento de la corriente varía para cada componente de espín. Para la componente $\hat{x}$, la densidad de corriente respecto al flujo magnético cuando sólo se tiene presente el acoplamiento EO intrínseco se encuentra desplazada por encima de cero y cuando sólo se tiene presente los acoplamientos EO Rashba la componente $\hat{x}$ se anula. En la componente $\hat{y}$ para todos los casos obtenemos resultados similares que las corrientes de carga. Para la componente $\hat{z}$, observamos que la corriente de espín en función del flujo magnético cuando sólo se tiene presente el acoplamiento EO intrínseco se satura al variar la temperatura y cuando sólo se tiene presente los acoplamientos EO Rashba la componente $\hat{z}$ se anula. La corriente de carga y la corriente de espín para todos los casos disminuyen con el aumento de la temperatura y para los casos cuando sólo se tiene interacciones EO intrínseca y Rashba extrínseca los resultados son similares al caso de un anillo de grafeno en presencia de interacciones EO intrínseca y Rashba extrínseca.

Palabras claves: Siliceno, corrientes persistentes, acoplamiento Espín-Órbita, funciones de Green.

Índice general

Lista de figuras	13
Introducción.	21
1. Siliceno.	25
1.1. Estructura del siliceno.	25
1.2. Modelo Tight-Binding.	28
1.2.1. Red con dos átomos por celda unitaria.	29
1.2.2. Bandas energéticas en el siliceno.	31
2. Acoplamiento Espín-Órbita.	33
2.1. Espín.	33
2.2. Acoplamiento Espín-Órbita en un átomo.	34
2.3. Acoplamiento Espín-Órbita en un sólido.	36
2.3.1. Simetrías de inversión	36
2.3.2. Interacción Espín-Órbita en dos dimensiones: acoplamiento Rashba	38
2.4. Acoplamiento Espín-Órbita en el siliceno.	39
3. Funciones de Green y el método de la ecuación de movimiento.	41
3.1. Representaciones y valores medios en Mecánica Cuántica.	41
3.1.1. Matriz densidad y sistemas macroscópicos.	44
3.1.2. Respuesta lineal.	45
3.2. Funciones de Green.	48
3.2.1. Ecuaciones de movimiento.	50
3.2.2. Equilibrio termodinámico.	51
4. Corrientes persistentes.	55
4.1. Corrientes persistentes de carga.	58

4.1.1.	Corrientes persistentes de carga para un anillo de siliceno con interacción Espín - Órbita tipo intrínseco y Rashba.	59
4.1.2.	Resultados de las corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno sin acoplamiento Espín-Órbita.	68
4.1.3.	Resultados de las corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.	70
4.1.4.	Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.	74
4.1.5.	Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco e intrínseco de Rashba.	76
4.1.6.	Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco.	80
4.2.	Corrientes persistentes de espín.	85
4.2.1.	Corrientes persistentes de espín para un anillo de siliceno con interacción Espín-Órbita tipo intrínseco y Rashba.	86
4.2.2.	Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.	89
4.2.3.	Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.	97
4.2.4.	Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco e intrínseco de Rashba.	101
4.2.5.	Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco.	104

Conclusiones. 117

A. Cálculos. 125

A.1.	Operadores de creación y aniquilación.	125
A.2.	Términos de acoplamiento Espín-Órbita en el siliceno.	125
A.2.1.	Término de acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.	125
A.2.2.	Término de acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.	126
A.2.3.	Término de acoplamiento Espín-Órbita intrínseco de Rashba.	127
A.3.	Valor medio del conmutador $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$ y definición de las Funciones de Green.	128

A.4. Anticonmutador de la corriente de espín.	131
---	-----

Índice de figuras

1.1. Arreglo bidimensional en el siliceno. La celda unitaria está delineada y sombreada.	26
1.2. Deformación ΔZ entre los dos planos del siliceno con un ángulo θ que se define entre el enlace Si-Si y la dirección z normal al plano.	27
1.3. Primera zona de Brillouin.	27
1.4. Banda de energía en el siliceno.	31
2.1. Movimiento del núcleo visto por electrón.	35
2.2. Los electrones en movimiento (k_x) con un campo eléctrico perpendicular (E_z) inducen el campo de Rashba B_{Ry} (arriba). En un sistema Rashba, los electrones de espín polarizados preceden alrededor del eje del campo Rashba (abajo).	38
4.1. Anillo unidimensional de radio $L/2\pi$ con la partícula de carga $-e$ confinada. El campo magnético aplicado $\vec{B}$ es paralelo a la dirección $\hat{z}$	56
4.2. (a) Gráfica de energía en función de n en ausencia de campo magnético. (b) Gráfica de energía en función de n al aplicar un campo magnético. . . .	57
4.3. Corriente de carga pura.	58
4.4. Anillo unidimensional con cuatro átomos de silicio.	60
4.5. Vectores a primeros vecinos.	62
4.6. Vectores a segundos vecinos.	62
4.7. Conteo de sitios en el anillo.	64
4.8. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con $t = 1$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	69
4.9. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	69

4.10. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	70
4.11. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno con acoplamiento EO tipo intrínseco variable en función del flujo magnético a temperatura $K_B T = 0$	71
4.12. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	72
4.13. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	73
4.14. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	75
4.15. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 4$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	75
4.16. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	76
4.17. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	78
4.18. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ con $K_B T = 0$	79
4.19. Gráfica corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	79

4.20. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$	80
4.21. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 4$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	81
4.22. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ a $K_B T = 0$	82
4.23. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable, intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a $K_B T = 0$	83
4.24. Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable, intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a $K_B T = 0$	83
4.25. Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	84
4.26. Corriente de espín pura debida al flujo de cargas transportadas por los electrones con espines hacia arriba y espines hacia abajo.	85
4.27. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$	90
4.28. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	91

4.29. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	92
4.30. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	92
4.31. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	93
4.32. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$	94
4.33. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$	95
4.34. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ con polarización positiva de espín $\sigma = 1$	96
4.35. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ con polarización negativa de espín $\sigma = -1$	96
4.36. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	99
4.37. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable a temperatura $K_B T = 0$	99

4.38. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	100
4.39. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	102
4.40. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ a temperatura $K_B T = 0$	103
4.41. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	104
4.42. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{E0} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	105
4.43. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$	106
4.44. Gráfica del espectro de energías de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco a temperatura $K_B T = 0$	107
4.45. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO tipo extrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$	108
4.46. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$	108

- 4.47. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R2} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ 109
- 4.48. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO intrínseco variable, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a temperatura $K_B T = 0$ 110
- 4.49. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable, EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a temperatura $K_B T = 0$ 111
- 4.50. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ 112
- 4.51. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ 113
- 4.52. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$ 113
- 4.53. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$ 114
- 4.54. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ 114

- 4.55. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$ 115
- 4.56. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$ 116
- 4.57. Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$ 117
- 4.58. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$ 118
- 4.59. Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$ 118

INTRODUCCIÓN.

En los últimos años los materiales bidimensionales han sido de gran interés científico. Los recientes éxitos asociados al grafeno han conducido en primera instancia, a la investigación teórica de estructuras con base hexagonal formadas por otros elementos. El silicio es el segundo elemento químico más abundante en la corteza terrestre después del oxígeno, y es hoy en día el elemento semiconductor más usado en la industria de la electrónica actual. La necesidad de encontrar estructuras bidimensionales hechas de silicio han llevado a estudiar al siliceno como un material prometedor dentro de la física de la materia condensada, que pasó de la teoría al experimento en pocos años.

Este material de átomos de silicio con una estructura hexagonal, fue descrito por primera vez en 1994 por Takeda y Shiraishi [1] e investigado con más detalle en el 2007 por Guzmán-Verri y Yan Voom [2]. Una de las peculiaridades del siliceno en relación al grafeno, está en el hecho de que el siliceno presenta una geometría deformada, el cual es el responsable de la fuerte interacción Espín-Órbita, lo que puede abrir un gap eléctricamente sintonizable. Por otro lado, el siliceno presenta una estructura electrónica parecida al grafeno, con dispersiones lineales en las bandas de valencia y conducción formando los conocidos conos de Dirac [3]. Actualmente, aún no se ha podido sintetizar siliceno en estado libre, pero se obtiene hasta los momentos sobre sustratos que le dan estabilidad [4].

El siliceno puede presentar dos tipos de acoplamiento Espín-Órbita: tipo intrínseco, propio del material y tipo extrínseco de Rashba, producido por un campo eléctrico externo que rompe la simetría de inversión en el plano, que además debido a su geometría se induce un campo eléctrico, originando así un acoplamiento Espín-Órbita intrínseco de Rashba.

Existen modelos en física mesoscópica en el cual al considerar un anillo metálico sujeto a un flujo magnético que no interactúa directamente con los electrones en el anillo generan corrientes de origen cuántico, llamadas corrientes persistentes. La observabilidad de este efecto en anillos metálicos se predijo por primera vez en 1983 cuando Büttiker expuso sus resultados sobre este fenómeno [5]. Estas corrientes se producen por el corrimiento del estado base en el anillo con momento angular distinto de cero, producto de la fase introducida como consecuencia del flujo magnético. Este flujo magnético está relacionado con el efecto Aharonov-Bohm descrito en 1953 por los físicos Yakir Aharonov y David Bohm [6], en el cual un electrón expuesto a una región con potencial vector no nulo sufrirá una dispersión en su trayectoria debido a una diferencia de fase en su propagación.

En los anillos metálicos se generan corrientes de carga que se deben al movimiento de una partícula cargada y corrientes de espín que se generan por la presencia de un acoplamiento Espín-Órbita que rompe la simetría de inversión temporal en el material, permitiendo el desdoblamiento de los niveles de energía correspondientes a cada espín. Por lo tanto, en presencia de acoplamiento Espín-Órbita estas corrientes son características del material.

Las corrientes persistentes de carga y de espín para anillos mesoscópicos pueden ser obtenidas mediante el uso del formalismo de las funciones de Green en el equilibrio y la técnica de la ecuación de movimiento. Esta técnica posee muchas virtudes, una de ellas es que permite calcular cantidades físicas, como por ejemplo los valores medios de las densidades de corriente [7]. Otra virtud que se destaca en este método es que no exige diagonalizar el Hamiltoniano del material para conseguir el espectro de energía.

La estructura de este trabajo de investigación es como sigue. En el capítulo 1 estudiaremos la estructura del siliceno y el modelo Tight-Binding en este material. En el capítulo 2 se analiza la interacción Espín-Órbita así como ciertos aspectos referidos a este fenómeno y las interacciones propias en el siliceno. Seguidamente en el capítulo 3 explicaremos el formalismo de las funciones de Green y la técnica de la ecuación de movimiento. Por último en el capítulo 4 calcularemos las corrientes persistentes de carga y de espín en un anillo unidimensional basado en siliceno con cuatro sitios. Primero se presentarán los resultados sin acoplamiento Espín-Órbita, para luego presentar los resultados con sólo acoplamiento EO intrínseco, sólo acoplamiento EO Rashba extrínseco e intrínseco y para finalizar cuando se tiene presente todas las interacciones EO en el anillo.

Objetivo General.

Estudio de las corrientes persistentes en un anillo de siliceno utilizando la técnica de funciones de Green en el equilibrio y el método de la ecuación de movimiento.

Objetivos Específicos.

- Cálculo de las corrientes persistentes de carga en un anillo de siliceno, utilizando la técnica de funciones de Green en el equilibrio y el método de la ecuación de movimiento.
- 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 de funciones

de Green en el equilibrio y el método de la ecuación de movimiento.

- Relevancia y discusión del presente enfoque con respecto a resultados experimentales.

Capítulo 1

Siliceno.

En 1994 Takeda y Shiraishi [1] estudiaron las características estructurales de sistemas bidimensionales hexagonales a base de silicio, mediante el uso de cálculos de energía total de primeros principios. A partir de tales cálculos, el silicio efectivamente podía ordenarse en una estructura bidimensional, aunque a diferencia del grafeno, esta estructura presentaba cierto grado de deformación. Posteriormente, tras el enorme éxito del grafeno, en el 2007 Guzmán-Verri y Yan Voom [2] nombraron a esta estructura hexagonal a base de silicio, siliceno.

El siliceno no parece existir en la naturaleza ni hay ninguna fase sólida de silicio similar al grafito. Como consecuencia, las capas de silicio 2D puras no pueden generarse por métodos de exfoliación, tal como se realiza para el caso del grafeno. Un concepto prometedor para sintetizar el siliceno, es depositar el silicio en superficies metálicas que no interactúen fuertemente con los átomos de silicio o formen compuestos [4]. A continuación estudiaremos las propiedades estructurales y electrónicas del siliceno.

1.1. Estructura del siliceno.

El siliceno es un material formado por monocapas de átomos de silicio fuertemente cohesionados distribuidos en un arreglo tipo panal de abejas. Por cada celda unitaria existe un punto de red al cual se asocian dos átomos de silicio.

En la figura 1.1 se muestra la celda unitaria del siliceno representada mediante dos subredes triangulares que contiene dos átomos de silicio formada por los sitios A (rojos) y B (azules). Tomamos estas dos subredes ya que la red tipo panal de abejas no es una red de Bravais debido a que las posiciones atómicas A y B no son equivalentes, es decir, no es posible conectarlas con un vector de red $\vec{R}_j = m_j \vec{a}_1 + n_j \vec{a}_2$ donde m_j y n_j son enteros. De

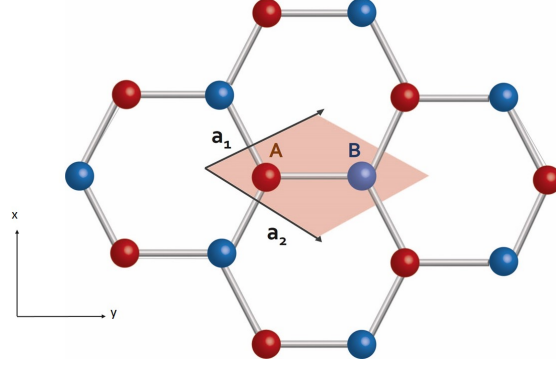


Figura 1.1: Arreglo bidimensional en el siliceno. La celda unitaria está delineada y sombreada.

esta manera, todos los átomos A forman una subred triangular, al igual que los átomos B , con un átomo por celda unitaria; al superponer la subred A con la subred B puede reconstruirse la red en cualquier punto.

Los vectores que definen la celda unitaria son: $\vec{a}_1 = a \left(\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$ y $\vec{a}_2 = a \left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$; con un parámetro de red $a \approx 3,86\text{\AA}$, el cual se define como la separación atómica entre los átomos de silicio [8].

Como se muestra en la figura 1.2 el siliceno presenta una estructura deformada donde los átomos A y B no son coplanares, es decir, en el siliceno cada una de las subredes está desplazada verticalmente respecto a la otra a una distancia aproximadamente de $\Delta Z = 0,54\text{\AA}$. Lo anterior expuesto es debido a que el silicio presenta un radio iónico grande, los orbitales de valencia s y p son propensos a formar una hibridación sp^3 y una hibridación de los orbitales $3s$, $3p_x$ y $3p_y$ para conformar tres enlaces covalentes sp^2 y así formar la red hexagonal. Como resultado, en una monocapa de átomos de silicio, la unión estará formada por una hibridación mixta de sp^2 y sp^3 [9]. Esta preferencia provoca que los átomos de silicio y por lo tanto sus enlaces, no se encuentren en el mismo plano dando origen a las corrugaciones presentes en el siliceno, siendo esta configuración la forma más estudiada en la actualidad. Tal deformación permite la apertura de una brecha (gap) sintonizable eléctricamente.

Una estructura hexagonal con orbitales σ en xy y orbitales π en z que permiten las interacciones Van der Waals entre los planos no existe en la naturaleza, por tal motivo el siliceno sólo se obtiene hasta los momentos sobre sustratos que le dan estabilidad.

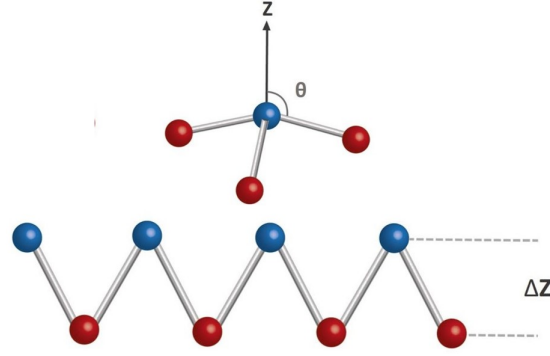


Figura 1.2: Deformación ΔZ entre los dos planos del siliceno con un ángulo θ que se define entre el enlace Si-Si y la dirección z normal al plano.

La red recíproca es también una red tipo panal de abejas, la cual se establece a partir de los vectores unitarios: $\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(1, \frac{\sqrt{3}}{3}\right)$ y $\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(-1, \frac{\sqrt{3}}{2}\right)$; que se construyen con los vectores de la red triangular de Bravais $\vec{a}_1$ y $\vec{a}_2$ usando la definición:

$$\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}, \quad (1.1)$$

donde δ_{ij} es la delta de Kronecker.

La primera zona de Brillouin representa un conjunto de puntos no equivalentes, es decir, los puntos no se pueden conectar entre sí mediante un vector de la red recíproca. En la figura 1.3 se distinguen las seis esquinas de la primera zona de Brillouin, que consiste de los puntos no equivalentes K y K' representados por el vector: $\vec{K} = \frac{1}{3}(\vec{b}_1 - \vec{b}_2) = \left(\frac{4\pi}{3a}, 0\right)$.

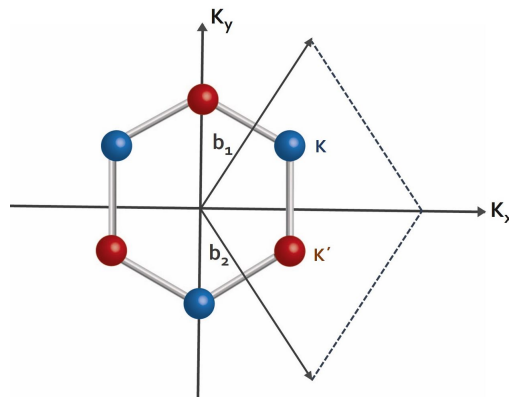


Figura 1.3: Primera zona de Brillouin.

1.2. Modelo Tight-Binding.

Uno de los métodos estándar para el cálculo de estructuras electrónicas es el modelo Tight-Binding. Este método fue originalmente propuesto por Félix Bloch, el cual usa como aproximación una base de funciones de onda localizada $\Phi(\vec{r} - \vec{R}_j)$ de los átomos que forman una red particular, descrita por los vectores de la red de Bravais $\vec{R}_j = m_j \vec{a}_1 + n_j \vec{a}_2$. Al tomar combinaciones lineales de estos vectores, podemos trasladarnos a lo largo de red, permitiendo describir la estructura de bandas a lo largo de toda la zona de Brillouin [10]. Consideremos 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:

$$\mathbf{H}_l = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_l^2 + \sum_{j=1}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j), \quad (1.2)$$

donde ∇_l^2 es el operador laplaciano en 2D, $\vec{r}_l = (x_l, y_l)$ es la posición del electrón, m es la masa del electrón y N es el número de sitios de la red. Cada ión en el sitio $\vec{R}_j$ produce un potencial electrostático, el cual siente el electrón, y su energía potencial $\sum_{j=1}^N V(\vec{r}_l - \vec{R}_j)$.

Aquí el 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, es decir:

$$\mathbf{H} = \sum_l^N \mathbf{H}_l. \quad (1.3)$$

El enfoque de este modelo se basa en la suposición de que el electrón l está unido a un ión particular en el sitio de la red $\vec{R}_l$, es decir, se describe con un estado (atómico) ligado del Hamiltoniano

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

mientras que 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 $\mathbf{H}_l^a$ es descrito por la función de onda $\Phi^{(a)}(\vec{r} - \vec{R}_j)$, y debido a la simetría traslacional de la red unitaria a lo largo de las direcciones de los vectores de la red, cualquier función de onda de la red satisface el **teorema de Bloch**, es

decir, 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:

$$\mathcal{T}_{\vec{R}_i} = e^{\frac{i}{\hbar} \vec{p} \cdot \vec{R}_i}, \quad (1.4)$$

el cual conmuta con el Hamiltoniano (1.3), $[\mathcal{T}_{\vec{R}_i}, \mathbf{H}] = 0$. Es conveniente para este caso usar $\vec{p} = \hbar \vec{k}$, con k restringido a la primera zona de Brillouin.

La función de onda de prueba puede ser escrita usando las funciones de onda $\Phi^{(a)}(\vec{r} - \vec{R}_j)$. Esto es:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_j} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_j} \Phi^{(a)}(\vec{r} - \vec{R}_j). \quad (1.5)$$

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

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

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 hemos definimos los vectores de la red $\vec{R}_m = \vec{R}_j - \vec{R}_i$.

1.2.1. Red con dos átomos por celda unitaria.

Si tenemos más de un átomo por celda unitaria en la red, la función de prueba se define como una combinación lineal de funciones de Bloch. Esto es:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = a_k \psi_{\vec{k}}^{(A)}(\vec{r}) + b_k \psi_{\vec{k}}^{(B)}(\vec{r}), \quad (1.6)$$

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

$$\psi_{\vec{k}}^{(j)}(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_l} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_l} \Phi^{(j)}(\vec{r} - \vec{R}_l), \quad (1.7)$$

donde $j = A, B$ son las etiquetas de las subredes A y B . Como las funciones $\psi_{\vec{k}}^{(j)}(\vec{r})$ satisfacen el teorema de Bloch, la suma en (1.7) es tomada solamente para orbitales Bloch.

En este sistema la ecuación de Schrödinger se escribe como:

$$\mathbf{H}|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\rangle = \epsilon_{\vec{k}}|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\rangle. \quad (1.8)$$

Multiplicando a ambos lados por $\langle\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|$ nos queda:

$$\langle\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|\mathbf{H}|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\rangle = \epsilon_{\vec{k}}\langle\psi_{\vec{k}}(\vec{r})|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\rangle,$$

la cual puede ser reescrita en la forma matricial, quedando:

$$\begin{pmatrix} a_k^* & b_k^* \end{pmatrix} \mathcal{H}_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix} = \epsilon_k \begin{pmatrix} a_k^* & b_k^* \end{pmatrix} \mathcal{S}_k \begin{pmatrix} a_k \\ b_k \end{pmatrix}, \quad (1.9)$$

donde el Hamiltoniano en forma matricial $\mathcal{H}_k$ es:

$$\mathcal{H}_k \equiv \begin{pmatrix} \psi_k^{*(A)} \mathbf{H} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(A)} \mathbf{H} \psi_k^{(B)} \\ \psi_k^{*(B)} \mathbf{H} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(B)} \mathbf{H} \psi_k^{(B)} \end{pmatrix} = \mathcal{H}_k^\dagger, \quad (1.10)$$

y la matriz de solapamiento:

$$\mathcal{S}_k \equiv \begin{pmatrix} \psi_k^{*(A)} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(A)} \psi_k^{(B)} \\ \psi_k^{*(B)} \psi_k^{(A)} & \psi_k^{*(B)} \psi_k^{(B)} \end{pmatrix} = \mathcal{S}_k^\dagger, \quad (1.11)$$

la cual representa la no ortogonalidad de las funciones de onda de prueba. Los autovalores ϵ_k de la ecuación de Schrödinger son las bandas de energía y pueden obtenerse a partir de la condición:

$$\det[\mathcal{H}_k - \epsilon_k^\lambda \mathcal{S}_k] = 0, \quad (1.12)$$

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, como es el caso de la red de panal de abejas del siliceno.

1.2.2. Bandas energéticas en el siliceno.

Una característica notable en el siliceno es su estructura de bandas, como se muestra en la figura 1.4 [11], la cual para encontrar dicha estructura se utiliza el método Tight-Binding descrito en la sección anterior.

Existen dos bandas de energía separadas en las seis esquinas de la zona de Brillouin, denotadas como la banda de conducción (E_+) y la banda de valencia (E_-). Estas bandas presentan dispersiones lineales, cruzando la energía de Fermi y formando valles en la proximidad de los puntos K_+ y K_- en la zona de Brillouin [3]. Estos puntos se corresponden con los llamados conos de Dirac, los cuales pueden ser definidos con una ecuación tipo Dirac.

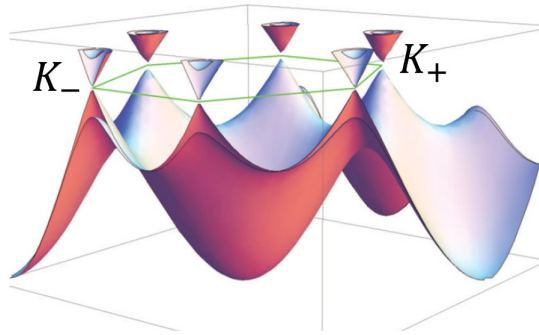


Figura 1.4: Banda de energía en el siliceno.

Capítulo 2

Acoplamiento Espín-Órbita.

2.1. Espín.

El espín del electrón fue descubierto experimentalmente por Stern y Gerlach en 1922, cuando midieron los valores posibles del momento magnético dipolar para átomos de plata enviando un haz de estos a través de un campo magnético no uniforme en la dirección z . Stern y Gerlach encontraron que el haz de átomos de plata se desdoblaba en dos componentes simétricas del haz, una componente se doblaba hacia la dirección positiva del eje z y la otra en la dirección opuesta.

En 1925 Goudsmit y Uhlenbeck, propusieron que el electrón debía tener impulso angular y momento magnético intrínsecos. En 1929 Dirac desarrolló una teoría relativista de la mecánica cuántica y haciendo uso de los postulados de la teoría de Schrödinger, pudo demostrar que el electrón posee un momento angular intrínseco caracterizado por los números cuánticos s y m_s . De la observación experimental de Phipps y Taylor quienes usaron la técnica de Stern-Gerlach pero con átomos de hidrógeno, se tiene que el haz se desdoblaba en dos componentes deflectadas simétricamente, resultando que el momento magnético de espín sólo puede tomar dos valores, los cuales son iguales en magnitud pero opuestos en signo. Se concluye entonces que $m_s = -1/2, +1/2$ y $s = 1/2$.

A este grado de libertad intrínseco se le dio el nombre de momento angular de espín. Además, se tiene que la relación entre el momento magnético dipolar de espín y el momento angular de espín $\vec{S}$ se relacionan de la misma forma que para el caso orbital. Esto es:

$$\vec{\mu}_s = -\frac{g_s \mu_b}{2\hbar} \vec{S}, \quad (2.1)$$

donde μ_b es el magnetón de Bohr y g_s es el factor giromagnético de espín.

Formalmente, el espín está representado por un operador hermítico $\vec{S}$ que se expresa como:

$$\vec{S} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}, \quad (2.2)$$

donde $\vec{\sigma}$ representa las matrices de Pauli

$$\begin{aligned} \sigma_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

las cuales cumplen con las siguientes relaciones:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\varepsilon_{ijk}\sigma_k, \quad (2.3)$$

$$\{\sigma_i, \sigma_j\} = 2i\delta_{ij}, \quad (2.4)$$

$$\sigma_i^2 = \mathbf{1}, \quad (2.5)$$

donde $[\sigma_i, \sigma_j]$ es el conmutador, $\{\sigma_i, \sigma_j\}$ es el anticonmutador e $\mathbf{1}$ es la matriz identidad en el espacio de espín.

2.2. Acoplamiento Espín-Órbita en un átomo.

La interacción espín órbita es un fenómeno de interacción magnética bien conocido que acopla el momento angular intrínseco de cada electrón con su propio momento angular orbital, es decir, los electrones cambian simultáneamente su espín y momento angular, o en general, los electrones se mueven de una función de onda orbital a otra.

Veamos como es la interacción entre el momento angular intrínseco del electrón y el campo magnético interno en un átomo monoeléctrico. Es fácil entender el origen del campo magnético interno que experimenta el electrón, si se considera el movimiento del núcleo desde el punto de vista del electrón, como se muestra en la figura 2.1 [12].

Si el núcleo cargado se mueve con una velocidad $-v$ en torno al electrón, tenemos que según la ley de Ampere, la corriente produce un campo magnético $\vec{B}$ que viene dado

por:

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{j} \times \vec{r}}{r^3} = -\frac{e\mu_0}{4\pi} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3}. \quad (2.6)$$

Recordando la ley de Coulomb, la ecuación (2.6) se puede escribir como:

$$\vec{B} = -\frac{1}{c^2} \vec{v} \times \vec{E}, \quad (2.7)$$

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

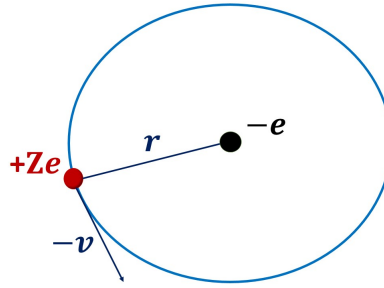


Figura 2.1: Movimiento del núcleo visto por electrón.

Luego podemos escribir el campo magnético en términos de la fuerza $\vec{F}$ y el momento angular orbital $\vec{L}$, mediante las siguientes expresiones:

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

Con estas dos expresiones (2.7) se puede escribir como:

$$\vec{B} = -\frac{1}{emc^2} \frac{1}{r} \frac{dV(r)}{dr} \vec{L}. \quad (2.8)$$

El Hamiltoniano de un átomo monoeléctrico viene dado por:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \vec{\mu}_s \cdot \vec{B}, \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{H}_0 = -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 + V(r)$. Sustituyendo la ecuación (2.1) y la ecuación (2.8), el Hamiltoniano (2.9) puede ser escrito como:

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

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

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

Al tener un campo magnético externo el Hamiltoniano puede ser escrito como:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \frac{1}{2m^2c^2} \frac{1}{r} \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{L}} + \frac{e}{2m} \vec{\mathbf{L}} \cdot \vec{\mathbf{B}} + \frac{e}{m} \vec{\mathbf{S}} \cdot \vec{\mathbf{B}}. \quad (2.11)$$

El segundo término de la ecuación (2.11) es debido a la interacción espín-órbita, el tercero es 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.

2.3. Acoplamiento Espín-Órbita en un sólido.

2.3.1. Simetrías de inversión

La forma del término de interacción espín-órbita en la ecuación (2.10) sugiere que un nivel degenerado puede ser dividido en niveles con espín paralelo y antiparalelo a la órbita. En un átomo libre, la interacción espín-órbita puede dividir la degeneración de los estados con la misma función de onda orbital espacial pero con espines opuestos. En los sólidos, sin embargo, tal división puede ser prohibida debido a la simetría cristalina, en la cual, la interacción espín-órbita tiene efectos sobre las bandas de energía $E(\vec{k})$ y el vector de onda $\vec{k}$, el cual caracteriza el comportamiento de los electrones.

Consideremos el Hamiltoniano para la interacción espín-órbita, a la cual se le agrega un potencial simétrico $V(\vec{r})$:

$$\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{4mc^2} \vec{\boldsymbol{\sigma}} \times \vec{\nabla} V(\vec{r}) \cdot \vec{\mathbf{P}} + V(\vec{r}). \quad (2.12)$$

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

$$\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{x}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) \mathcal{D}_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}), \quad (2.13)$$

en este caso se considera un sistema sin campo magnético externo, donde $\mathcal{D}_{\vec{k},\sigma}(\vec{r})$ es una función periódica y σ denota un índice de espín.

Por otra parte, para entender las propiedades de simetría en los sólidos, daremos una descripción de los elementos de las operaciones de inversión espacial y temporal. El operador de inversión temporal es $\mathcal{T} = \mathbf{U}\mathcal{T}_0$, donde $\mathcal{T}_0$ es la operación de conjugación compleja que convierte al momento $P \rightarrow -P$ y deja invariante la posición $\vec{r} \rightarrow \vec{r}$; $\mathbf{U}$ es un operador unitario de espín que conmuta con P y $\vec{r}$, pero cambia la dirección del espín $\sigma \rightarrow -\sigma$ [13].

El hamiltoniano (2.12) es invariante ante inversiones temporales por lo que conmuta con $\mathcal{T}$. Además, tenemos que (2.13) es autofunción de dicho hamiltoniano con autoestados reales E , con esto se tiene que:

$$\mathcal{T}\mathbf{H}\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = \mathbf{H}\mathcal{T}\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = E\mathcal{T}\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}). \quad (2.14)$$

Para la función de onda, el operador de inversión temporal actúa de la siguiente manera:

$$\mathcal{T}\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = \Psi_{-\vec{k},-\sigma}(\vec{r}), \quad (2.15)$$

lo que genera energías degeneradas (degeneración de Kramer):

$$E_{\sigma}(\vec{k}) = E_{-\sigma}(-\vec{k}). \quad (2.16)$$

Bajo inversiones espaciales tenemos que el operador $\mathcal{K}$, cambia $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$ y $P \rightarrow -P$, además no cambia la dirección del espín ya que $\mathcal{K}$ conmuta con σ . El hamiltoniano (2.12) es invariante bajo transformaciones de inversión espacial por lo que conmuta con el operador $\mathcal{K}$ y su autofunción cumple la siguiente relación:

$$\mathcal{K}\Psi_{\vec{k},\sigma}(\vec{r}) = \Psi_{-\vec{k},\sigma}(-\vec{r}), \quad (2.17)$$

así la energía se degenera de la siguiente manera:

$$E_{\sigma}(\vec{k}) = E_{\sigma}(-\vec{k}). \quad (2.18)$$

Por lo tanto ambas simetrías de inversión cambian el vector de onda $\vec{k} \rightarrow -\vec{k}$, y la inversión temporal cambia la dirección del espín. A partir de la combinación de las relaciones (2.16) y (2.18), queda claro que si ambos operadores están presentes, conduce a una degeneración de la energía:

$$E_{\sigma}(\vec{k}) = E_{-\sigma}(\vec{k}). \quad (2.19)$$

Esto se denomina degeneración de espín. En otras palabras, la energía no depende del espín del electrón. Si el sistema no tiene simetría de inversión entonces no habrá degeneración de espín $E_{\sigma}(\vec{k}) \neq E_{-\sigma}(\vec{k})$ y en consecuencia se obtendrá una brecha en la energía que se manifiesta con dos niveles de energía, una para cada componente de espín.

2.3.2. Interacción Espín-Órbita en dos dimensiones: acoplamiento Rashba

En los sólidos la interacción espín órbita puede ser producida por la ausencia de simetría de inversión estructural en los cristales. Este tipo de interacción se encuentra en el acoplamiento tipo Rashba. Si consideramos un sistema bidimensional, el Hamiltoniano para una partícula que se encuentra en un sistema en ausencia de simetría de inversión estructural estará dado por [14]:

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

donde $\mathbf{H}_R$ viene dado:

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

Esta es la expresión para el hamiltoniano de Rashba, originado por un efecto combinado del acoplamiento espín órbita atómico y la asimetría del potencial V externo. Si tomamos un potencial que sólo varíe a lo largo del eje z , la expresión (2.20) se puede escribir como:

$$\mathbf{H}_R = \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y), \quad (2.21)$$

donde α es la constante de Rashba que depende del gradiente del potencial aplicado. Esta ecuación describe un término tipo Zeeman que implica un campo magnético proporcional al momento lineal de los electrones. En consecuencia, cuando los electrones fluyen a lo largo del eje x , ellos experimentan un campo magnético efectivo a lo largo del eje y , llamado campo Rashba B_{Ry} , tal como se muestra en la figura 2.2 [14].

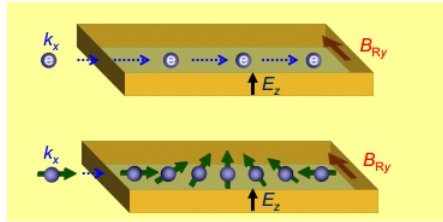


Figura 2.2: Los electrones en movimiento (k_x) con un campo eléctrico perpendicular (E_z) inducen el campo de Rashba B_{Ry} (arriba). En un sistema Rashba, los electrones de espín polarizados preceden alrededor del eje del campo Rashba (abajo).

Cuando el espín del electrón no está alineado con el campo Rashba, causa la precesión del espín de una manera que depende de la trayectoria del electrón, lo que conduce a dos

niveles de energía $E_{\sigma}(\vec{k})$ y $E_{-\sigma}(\vec{k})$. El valor de expectación del operador de espín $\langle \mathbf{S} \rangle$, nos da la dirección del espín; este valor de expectación es paralelo al campo magnético efectivo.

2.4. Acoplamiento Espín-Órbita en el siliceno.

En el siliceno hay dos tipos de interacción Espín-Órbita, de tipo intrínseco y Rashba. La interacción EO intrínseca rompe la simetría entre las subredes A y B de la estructura hexagonal del siliceno, generando una separación en la energía (gap), en la proximidad de las esquinas de la zona de Brillouin y debido a que la banda de conducción ya no hace contacto con la banda de valencia, el siliceno puede convertirse en un aislante. El término del Hamiltoniano correspondiente a esta interacción viene dada por:

$$i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}, \quad (2.22)$$

donde λ_{EO} es la constante de acoplamiento de interacción espín-órbita intrínseco, $\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger$ es el operador de creación en el sitio n de un electrón con polarización σ , $\mathbf{c}_{n+2\sigma}$ es el operador de aniquilación en el sitio $(n+2)$ de un electrón con polarización σ y $\nu_n = \pm 1$ si el hopping a segundos vecinos es horario o antihorario con respecto al eje positivo z . El parámetro λ_{EO} viene dado por:

$$\lambda_{EO} = -\frac{\Delta}{18 \sin^2 \theta (sp\sigma)^2} \xi_0^2, \quad (2.23)$$

donde ξ_0 es la fuerza de interacción atómica intrínseca, $(sp\sigma)$ es el parámetro de salto de un orbital a otro derivado del modelo Tight-Binding y Δ es la diferencia de energía entre los átomos de silicio en los sitios A y B [8].

La interacción Espín-Órbita tipo Rashba, como se mencionó anteriormente, se genera por la presencia de un campo eléctrico externo $\vec{E}$ perpendicular al plano. Sin embargo, el siliceno por presentar una geometría deformada se induce un campo eléctrico, dando origen a un acoplamiento Espín-Órbita intrínseco de Rashba. Así el Hamiltoniano de Rashba está dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_R &= \mathbf{H}_{\text{extrínseca}} + \mathbf{H}_{\text{intrínseca}} \\ &= i\lambda_{R1} \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma} - i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{h}_n)_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}, \end{aligned} \quad (2.24)$$

donde $\vec{S}$ es el vector de espín, $\hat{d}_n$, $\hat{h}_n$ son los vectores unitarios que van de la posición de un átomo a un primer vecino y segundo vecino respectivamente y $\mu_{(A,B)} = \pm 1$ para el sitio A (sitio B). Según [9] las estimaciones para los parámetros de Rashba son: $\lambda_{R1} = 10\mu eV$ y $\lambda_{R2} = 0,7meV$.

Capítulo 3

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

La función de Green es un concepto muy versátil. En el marco de la mecánica estadística, calcular cantidades mensurables como los valores de expectación es posible sólo cuando la función de partición del sistema físico en consideración es conocido. El método de las funciones de Green permite entonces, una determinación en general, de los valores esperados y las funciones de correlación sin un conocimiento explícito de la función de partición.

Para comprender el método de las funciones de Green y el método de la ecuación de movimiento es de importancia el conocimiento previo de cierta información que se dará a continuación.

3.1. Representaciones y valores medios en Mecánica Cuántica.

Introduciremos en este capítulo las representaciones de la Mecánica Cuántica que constituyen las diversas maneras de describir la evolución temporal de sistemas físicos. Comenzaremos con un ejemplo sencillo del promedio en Mecánica Cuántica [15]. Consideremos un operador $\mathbf{A}$ 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 . Supongamos que el desarrollo temporal de este sistema físico está dado en la **representación de**

Schrödinger, por lo tanto 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:

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

Algunas propiedades del operador de evolución temporal son:

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. $\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{U}(t, t'')\mathbf{U}(t'', t')$.

Aplicando la ecuación de Schrödinger en (3.2) se obtiene la siguiente ecuación de movimiento para el operador evolución temporal:

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

donde $\mathbf{H}_t$ es el Hamiltoniano que describe el sistema en estudio y el índice t indica una dependencia explícita temporal. Si seguimos el procedimiento de [7] haciendo uso de las propiedades 1 y 4, podemos escribir la forma integral del operador de evolución temporal como:

$$\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{1} - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t dt_1 \mathbf{H}_{t_1} \mathbf{U}(t_1, t'). \quad (3.3)$$

Luego de varias iteraciones la ecuación (3.3) puede escribirse como:

$$\mathbf{U}(t, t') = \mathbf{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^{t_1} dt_2 \dots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n \mathbf{H}_{t_1} \mathbf{H}_{t_2} \dots \mathbf{H}_{t_n} \quad (3.4)$$

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

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

Para más reordenamientos, se introduce el Operador Cronológico de Dyson [15], el cual ordena un producto de operadores $\mathbf{A}_1(t_1) \dots \mathbf{A}_n(t_n)$ de acuerdo a la posición de

los instantes de tiempo t_i . Dados dos operadores dependientes del tiempo $\mathbf{A}(t_1)$, $\mathbf{B}(t_2)$ definimos el producto ordenado temporalmente como:

$$\mathbf{T}_D(\mathbf{A}(t_1)\mathbf{B}(t_2)) = \Theta(t_1, t_2) \mathbf{A}(t_1)\mathbf{B}(t_2) \pm \Theta(t_2, t_1) \mathbf{B}(t_2)\mathbf{A}(t_1). \quad (3.5)$$

La última expresión se puede escribir explícitamente como:

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

El símbolo $\pm$ toma en cuenta los casos en que los operadores son considerados bosónicos o fermiónicos. 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 cuando el operador $\mathbf{T}_D$ se le aplica a n operadores, el resultado consiste de $n!$ términos, así el operador de evolución temporal se puede representar de forma compacta usando el operador $\mathbf{T}_D$ [7]:

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

Por otra parte usando la propiedad 3 del operador de evolución temporal se obtiene:

$$\langle \Psi(t) | = \langle \Psi(t') | \mathbf{U}(t', t). \quad (3.8)$$

Así (3.2) y (3.7) permiten expresar (3.1) de la siguiente forma:

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

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:

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

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. En esta representación los estados no varían el en tiempo y son elementos fijos en el sistema.

Si consideramos un sistema cerrado, la relación anterior se puede simplificar como:

$$\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t} = 0 \rightarrow \mathbf{A}(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(t - t')\right) \mathbf{A} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{H}(t - t')\right). \quad (3.11)$$

Luego el operador $\mathbf{A}(t)$ satisface la ecuación de movimiento de Heisenberg:

$$i\hbar \frac{d\mathbf{A}(t)}{dt} = [\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]. \quad (3.12)$$

La cual se obtiene usando la ecuación (3.10) y aplicando la ecuación de Schrödinger como se realizó anteriormente.

3.1.1. Matriz densidad y sistemas macroscópicos.

Para el estudio de sistemas macroscópicos, los promedios temporales en Mecánica Cuántica pueden ser reescritos en términos de la **matriz densidad** $\rho(t)$. Usando una base arbitraria $\{|\alpha\rangle\}$, el promedio temporal (3.1) puede reescribirse en la forma:

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

Se denomina matriz de densidad a:

$$\rho(t) \equiv |\Psi(t)\rangle \langle \Psi(t)|, \quad (3.13)$$

La cual satisface:

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

Notar que $\boldsymbol{\rho}^2(t) = \boldsymbol{\rho}(t)$, por lo tanto $\text{Tr}(\boldsymbol{\rho}^2(t)) = 1$.

Para un Hamiltoniano de la forma: $\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + V_t$, se cumple que:

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

donde $\boldsymbol{\rho}_D(t')$ es la matriz densidad en la representación de Dirac. Luego el promedio temporal del operador $\mathbf{A}$ se reescribe como:

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

3.1.2. Respuesta lineal.

Para introducir las funciones de Green, veamos como reacciona un sistema físico ante una perturbación externa [7]. Vamos a introducir la respuesta-lineal teórica, en donde el sistema será descrito por el siguiente Hamiltoniano:

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

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

Asumimos un campo escalar F_t que se acopla 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.

Ahora bien, 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 quiere conocer como $\langle \mathbf{A} \rangle$ reacciona a la perturbación V_t .

Sin el campo aplicado tenemos:

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

donde ρ_0 es la matriz de densidad del sistema sin campo:

$$\rho_0 = \frac{\exp(-\beta\mathcal{H}_0)}{\text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H}_0))}. \quad (3.18)$$

Promediamos sobre el conjunto gran canónico:

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

donde μ es el potencial químico. Luego, si aplicamos el campo F_t , la matriz densidad será:

$$\rho_0 \rightarrow \rho_t. \quad (3.20)$$

Esta modificación afecta al valor de espectación de $\mathbf{A}$ de la siguiente manera:

$$\langle \mathbf{A} \rangle_t = \text{Tr}(\rho_t \mathbf{A}). \quad (3.21)$$

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

$$i\hbar \frac{d\rho_t}{dt} = [\mathcal{H}_0, \rho_t]_- + [V_t, \rho_t]_-. \quad (3.22)$$

Si suponemos que el campo fue aplicado en un momento t arbitrario, podemos usar lo siguiente como condición de contorno en la ecuación (3.22):

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t = \rho_0. \quad (3.23)$$

Ahora, cambiando a la representación de Dirac en donde $t' = 0$, obtenemos:

$$\rho_t^D(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right) \rho_t \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}_0 t\right). \quad (3.24)$$

La ecuación de movimiento viene dada por:

$$\frac{d\rho_t^D(t)}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\rho_t^D(t), V_t^D(t)]_-, \quad (3.25)$$

usando la condición de contorno (3.23) y (3.25) tenemos que:

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \rho_t^D(t) = \rho_0, \quad (3.26)$$

obteniendo:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' [V_{t'}^D(t'), \rho_{t'}^D(t')]_- . \quad (3.27)$$

Iterando, esta ecuación puede ser resuelta con precisión:

$$\rho_t^D(t) = \rho_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \rho_t^{D(n)}(t), \quad (3.28)$$

$$\rho_t^{D(n)}(t) = \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 \dots \int_{-\infty}^{t_{n-1}} dt_n \left[V_{t_1}^D(t_1), \left[V_{t_2}^D(t_2), \left[\dots, [V_{t_n}^D(t_n), \rho_0]_- \dots \right]_- \right]_- \right]_- . \quad (3.29)$$

La ecuación (3.29) es exacta con infinitos términos. Si asumimos que las perturbaciones externas son suficientemente pequeñas, podemos limitarnos a los términos lineales en la perturbación V :

$$\rho_t \approx \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' \exp \left(-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t \right) [V_{t'}^D(t'), \rho_0]_- \exp \left(\frac{i}{\hbar} \mathcal{H}_0 t \right) . \quad (3.30)$$

En esta expresión ya se ha transformado la matriz densidad nuevamente a la representación de Schrödinger. Si introducimos (3.30) en (3.21) calculamos el valor de expectación perturbado:

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

Con este resultado conocemos ahora la reacción del sistema a la interacción al medir el observable $\mathbf{A}$:

$$\Delta A_t = \langle \mathbf{A} \rangle_t - \langle \mathbf{A} \rangle_0 = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' F_{t'} \langle [\mathbf{A}^D(t), \mathbf{B}^D(t')]_- \rangle_0 . \quad (3.31)$$

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 no está aplicado.

Definimos ahora una función de Green retardada como:

$$G_{AB}^{(r)}(t, t') = \langle \langle \mathbf{A}(t); \mathbf{B}(t') \rangle \rangle = -i\Theta(t - t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_- \rangle_0. \quad (3.32)$$

En esta definición los operadores siempre están escritos en la representación de Heisenberg en ausencia de interacciones. La función de Green retardada $G_{AB}^{(r)}(t, t')$ describe la reacción del sistema, tal como se presenta en el observable $\mathbf{A}$ cuando la perturbación actúa sobre el observable $\mathbf{B}$:

$$\Delta \mathbf{A}_t = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt' F_{t'} G_{AB}^{(r)}(t, t'). \quad (3.33)$$

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

$$F_t = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\omega + i0^+)t\right) F(\omega). \quad (3.34)$$

y como la función de Green depende sólo de la diferencia de tiempos $t - t'$, cuando el Hamiltoniano no es explícitamente dependiente del tiempo podemos escribir la ecuación (3.33) de la siguiente manera:

$$\Delta \mathbf{A}_t = \frac{1}{2\pi\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega F(\omega) G_{AB}^{(r)}(\omega + i0^+) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}(\omega + i0^+)t\right), \quad (3.35)$$

el término $i0^+$ en la exponencial garantiza el cumplimiento de la condición de contorno de la ecuación (3.23).

3.2. Funciones de Green.

Dado un sistema físico y un par de operadores $\mathbf{A}(t)$ y $\mathbf{B}(t')$ asociado al sistema, definimos la función de Green asociada a $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$ de la forma [15]:

$$G(t, t') \equiv -i\langle \mathbf{T}_c \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle, \quad (3.36)$$

con $\hbar = 1$. Con la definición (3.6) del operador cronológico de Dyson, el operador T_c ordena las variables en un producto de acuerdo a sus argumentos de tiempo. Así la función

de Green se escribe como:

$$G(t, t') = -i\Theta(t, t')\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t') \rangle \mp i\Theta(t', t)\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t) \rangle, \quad (3.37)$$

el símbolo $\mp$ toma en cuenta los casos en que los operadores son considerados bosónicos o fermiónicos respectivamente. Esta expresión define a $G(t, t')$ como un promedio tiempo ordenado sobre los operadores del sistema, la cual se puede separar en dos nuevas funciones de Green:

Función de Green Mayor

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

Función de Green Menor

$$G^<(t, t') \equiv \mp i\langle \mathbf{B}(t')\mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.39)$$

Así $G(t, t')$ se reescribe como:

$$G(t, t') = -i\Theta(t, t')G^>(t, t') \mp i\Theta(t', t)G^<(t, t'). \quad (3.40)$$

Para la construcción completa del formalismo de las funciones de Green requerimos definir las funciones retardada y avanzada, que se obtienen de la definición de la función de Green mayor y menor.

Función de Green Retardada.

$$G^{(r)}(t, t') = \Theta(t - t')[G^>(t, t') - G^<(t, t')] = -i\Theta(t - t')\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle. \quad (3.41)$$

Función de Green Avanzada.

$$G^{(a)}(t, t') = -\Theta(t' - t)[G^>(t, t') - G^<(t, t')] = i\Theta(t' - t)\langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle. \quad (3.42)$$

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

La función de Green describe de este modo, la reacción del sistema. Puede interpretarse como un propagador de un punto a otro o como una función respuesta.

3.2.1. Ecuaciones de movimiento.

Para el cálculo de las funciones de Green, utilizaremos el método de la ecuación de movimiento, por la cual se obtiene derivando la ecuación (3.37) respecto a los tiempos t y t' :

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

$$-i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} = \delta(t, t') \langle \mathbf{A}(t) \mathbf{B}(t') \rangle - \Theta(t, t') \left\langle \mathbf{A}(t) \frac{d\mathbf{B}(t')}{dt'} \right\rangle \mp \delta(t', t) \langle \mathbf{B}(t') \mathbf{A}(t) \rangle \mp \Theta(t', t) \left\langle \frac{d\mathbf{B}(t')}{dt'} \mathbf{A}(t) \right\rangle. \quad (3.44)$$

La evolución temporal de los operadores viene dada por:

$$\mathbf{P}(t) \equiv \exp(i\mathbf{H}t) \mathbf{P} \exp(-i\mathbf{H}t), \quad (3.45)$$

donde $\mathbf{H}$ es el Hamiltoniano. Puesto que:

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

entonces la ecuación de movimiento respecto de t se escribe como:

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

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

La ecuación de movimiento respecto de t' se escribe como:

$$-i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle + i\Theta(t, t') \langle \mathbf{A}(t) [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_{-} \rangle \pm i\Theta(t', t) \langle [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_{-} \mathbf{A}(t) \rangle. \quad (3.48)$$

$$-i \frac{\partial G(t, t')}{\partial t'} = \delta(t, t') \langle [\mathbf{A}(t), \mathbf{B}(t')]_{\mp} \rangle + i \langle \mathbf{T}_c \mathbf{A}(t) [\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]_- \rangle. \quad (3.49)$$

Del segundo término en las ecuaciones de movimiento una nueva función de Green surge, ya que el conmutador $[\mathbf{A}(t), \mathbf{H}]$ y $[\mathbf{B}(t'), \mathbf{H}]$ es en sí mismo un operador. Esta nueva función es llamada función de Green de orden superior, ya que se construye a partir de operadores de la función de Green original $G(t, t')$, obteniendo un sistema de ecuaciones de movimiento. En algunos casos esto podría conducir a una cadena infinita de ecuaciones de movimiento, en la cual es necesario que se impongan condiciones en el sistema físico para reducir el problema a un sistema de finitas ecuaciones. Así tendríamos un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden acoplado asociado a todas las funciones de Green del problema. Para resolver el sistema, cualquier método de resolución es válido pero en nuestro caso tomaremos la transformada de Fourier del sistema, es decir, representar el sistema algebraico de ecuaciones acopladas convenientemente en el espacio de frecuencias.

3.2.2. Equilibrio termodinámico.

En equilibrio termodinámico se evalúan los promedios de la forma [15]:

$$\langle \mathbf{A}_0(t) \mathbf{A}_1(t) \dots \mathbf{A}_{n-1}(t) \rangle \equiv \frac{\text{Tr}(\exp(-\beta \mathcal{H} \dots))}{\text{Tr}(\exp(-\beta \mathcal{H}))}. \quad (3.50)$$

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

Haciendo uso de la siguiente propiedad:

$$[\exp(\pm i\mathcal{H}t), \exp(-\beta \mathcal{H})] = 0, \quad (3.51)$$

se simplifica las evaluaciones de los promedios como veremos a continuación:

Las funciones $G_{AB}^{\Xi}(t, t')$, con $\Xi = >, < (a), (r)$; dependen sólo de la diferencia de sus argumentos $t - t'$, puesto que:

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

Con esto:

$$G_{AB}^{\Xi}(t, t') = G_{AB}^{\Xi}(t - t', 0) = G_{AB}^{\Xi}(0, t' - t). \quad (3.52)$$

Como consecuencia, la transformada de Fourier es diagonal en frecuencias:

$$G_{AB}^{\Xi}(t, t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega(t - t')) G_{AB}^{\Xi}(\omega). \quad (3.53)$$

Por otra parte existe una relación entre la función de Green mayor y menor. Veamos:

$$\begin{aligned} \text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H})\mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t')) &= \text{Tr}(\mathbf{B}(t')\exp(-\beta\mathcal{H})\mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H})\exp(\beta\mathcal{H})\mathbf{B}(t')\exp(-\beta\mathcal{H})\mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H})\exp(i\mathcal{H}(-i\beta))\mathbf{B}(t')\exp(-i\mathcal{H}(-i\beta))\mathbf{A}(t)) \\ &= \text{Tr}(\exp(-\beta\mathcal{H})\mathbf{B}(-i\beta)\mathbf{A}(t)). \end{aligned} \quad (3.54)$$

Usando (3.52) y (3.54) llegamos a:

$$G_{AB}^{>}(t, t') = \pm G_{AB}^{<}(t, t' - i\beta). \quad (3.55)$$

A partir de la ecuación (3.55) las transformadas de Fourier de las funciones de Green mayor y menor obedecen a la siguiente relación:

$$G_{AB}^{>}(\omega) = \pm \exp(\beta\omega) G_{AB}^{<}(\omega). \quad (3.56)$$

La transformada de Fourier $G_{AB}^{>}(\omega)$ y $G_{AB}^{<}(\omega)$ pueden determinarse a través de las transformadas de Fourier $G_{AB}^{(r)}(\omega)$ y $G_{AB}^{(a)}(\omega)$, ya que como vimos en el ejemplo de la sección anterior, los sistemas físicos mayormente son descritos por la función de Green menor. En efecto, por definición

$$G_{AB}^{(r)}(t, t') - G_{AB}^{(a)}(t, t') = G_{AB}^{>}(t, t') - G_{AB}^{<}(t, t'), \quad (3.57)$$

con la propiedad (3.56), la diferencia $G_{AB}^{>}(t, t') - G_{AB}^{<}(t, t')$ queda escrita como:

$$G_{AB}^{>}(t, t') - G_{AB}^{<}(t, t') = \pm \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \exp(-i\omega(t - t')) (\exp(\beta\omega) \mp 1) G_{AB}^{<}(\omega). \quad (3.58)$$

Como consecuencia, usando (3.57) y (3.58) se obtiene que:

$$G_{AB}^{<}(\omega) = \pm \frac{G_{AB}^{(r)}(\omega) - G_{AB}^{(a)}(\omega)}{\exp(\beta\omega) \mp 1}. \quad (3.59)$$

Si se desea por ejemplo evaluar el valor medio entre los operadores $\mathbf{A}$ y $\mathbf{B}$, de acuerdo con las condiciones descritas anteriormente, se tiene que:

$$\langle \mathbf{A}(t)\mathbf{B}(t') \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \exp(-i\omega(t-t')) \left(-\frac{1}{\pi} \right) \frac{G_{AB}^{(r)}(\omega) - G_{AB}^{(a)}(\omega)}{2i} \frac{1}{\exp(\beta\omega) \mp 1}. \quad (3.60)$$

Capítulo 4

Corrientes persistentes.

Las corrientes persistentes son corrientes de origen cuántico en sistemas microscópicos y mesoscópicos que no decaen en el tiempo y que no tienen origen en un cambio del flujo magnético aplicado. Es un efecto relacionado con la fase de Aharonov-Bohm, en el cual una partícula cargada se mueve en una geometría cerrada, como un anillo y en presencia de un flujo magnético. En esta sección estudiaremos la corriente debido a los electrones que no interactúan entre ellos, en la cual para cualquier configuración del anillo esta corriente persistente se produce debido a que el estado base para el electrón siempre es distinto de cero con momento angular distinto de cero, producto del corrimiento de los valores permitidos de energía en el anillo por la fase introducida como consecuencia del flujo magnético. Al ser el electrón una partícula cargada con momento angular se tiene una corriente asociada sobre el anillo. En principio, 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. Con este enfoque veamos como se genera una corriente persistente en un anillo para un solo electrón.

El modelo a estudiar es un anillo microscópico unidimensional sin impurezas en el que circula un electrón con masa m y carga $-e$, con condiciones de frontera periódicas para la función de onda del electrón. Al parametrizar el anillo de circunferencia L , con la coordenada u descrita en la figura 4.1, obtenemos que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, que proviene de un Hamiltoniano dado por $\mathbf{H} = \frac{\vec{\mathbf{P}}^2}{2m}$, es:

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

con la función de onda $\psi_n(u)$ sujeta a la condición de frontera:

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

Las autofunciones $\psi_n(u)$ y las autoenergías ε_n son [16]:

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

$$\varepsilon_n = \frac{h^2}{2mL^2} n^2, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (4.3)$$

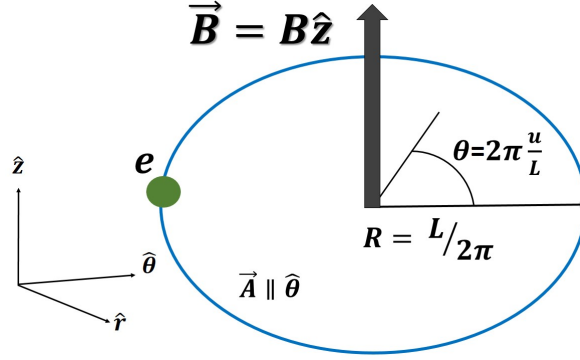


Figura 4.1: Anillo unidimensional de radio $L/2\pi$ con la partícula de carga $-e$ confinada. El campo magnético aplicado $\vec{B}$ es paralelo a la dirección $\hat{z}$.

Ahora, consideremos los efectos de la aplicación de un campo magnético uniforme y constante $\vec{B}$ paralelo al eje $\hat{z}$ en el sistema, el cual está confinado de tal manera que no interactúa directamente con el anillo, sin embargo el vector potencial asociado al sistema sí.

En presencia de un campo magnético, el momento canónico para una partícula de carga $-e$ y masa m se convierte en $\vec{P}_{can} = \vec{P}_{mec} - e\vec{A}$, donde $\vec{P}_{mec} = m\vec{v}$ es el momento mecánico de la partícula con velocidad $\vec{v}$ y $\vec{A}$ es el vector potencial del campo magnético satisfaciendo que $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$. Luego el Hamiltoniano queda como

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

Para $\vec{B} = B\hat{z}$ y definiendo coordenadas cilíndricas (r, θ) podemos definir $\vec{A} = \frac{\phi}{L}\hat{\theta}$, 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 y por lo tanto la derivada $\frac{d}{du}$, que es tangente al anillo, es siempre paralela a $\hat{\theta}$. De esta manera, la ecuación de Schrödinger parametrizada por u queda escrita como:

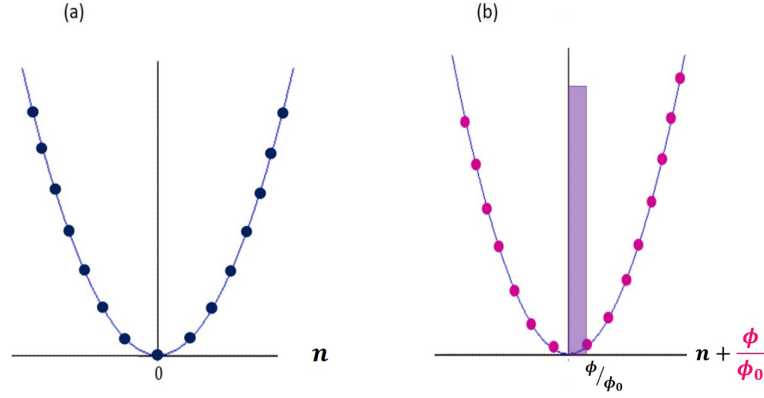


Figura 4.2: (a) Gráfica de energía en función de n en ausencia de campo magnético. (b) Gráfica de energía en función de n al aplicar un campo magnético.

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

Las autofunciones vienen dadas nuevamente por la ecuación (4.2) con autoenergías dadas por [16]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &= \frac{1}{2m} \left(\frac{2\pi\hbar}{L} n + e\frac{\phi}{L} \right)^2 \\ &= \frac{h^2}{2mL^2} \left(n + \frac{\phi}{\phi_0} \right)^2, \end{aligned} \quad (4.5)$$

con $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ y $\phi_0 = \frac{h}{e}$ es el cuanto de flujo magnético.

Si graficamos las energías en función de n en ausencia de campo magnético, obtenemos la forma del espectro proveniente de un Hamiltoniano cuadrático, en donde los puntos azules son los valores permitidos de energía en el anillo. Pero al aplicar un campo magnético, se observa en la ecuación (4.5) que para $n = 0$ la energía es distinta de cero, en donde el flujo magnético que no actúa sobre los electrones que viajan produce un corrimiento de los valores permitidos del electrón (fase de Aharonov-Bohm), como consecuencia se tendrá un momento angular distinto de cero asociado a una energía cinética, originando un movimiento perpetuo del electrón en el anillo como se observa en la figura 4.2(b), dando lugar así a una corriente persistente.

4.1. Corrientes persistentes de carga.

El electrón tiene una carga asociada $-e$, si además las cargas poseen una velocidad, su movimiento dará lugar a una corriente de carga. Por ejemplo, si tenemos dos corrientes de carga donde las cargas con espines opuestos viajan en una sola dirección como se ilustra en la figura 4.3, al sumarlas, se producirá una corriente de carga pura que no presentará transporte neto de espín.

Veamos ahora como es la corriente asociada con cada autoestado, para luego calcular la corriente persistente de carga.

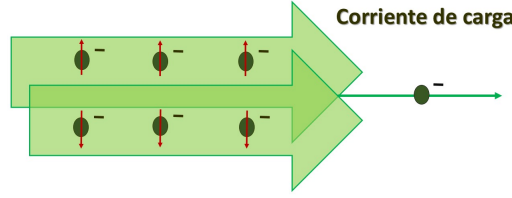


Figura 4.3: Corriente de carga pura.

Consideremos el modelo propuesto anteriormente, en donde el electrón con carga $-e$ se mueve a una velocidad v a lo largo del anillo y recorre una trayectoria en el tiempo $\Delta t = L/v$, entonces la corriente media es $i = -e/\Delta t = -ev/L$. Si la velocidad de una partícula cargada en un campo magnético se puede escribir como $v = \mathbf{P}_{mec}/m = (\mathbf{P}_{can} + eA)/m$, entonces la velocidad v_n asociada con el n -ésimo estado como se da en la ecuación (4.2) satisface [16, 17]:

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

y así obtenemos la corriente:

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

Observamos que, en términos de la energía ε_n dada en la ecuación (4.5) la corriente a temperatura cero, se puede escribir como [16, 18, 17]:

$$i_n = -\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial \phi}. \quad (4.8)$$

Con esta información podemos describir los estados de un solo electrón en el anillo.

Para el caso de un anillo con varios electrones que no interactúan entre ellos, tenemos que la corriente total I a una temperatura T es:

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

donde sumamos todas las contribuciones de cada nivel con la función de distribución de Fermi-Dirac $f(\varepsilon, \mu, T)$ y $\Omega = -K_B T \sum_n \left(\ln \left(1 + \exp \left(\frac{(\mu - \varepsilon_n)}{K_B T} \right) \right) \right)$ es el potencial termodinámico gran canónico. Suponemos que la temperatura está muy por debajo de la temperatura de Fermi, de manera que $\mu \approx \varepsilon_F$, donde ε_F es la energía de Fermi. 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.

Luego la corriente persistente de carga neta generada por un electrón moviéndose a lo largo de un anillo viene dado por [19]:

$$I_c(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} \vec{J}_c(E) dE, \quad (4.10)$$

donde $\vec{J}_c$ es la densidad de corriente de carga en general.

4.1.1. Corrientes persistentes de carga para un anillo de siliceno con interacción Espín - Órbita tipo intrínseco y Rashba.

En esta sección queremos obtener las corrientes persistentes de carga en un anillo unidimensional basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita tipo intrínseco y Rashba, atravesado por un flujo magnético de forma perpendicular al plano del anillo. Para ello, como se ilustra en la figura 4.4, el anillo está compuesto por cuatro átomos de silicio,

espaciados por el parámetro de red $a = 3,86\text{\AA}$ con un ángulo de separación entre los átomos de $\theta = \pi/2$.

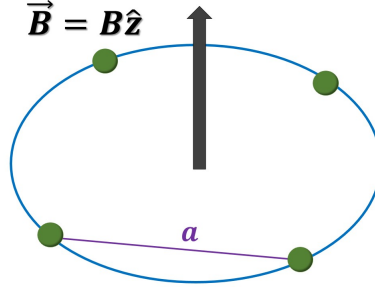


Figura 4.4: Anillo unidimensional con cuatro átomos de silicio.

En términos del operador de velocidad $\vec{v}$, la densidad de corriente de carga está dada por:

$$\vec{J}_c = \frac{e}{N} \vec{v} = \frac{ie}{\hbar N} [\mathbf{H}, \mathbf{x}], \quad (4.11)$$

donde $\mathbf{H}$ es el hamiltoniano del siliceno con interacción Espín-Órbita, dado por:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & \underbrace{t_0 \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}}_A + \underbrace{t \sum_n (e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} + h.c.)}_B + \underbrace{i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}}_C + \\ & + \underbrace{i\lambda_{R1} \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}}_D - \underbrace{i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{h}_n)_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}}_E. \end{aligned} \quad (4.12)$$

y $\mathbf{x}$ es el operador posición, dado por:

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

Ahora calcularemos el conmutador $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$. El primer y segundo término de la ecuación (4.12) corresponden a la parte libre con campo magnético. El término $A = t_0 \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}$ es la energía de sitio ¹, donde $\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger$ es el operador de creación en el sitio n y $\mathbf{c}_{n\sigma}$ es el operador de aniquilación sobre el sitio n , ambos con polarización σ . Luego el conmutador con el operador posición $\mathbf{x}$ da como resultado:

$$[A, \mathbf{x}] = 0.$$

El término $B = t \sum_n (e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} + h.c.)$ es el término habitual de energía cinética a

¹Ver apéndice A, ecuación A.1

lo largo de los enlaces de la red de siliceno, es decir, salto a primeros vecinos, donde t es el parámetro de salto entre sitios (el modelo Tight-Binding asume que un electrón puede saltar a sus vecinos mas cercanos si no están ocupados por un electrón con el mismo espín), $\mathbf{c}_{n+1\sigma}$ es el operador de aniquilación en el sitio $(n+1)$ y ϕ es la fase debida al flujo de campo magnético. Luego el conmutador con el operador posición $\mathbf{x}$ queda:

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

El término $C = i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}$ es el término de acoplamiento Espín-Órbita tipo intrínseco del siliceno ^{2 3}, donde λ_{EO} es la constante de acoplamiento, $\mathbf{S}_z$ es la matriz de espín en la base de z y $\mathbf{c}_{n+2\sigma}$ es el operador de aniquilación a segundos vecinos en el sitio $(n+2)$; el conmutador con el operador posición queda:

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

donde $\sigma = \pm 1$, $\sigma = 1$ simboliza $\uparrow$ (espín para arriba) y $\sigma = -1$ simboliza $\downarrow$ (espín para abajo).

El término $D = i\lambda_{R1} \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma}$ corresponde al acoplamiento EO extrínseco de Rashba, siendo λ_{R1} la magnitud de acople y $\vec{\mathbf{S}} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\sigma}$ el vector de espín ⁴; el conmutador con el operador posición viene dado por:

$$[D, \mathbf{x}] = -\frac{i}{2}\lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right).$$

donde θ es el ángulo que hay entre un sitio del anillo y su primer vecino, como se muestra en la figura 4.5.

El término $E = -i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{h}_n)_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}$ corresponde al acoplamiento EO intrínseco de Rashba ⁵, donde λ_{R2} es la magnitud de acoplamiento. Luego el conmutador con el operador posición es:

²Ver apéndice A, ecuación (A.3)

³Ver apéndice A, ecuación (A.4)

⁴Ver apéndice A, sección A.2.2

⁵Ver apéndice A, sección A.2.3

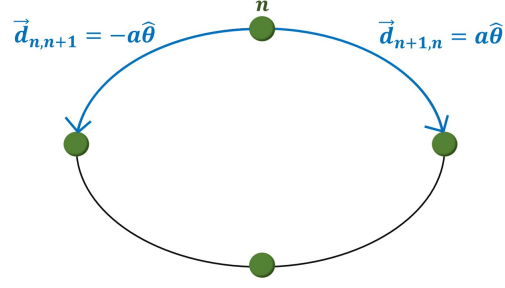


Figura 4.5: Vectores a primeros vecinos.

$$[E, \mathbf{x}] = i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right).$$

donde θ es el ángulo que hay entre un sitio del anillo y su segundo vecino, como se muestra en la figura 4.6.

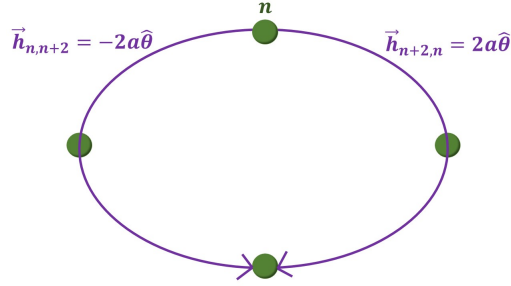


Figura 4.6: Vectores a segundos vecinos.

Finalmente el conmutador $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$ viene dado por:

$$\begin{aligned} [\mathbf{H}, \mathbf{x}] = & t \sum_n \left(e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} - e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma} \right) + i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma} + \\ & - \frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right) + \\ & + i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right). \end{aligned} \quad (4.14)$$

Para obtener el valor medio de la densidad de corriente de carga se calcula el valor medio de la ecuación (4.14); para ello definimos las funciones de Green respectivas para

cada par de operadores ⁶:

$$\begin{aligned}
J_c = \frac{ie}{N} \sum_n \left[t \left(e^{i\phi} G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) \right) + i\lambda_{EO} \nu_n \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) + \right. \\
\left. - \frac{i}{2} \lambda_{R1} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) \right) + \right. \\
\left. + i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{n+2(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+2\sigma}^<(0) \right) \right]. \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Luego procedemos a aplicar la ecuación de movimiento para obtener el valor de las funciones de Green de la ecuación (4.15) ⁷:

$$i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma, n\sigma}(t)}{dt} = \sum_n \left(\delta(t, 0) \langle \{ \mathbf{c}_{n+1\sigma}, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \} \rangle - i \langle T_c [\mathbf{c}_{n+1\sigma}, \mathbf{H}] \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \right), \quad (4.16)$$

donde $\{ \mathbf{c}_{n+1\sigma}, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \} = 0$ quedando:

$$\begin{aligned}
i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma, n\sigma}(t)}{dt} = & -it_0 \sum_n \langle T_c \mathbf{c}_{n+1\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - it \sum_n e^{i\phi} \langle T_c \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle + \\
& -it \sum_n e^{-i\phi} \langle T_c \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle + \\
& -i(i) \frac{\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \sigma \langle T_c \mathbf{c}_{n+3\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle + \\
& -i(i) \frac{\lambda_{R1}}{2} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - \langle T_c \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \right) + \\
& -i(i) \frac{\lambda_{R2}}{2} \sum_{A,B} \mu_{(A,B)} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\langle T_c \mathbf{c}_{n+3(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle - \langle T_c \mathbf{c}_{n-1(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle \right).
\end{aligned}$$

De la expresión anterior se pueden definir las siguientes funciones de Green para los valores medios:

$$\begin{aligned}
G_{n+1\sigma, n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+1\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+2\sigma, n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+2\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n\sigma, n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+3\sigma, n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+3\sigma}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n(-\sigma), n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+2(-\sigma), n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n+3(-\sigma), n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n+3(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle; \\
G_{n-1(-\sigma), n\sigma}(t) & \equiv -i \langle T_c \mathbf{c}_{n-1(-\sigma)}(t) \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \rangle;
\end{aligned}$$

⁶Ver apéndice A, sección A.3

⁷ $\hbar \equiv 1$

Así la ecuación de movimiento queda expresada como:

$$\begin{aligned}
i \sum_n \frac{dG_{n+1\sigma,n\sigma}(t)}{dt} = & t_0 \sum_n G_{n+1\sigma,n\sigma}(t) + t \sum_n (e^{i\phi} G_{n+2\sigma,n\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{n\sigma,n\sigma}(t)) + \\
& + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \sigma G_{n+3\sigma,n\sigma}(t) + \\
& + \frac{i\lambda_{R1}}{2} \sum_n e^{-i\sigma\theta} (G_{n(-\sigma),n\sigma}(t) - G_{n+2(-\sigma),n\sigma}(t)) + \\
& + \frac{i\lambda_{R2}}{2} \sum_{A,B} \mu_{(A,B)} \sum_n e^{-i\sigma\theta} (G_{n+3(-\sigma),n\sigma}(t) - G_{n-1(-\sigma),n\sigma}(t)).
\end{aligned}$$

Luego de realizar este procedimiento para cada función de Green, obtenemos una expresión general para la ecuación de movimiento:

$$\begin{aligned}
i \sum_n \frac{dG_{n+N(\zeta\sigma),n\sigma}(t)}{dt} = & \delta(t,0)\delta_{n+N(\zeta\sigma),n\sigma} + t_0 \sum_n G_{n+N(\zeta\sigma),n\sigma}(t) + t \sum_n (e^{i\phi} G_{n+N+1(\zeta\sigma),n\sigma}(t) \\
& + e^{-i\phi} G_{n+N-1(\zeta\sigma),n\sigma}(t)) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \zeta \sigma G_{n+N+2(\zeta\sigma),n\sigma}(t) + \\
& + \frac{i\lambda_{R1}}{2} \sum_n e^{-i\zeta\sigma\theta} (G_{n+N-1(-\zeta\sigma),n\sigma}(t) - G_{n+N+1(-\zeta\sigma),n\sigma}(t)) + \\
& + \frac{i\lambda_{R2}}{2} \sum_{A,B} \mu_{(A,B)} \sum_n e^{-i\zeta\sigma\theta} (G_{n+N+2(-\zeta\sigma),n\sigma}(t) - G_{n+N-2(-\zeta\sigma),n\sigma}(t)),
\end{aligned}$$

con $\zeta = \pm 1$.

Densidad de corriente de carga para un sistema de cuatro sitios.

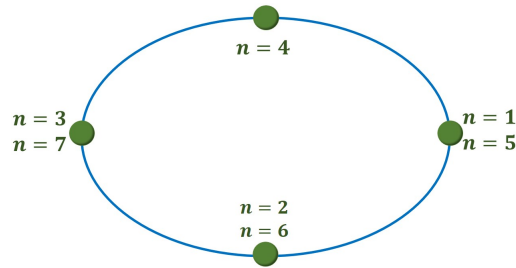


Figura 4.7: Conteo de sitios en el anillo.

Para obtener la densidad de corriente de carga vemos que en la figura 4.7 al tener cuatro sitios el número de funciones de Green se cuenta desde $n = 1$ hasta $n = 4$, como

podemos observar en la ecuación (4.17):

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^4 G_{n+1\sigma,n\sigma}^{\leq}(0) &= G_{2\sigma,\sigma}^{\leq}(0) + G_{3\sigma,2\sigma}^{\leq}(0) + G_{4\sigma,3\sigma}^{\leq}(0) + G_{\sigma,4\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n\sigma,n+1\sigma}^{\leq}(0) &= G_{\sigma,2\sigma}^{\leq}(0) + G_{2\sigma,3\sigma}^{\leq}(0) + G_{3\sigma,4\sigma}^{\leq}(0) + G_{4\sigma,\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n+2\sigma,n\sigma}^{\leq}(0) &= G_{3\sigma,\sigma}^{\leq}(0) + G_{4\sigma,2\sigma}^{\leq}(0) + G_{\sigma,3\sigma}^{\leq}(0) + G_{2\sigma,4\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n+1(-\sigma),n\sigma}^{\leq}(0) &= G_{2(-\sigma),\sigma}^{\leq}(0) + G_{3(-\sigma),2\sigma}^{\leq}(0) + G_{4(-\sigma),3\sigma}^{\leq}(0) + G_{-\sigma,4\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n(-\sigma),n+1\sigma}^{\leq}(0) &= G_{-\sigma,2\sigma}^{\leq}(0) + G_{2(-\sigma),3\sigma}^{\leq}(0) + G_{3(-\sigma),4\sigma}^{\leq}(0) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n+2(-\sigma),n\sigma}^{\leq}(0) &= G_{3(-\sigma),\sigma}^{\leq}(0) + G_{4(-\sigma),2\sigma}^{\leq}(0) + G_{(-\sigma),3\sigma}^{\leq}(0) + G_{-2(\sigma),4\sigma}^{\leq}(0), \\
\sum_{n=1}^4 G_{n(-\sigma),n+2\sigma}^{\leq}(0) &= G_{3(-\sigma),\sigma}^{\leq}(0) + G_{4(-\sigma),2\sigma}^{\leq}(0) + G_{(-\sigma),3\sigma}^{\leq}(0) + G_{-2(\sigma),4\sigma}^{\leq}(0).
\end{aligned} \tag{4.17}$$

Cada función de Green generará un sistema de ecuaciones. Para la primera función de Green tenemos el siguiente sistema:

$$\begin{aligned}
i \frac{dG_{2\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{2\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4\sigma,\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{-\sigma,\sigma}(t) - G_{3(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= \delta(t, 0) + t_0 G_{\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(t) \right) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3\sigma,\sigma}(t) + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{4(-\sigma),\sigma}(t) - G_{2(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{3\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{3\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{\sigma,\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{2(-\sigma),\sigma}(t) - G_{4(-\sigma),\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{4\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{4\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{\sigma,\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(t) \right) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2\sigma,\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \left(G_{3(-\sigma),\sigma}(t) - G_{-\sigma,\sigma}(t) \right) \\
i \frac{dG_{-\sigma,\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{-\sigma,\sigma}(t) + t \left(e^{i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(t) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{i\sigma\theta} \left(G_{4\sigma,\sigma}(t) - G_{2\sigma,\sigma}(t) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
i \frac{dG_{2(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{2(-\sigma),\sigma}(t) + t (e^{i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(t)) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4(-\sigma),\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{i\sigma\theta} (G_{\sigma,\sigma}(t) - G_{3\sigma,\sigma}(t)) \\
i \frac{dG_{3(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{3(-\sigma),\sigma}(t) + t (e^{i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(t)) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{-\sigma,\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{i\sigma\theta} (G_{2\sigma,\sigma}(t) - G_{4\sigma,\sigma}(t)) \\
i \frac{dG_{4(-\sigma),\sigma}(t)}{dt} &= t_0 G_{4(-\sigma),\sigma}(t) + t (e^{i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(t) + e^{-i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(t)) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2(-\sigma),\sigma}(t) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{i\sigma\theta} (G_{3\sigma,\sigma}(t) - G_{\sigma,\sigma}(t))
\end{aligned}$$

en donde podemos notar que $G_{n+1(\zeta\sigma),\sigma}(t) = G_{n+5(\zeta\sigma),\sigma}(t)$ debido a la condición periódica del anillo, cerrando así el sistema de ecuaciones que proviene de las ecuaciones de movimiento. También observamos en este sistema que aparece al menos una función de Green generada por cada una de las sumas sobre n de la densidad de corriente de carga (4.15), de esta manera podemos reducir el sistema de ecuaciones a cuatro sistemas.

Para resolver los sistemas de ecuaciones resultantes se realizaron las transformadas de Fourier correspondientes a cada función de Green. Para el primer sistema obtenemos lo siguiente:

$$\begin{aligned}
-\omega G_{2\sigma,\sigma}(\omega) &= t_0 G_{2\sigma,\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{\sigma,\sigma}(\omega)) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4\sigma,\sigma}(\omega) + \\
&\quad + \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{-\sigma,\sigma}(\omega) - G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{\sigma,\sigma}(\omega) &= e^{2\pi i \omega t} + t_0 G_{\sigma,\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(\omega)) + \\
&\quad + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3\sigma,\sigma}(\omega) + \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega) - G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{3\sigma,\sigma}(\omega) &= t_0 G_{3\sigma,\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{4\sigma,\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{2\sigma,\sigma}(\omega)) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{\sigma,\sigma}(\omega) + \\
&\quad + \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) - G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{4\sigma,\sigma}(\omega) &= t_0 G_{4\sigma,\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{\sigma,\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{3\sigma,\sigma}(\omega)) + \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2\sigma,\sigma}(\omega) + \\
&\quad + \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) - G_{-\sigma,\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{-\sigma,\sigma}(\omega) &= t_0 G_{-\sigma,\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega)) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) + \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{4\sigma,\sigma}(\omega) - G_{2\sigma,\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) &= t_0 G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) + t (e^{i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(\omega)) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega) + \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{\sigma,\sigma}(\omega) - G_{3\sigma,\sigma}(\omega))
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\omega G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) &= t_0 G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) + t \left(e^{i\phi} G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{-\sigma,\sigma}(\omega) + \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{2\sigma,\sigma}(\omega) - G_{4\sigma,\sigma}(\omega)) \\
-\omega G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega) &= t_0 G_{4(-\sigma),\sigma}(\omega) + t \left(e^{i\phi} G_{-\sigma,\sigma}(\omega) + e^{-i\phi} G_{3(-\sigma),\sigma}(\omega) \right) - \frac{i\lambda_{EO}}{2} \nu_n \sigma G_{2(-\sigma),\sigma}(\omega) + \\
&\quad - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma (G_{3\sigma,\sigma}(\omega) - G_{\sigma,\sigma}(\omega))
\end{aligned}$$

con $\theta = \frac{\pi}{2}$.

Luego al realizar las transformadas de Fourier de los sistemas restantes se procedió a resolver los cuatro sistemas de ecuaciones usando *Mathematica* y notamos que todas las funciones de Green generadas en cada sumatoria son la misma función. Esto es:

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

por lo que usaremos un sólo sistema de ecuaciones:

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

Algo importante a considerar es que para la definición de la densidad de corriente trabajaremos en el espacio de Fourier, y así realizar una integración numérica de la densidad de corriente respecto a la frecuencia siendo esta proporcional a la energía, para luego obtener las gráficas de la corriente para valores por debajo y valores cercanos a la energía de Fermi.

Finalmente sustituyendo lo anterior en la expresión (4.15), la densidad de corriente de carga se reduce a:

$$J_c = 4\tau i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) + i\lambda_{EO}\nu_n \sigma G_{3\sigma,\sigma}^<(\omega) + \right. \\ \left. - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma \left(G_{2(-\sigma),\sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^<(\omega) \right) + 2\lambda_{R2}\xi \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}^<(\omega) \right], \quad (4.18)$$

donde $\tau = e/N$, $\xi = \sum_{A,B} \mu_{(A,B)}$ y $G_{\mathcal{C},\mathcal{D}}^<(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} (2i\text{Im}(G_{\mathcal{C},\mathcal{D}}(\omega)))$.

4.1.2. Resultados de las corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno sin acoplamiento Espín-Órbita.

En este caso tenemos que la densidad de corriente de carga (4.18) es:

$$J_c = 4\tau i t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right). \quad (4.19)$$

Se resolvió el sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier usando *Mathematica*. Luego sustituyendo los valores obtenidos de cada función de Green en (4.19) obtenemos:

$$J_c = \frac{4\pi t}{e^{\beta\omega} + 1} \left[2 \cos \phi \left(\delta(\omega + 2t \text{sen} \phi) - \delta(\omega - 2t \text{sen} \phi) \right) + \right. \\ \left. - 2 \text{sen} \phi \left(\delta(\omega + 2t \cos \phi) - \delta(\omega - 2t \cos \phi) \right) \right], \quad (4.20)$$

con $\tau = 1$.

En la gráfica 4.8 tenemos la densidad de corriente de carga con $t = 1$, en donde podemos observar que la densidad de corriente se atenúa al aumentar la temperatura, con picos que se corresponden con puntos en el espectro de energía donde la derivada no es continua. Al realizar una integración numérica de la densidad de corriente de carga obtenemos la corriente. En la gráfica 4.9 la corriente se atenúa, al igual que en la densidad de corriente, con cambios abruptos de signo y con una pendiente más "suave" que se asimila a unos dientes de sierra. Podemos observar que al aumentar la temperatura como $K_B T = 0, 1$ los picos de la corriente se suavizan, disminuyendo la amplitud de la corriente. Si aumentamos aún más la temperatura notamos que la amplitud disminuye y la pendiente regresa a la forma de dientes de sierra.

Para este caso la densidad de corriente y la corriente de carga tienen el mismo comportamiento de un anillo de grafeno con cuatro sitios sin acoplamiento EO.

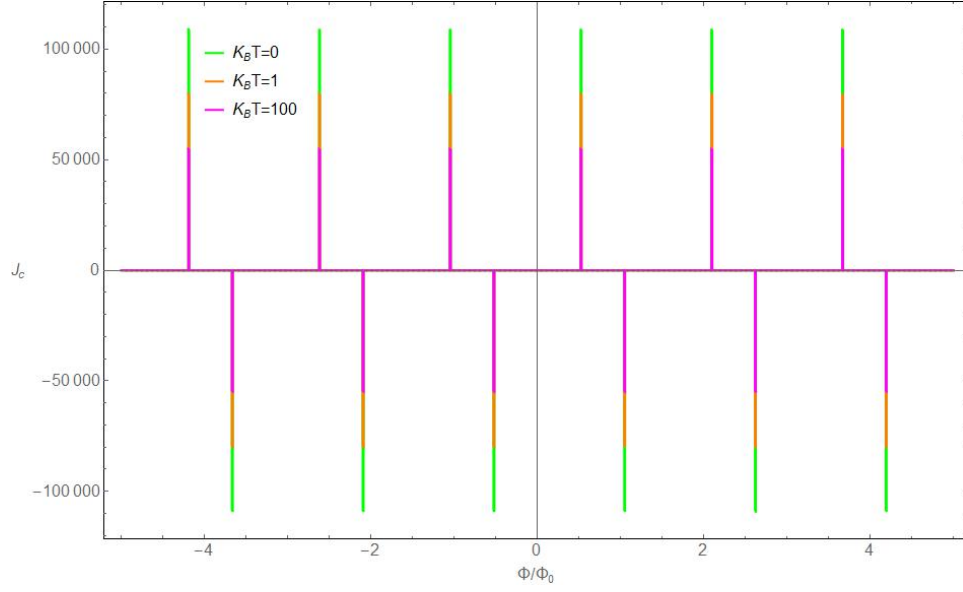


Figura 4.8: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con $t = 1$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

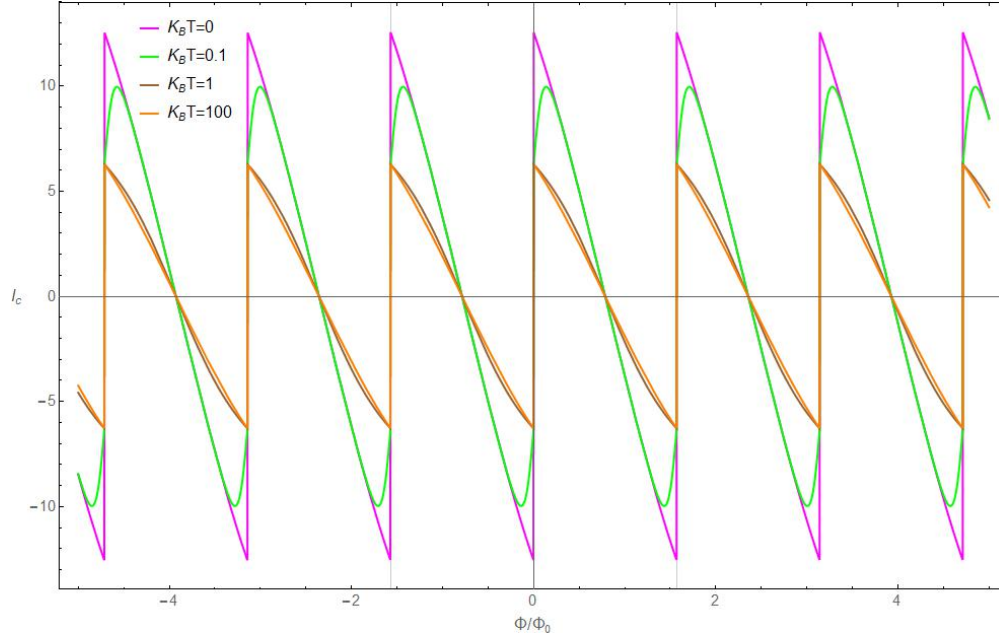


Figura 4.9: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.1.3. Resultados de las corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.

La densidad de corriente de carga (4.18) cuando sólo se tiene interacción EO tipo intrínseco se reduce a:

$$J_c = 4\pi i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) + i\lambda_{EO}\nu_n\sigma G_{3\sigma,\sigma}^<(\omega) \right]. \quad (4.21)$$

Se resolvió el sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier usando *Mathematica*. Luego sustituyendo los valores obtenidos de cada función de Green en (4.21) obtenemos:

$$J_c = \frac{8t^2 \sin 2\phi (\omega^2 - \lambda_{EO}^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}{(e^{\beta\omega} + 1) \left(4\lambda_{EO}^2 \omega^2 + (\lambda_{EO}^2 - \omega^2 + 2t^2(1 - \cos 2\phi))^2 \right)}, \quad (4.22)$$

con $\tau = 1$ y $\nu_n = 1$.

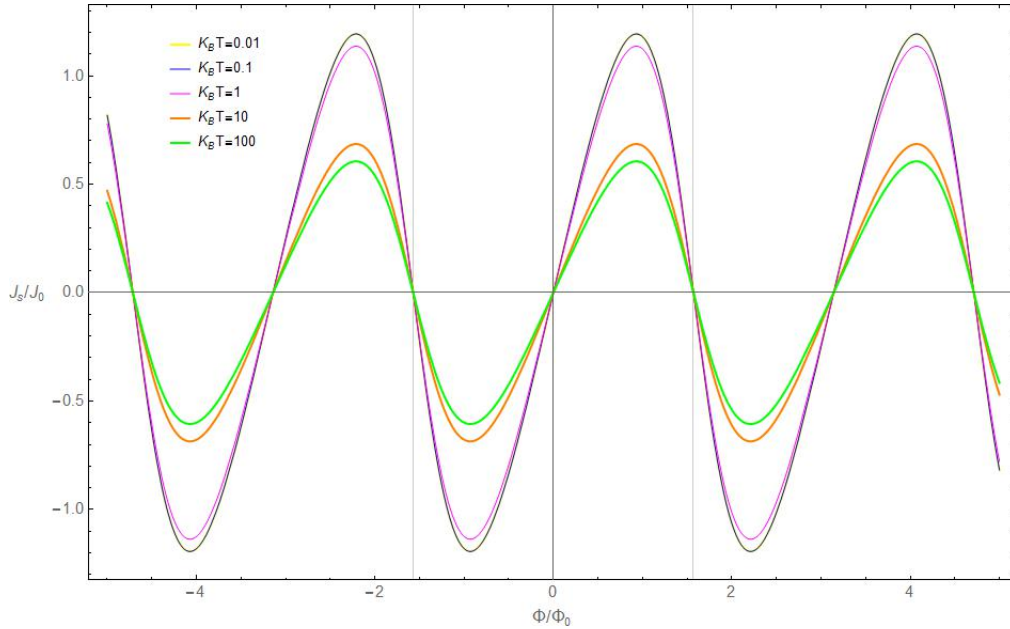


Figura 4.10: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Al observar la expresión (4.22) notamos que no posee términos de polarización de espín, debido a que la interacción intrínseca es diagonal en el espacio de espín y no desdobra la energía para valores de espín. Por lo tanto, se obtiene la misma densidad de

corriente y por ende la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín.

Como se observa en la gráfica de la figura 4.10 la densidad de corriente oscila con el flujo, aumentos pequeños en la temperatura no afectan la densidad. Para temperaturas muy altas como $K_B T = 100$ la amplitud de la densidad se degrada aproximadamente la mitad, con picos asimétricos cercanos a valores enteros del flujo magnético. En estos puntos el cambio de la derivada de la energía es menos suave, en comparación al caso sin acoplamiento EO que presenta una discontinuidad en el espectro de energía, donde se evidencia el comportamiento típico de un anillo de grafeno en estos puntos. Alrededor de cero y valores semi-enteros del flujo magnético la degradación es menor, debido a que los niveles que contribuyen a la corriente son más profundos en la banda de valencia, protegiéndolos contra cambios de temperatura. Esto es consistente con la apertura de una brecha, donde el nivel de Fermi no alcanza niveles muy profundos que afecten la corriente.

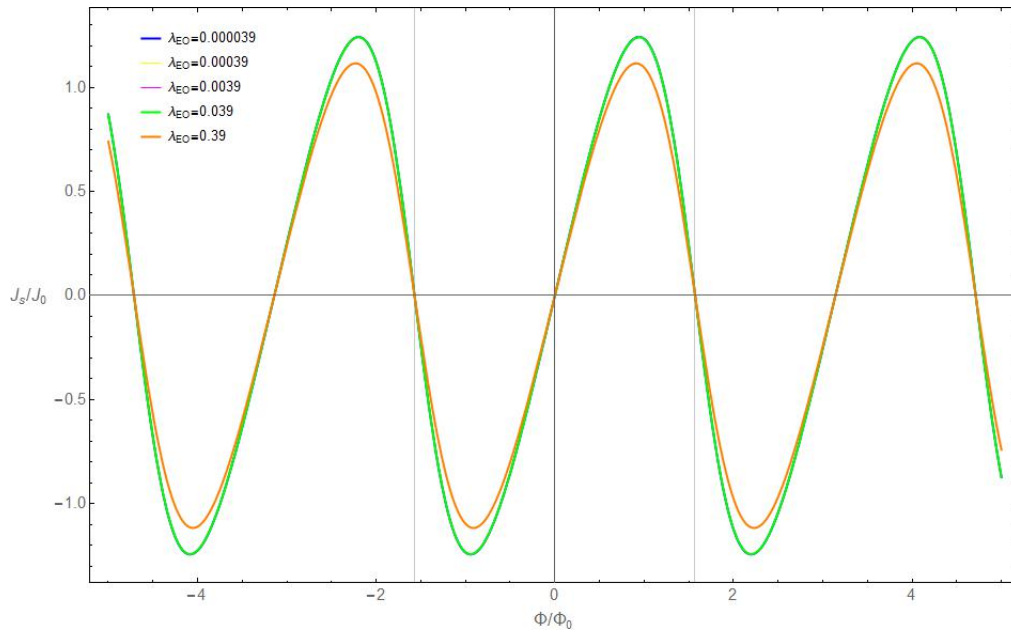


Figura 4.11: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno con acoplamiento EO tipo intrínseco variable en función del flujo magnético a temperatura $K_B T = 0$.

En la gráfica de la figura 4.11 podemos apreciar que al aumentar el parámetro de acoplamiento EO de $\lambda_{EO} = 0,039$ a $\lambda_{EO} = 0,39$ la corriente disminuye, debido a que se ensancha la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción, produciendo que los electrones en niveles poco profundos necesiten más energía para ascender a la banda de

conducción. Para el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios en presencia de acoplamiento EO intrínseco obtenemos también una degradación de la corriente, ya que un valor alto del parámetro de acoplamiento EO ensancha la brecha entre la banda de valencia y la banda de conducción, protegiendo la corriente contra cambios en la temperatura. Por otra parte, podemos apreciar que los picos son más simétricos al aumentar el parámetro de acoplamiento y la forma de la densidad de corriente es similar al comportamiento de oscilaciones típicas de un semiconductor. Esto demuestra que el espectro de energía pasa a tomar una forma parabólica.

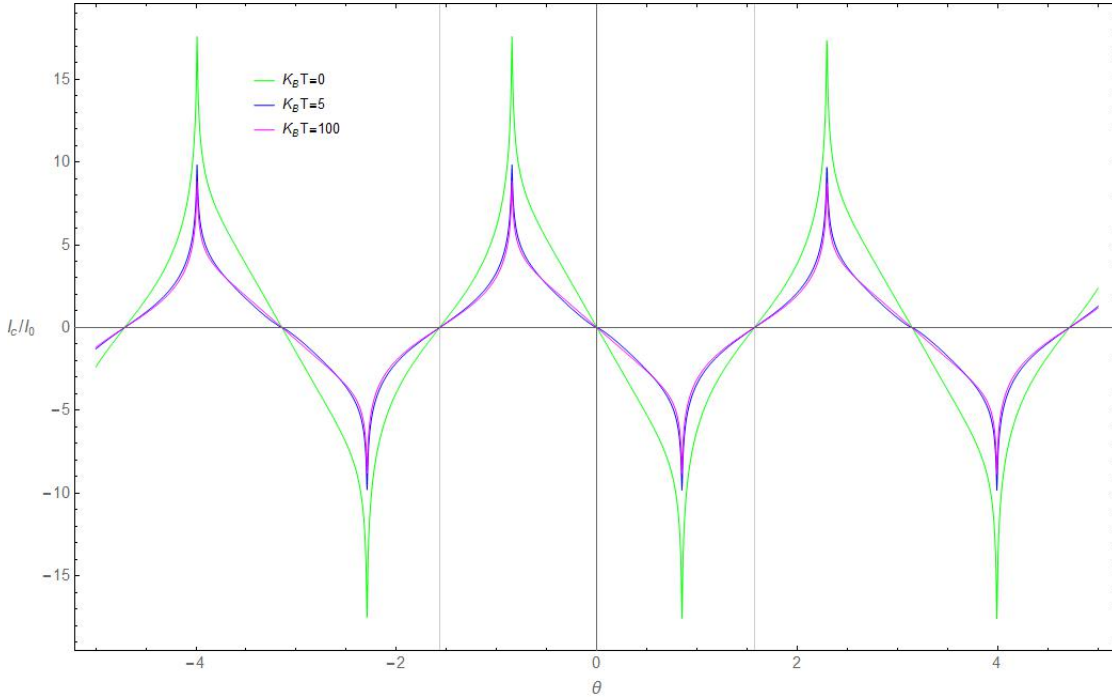


Figura 4.12: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Para obtener la corriente de carga realizamos la integración numérica de la densidad de corriente para valores por debajo de la energía de Fermi, como observamos en la gráfica de la figura 4.12. La corriente de carga muestra la degradación en temperatura esperada, los valores en temperatura deben ser muy altos para obtener una degradación relevante, comportamiento observado también en la densidad de corriente. También se puede apreciar que los valores máximos de corriente se obtienen para valores cercanos a valores impares del flujo magnético. En estos puntos la corriente toma electrones de los niveles

más extremos de la banda de energía, comportamiento usual en las corrientes de carga. Si la integración numérica de la densidad se realiza para valores cercanos a la energía de Fermi, obtenemos la gráfica de la figura 4.13, en la cual podemos apreciar discontinuidades alrededor de cero y valores impares del flujo magnético. Estas discontinuidades provienen de que la derivada del espectro no es suave en estos puntos. Los puntos alrededor de valores pares son los que contribuyen a la corriente, tomando electrones de los niveles cercanos a la dispersión lineal, dando como resultado una corriente acotada entre cada par de picos, donde los niveles más profundos en la energía contribuyen menos para ciertos valores del flujo magnético. También para el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios se tienen discontinuidades alrededor de cero y valores impares del flujo magnético, con una corriente acotada por estas discontinuidades.

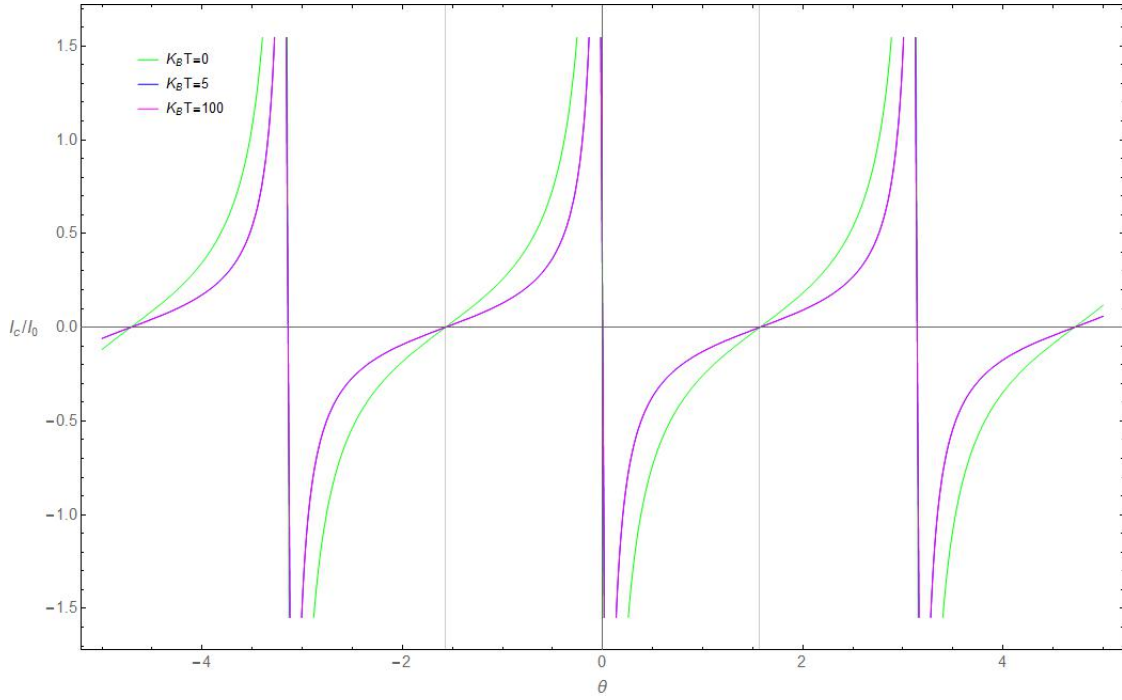


Figura 4.13: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.1.4. Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.

La densidad de corriente de carga (4.18) cuando sólo se tiene interacción EO tipo extrínseco de Rashba se reduce a:

$$J_c = 4\tau i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma \left(G_{2(-\sigma),\sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^<(\omega) \right) \right]. \quad (4.23)$$

Se resolvió el sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier usando *Mathematica*. Luego sustituyendo los valores obtenidos de cada función de Green en (4.23) obtenemos:

$$J_c = \frac{8t^2 \sin 2\phi (4\lambda_{R1}^2 + \omega^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega - 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1)) ((\omega + 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}, \quad (4.24)$$

con $\tau = 1$.

Como se puede observar en la ecuación (4.24) la polarización de espín no tiene importancia alguna en la expresión de la densidad, dando como resultado la misma densidad de corriente y por ende la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín.

La densidad de corriente de carga para un valor pequeño de parámetro EO Rashba extrínseco tiene un comportamiento similar al caso con acoplamiento EO intrínseco, como se muestra en la gráfica de la figura 4.14, en la cual para valores altos de temperatura se disminuye considerablemente la amplitud de la densidad, sin ser afectada para pequeños cambios. La densidad de corriente de carga para este caso posee oscilaciones con picos asimétricos, dando como resultado una densidad de corriente continua pero deformada. En la gráfica 4.15, para valores altos del parámetro de acoplamiento como $\lambda_{R1} = 4$, observamos que la forma del espectro es parabólica, recuperando la simetría entre los valores cercanos a los picos. Esto sugiere un comportamiento similar a la densidad de corriente de un semiconductor.

Al integrar numéricamente la densidad de corriente para valores cercanos al nivel de Fermi, obtenemos la gráfica de la figura 4.16. En la corriente de carga se aprecia una degradación en temperatura, donde los valores de temperatura deben ser altos para obtener una degradación relevante, por ende la corriente se ve poco afectada frente a cambios de temperatura.

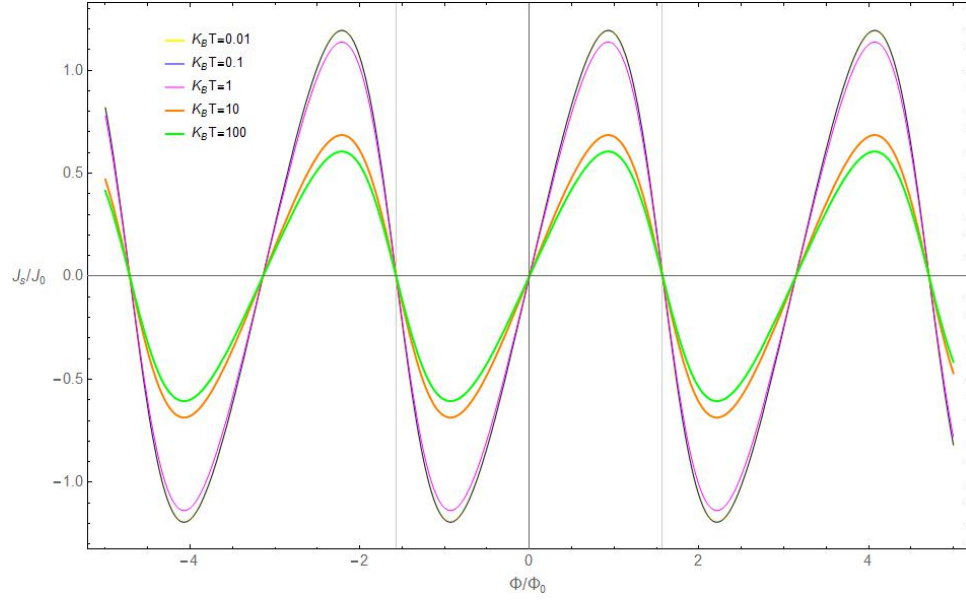


Figura 4.14: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0, 12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

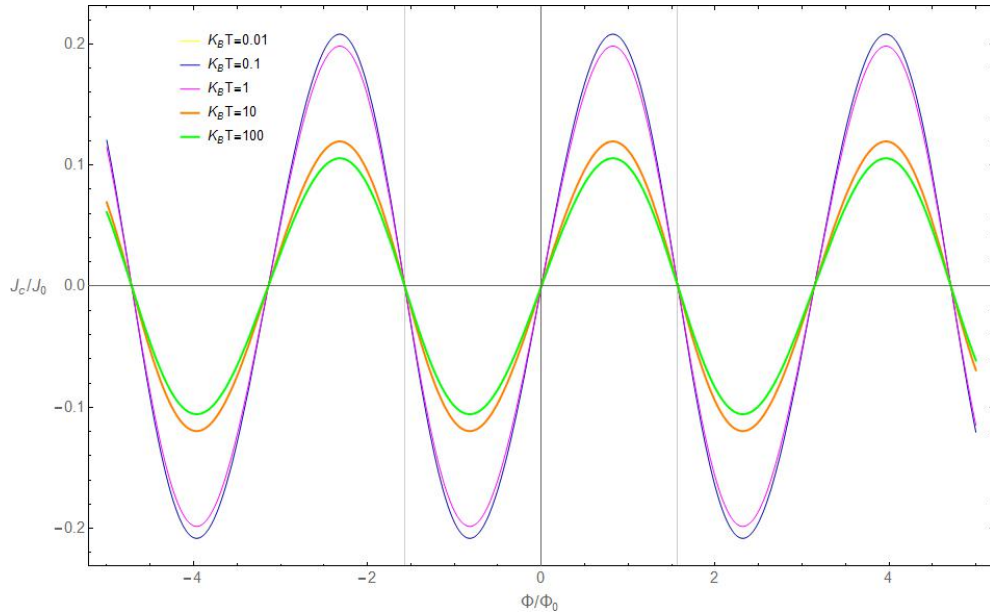


Figura 4.15: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 4$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Al igual que para el caso de un anillo de grafeno con sólo acoplamiento EO Rashba intrínseco tenemos que los valores cercanos a flujo magnético impares la corriente presenta una discontinuidad, para luego presentar una corriente continua que se comporta suavemente con un cambio abrupto de signo. Esto indica que el espectro en los puntos discontinuos es un pico, mientras que en las regiones intermedias se tiene una curva que posee un máximo de energía, para luego disminuir como una parábola invertida, es decir, el espectro de energía en el anillo denota una dispersión cuasi-lineal en el comportamiento de los electrones en estos puntos del flujo magnético.

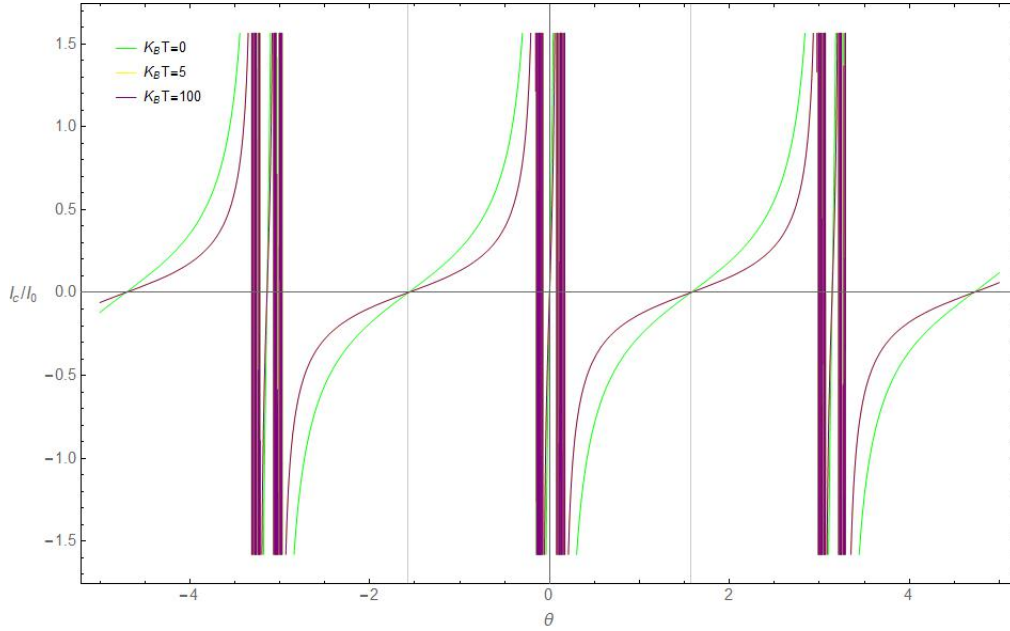


Figura 4.16: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0, 12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.1.5. Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco e intrínseco de Rashba.

Para nuestro trabajo tenemos que el acoplamiento EO intrínseco de Rashba no se ve reflejado en las ecuaciones de movimiento. Si observamos la expresión para la ecuación de

movimiento notamos que la función de Green $G_{n+N+2(-\zeta\sigma),n\sigma}(t)$ es igual a la función de Green $G_{n+N-2(-\zeta\sigma),n\sigma}(t)$, debido a la simetría existente en el arreglo particular del anillo de cuatro sitios, como se muestra en la figura 4.6. Por lo tanto, para poder observar el efecto de este acoplamiento sobre el anillo, utilizamos el sistema de ecuaciones de movimiento proveniente del acoplamiento EO extrínseco de Rashba. Si se quiere observar sólo la presencia de la interacción intrínseca de Rashba sobre el anillo es necesario aumentar el número de sitios, lo que resultó computacionalmente imposible para este trabajo.

La densidad de corriente de carga (4.18) cuando sólo se tiene interacción EO tipo extrínseco e intrínseco de Rashba se reduce a:

$$J_c = 4\tau i \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) - \frac{\lambda_{R1}}{2} \sigma \left(G_{2(-\sigma),\sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^<(\omega) \right) + 2\lambda_{R2} \xi \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}^<(\omega) \right]. \quad (4.25)$$

Se resolvió el sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier usando *Mathematica*. Luego sustituyendo los valores obtenidos de cada función de Green en (4.25) obtenemos:

$$J_c = \frac{4t \operatorname{sen} \phi \left[(2t \cos \phi + 8\lambda_{R2})((2\lambda_{R1} + \omega)^2 - 4t^2 \operatorname{sen}^2 \phi) + (2t \cos \phi - 8\lambda_{R2})((2\lambda_{R1} - \omega)^2 - 4t^2 \operatorname{sen}^2 \phi) \right]}{(e^{\beta\omega} + 1) [(2\lambda_{R1} - \omega)^2 - 4t^2 \operatorname{sen}^2 \phi] ((2\lambda_{R1} + \omega)^2 - 4t^2 \operatorname{sen}^2 \phi)}, \quad (4.26)$$

con $\tau = 1$ y $\xi = 1$.

En la gráfica 4.17 observamos como la densidad de corriente de carga decae con la temperatura. Aumentos pequeños de temperatura no degradan la corriente, se necesitan cambios de 4 órdenes de magnitud para obtener una disminución de la amplitud de la densidad. Esta resistencia que observamos es el efecto de protección contra la temperatura. Al igual que para el caso de acoplamiento Rashba extrínseco notamos asimetría en los picos cercanos a valores enteros del flujo magnético, los electrones en estos niveles parecen cambiar de una forma más abrupta de la banda de valencia a la banda de conducción, en la cual la separación de la brecha entre las bandas ocasiona que los niveles de energía más profundos no contribuyan a la densidad.

Si variamos el parámetro de acoplamiento EO intrínseco de Rashba dejando fijo el parámetro Rashba extrínseco a $\lambda_{R1} = 0,012$, obtenemos la gráfica de la figura 4.18. Se evidencia que la densidad depende fuertemente del valor de λ_{R2} , ya que en el decaimiento de la densidad de corriente se tienen picos que “oscilan” en magnitud, observando picos de mayor amplitud que otros. Por ejemplo para un valor cercano a -2 del flujo magnético el pico se degrada para un valor en el parámetro de acoplamiento $\lambda_{R2} = 0,07$, en el siguiente

pico cercano a $3/2$ del flujo magnético la corriente se degrada para un valor en el parámetro de acoplamiento $\lambda_{R2} = 0,7$, con un máximo de corriente de menor amplitud que el pico anterior. Este comportamiento se repite para los demás valores del flujo magnético.

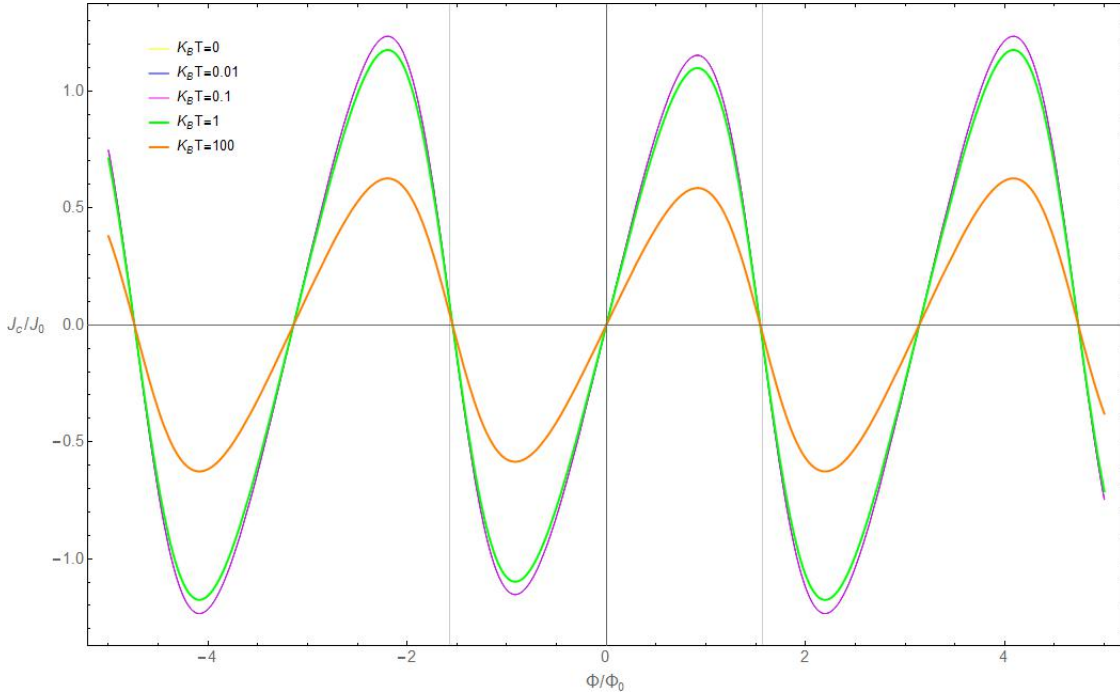


Figura 4.17: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Integrando de forma numérica la densidad de corriente de carga se obtiene la corriente mostrada en la gráfica 4.19, en la cual se observa que la corriente que proviene de los niveles de energía más superficiales es poco afectada ante variaciones en la temperatura. Se evidencia como la dispersión del nivel de Fermi afecta la forma del espectro para valores cercanos a enteros impares del flujo magnético. Como se puede observar en la expresión (4.26) la polarización de espín no tiene relevancia en la expresión de la densidad de carga, obteniendo así la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín, resultado similar a los casos anteriores.

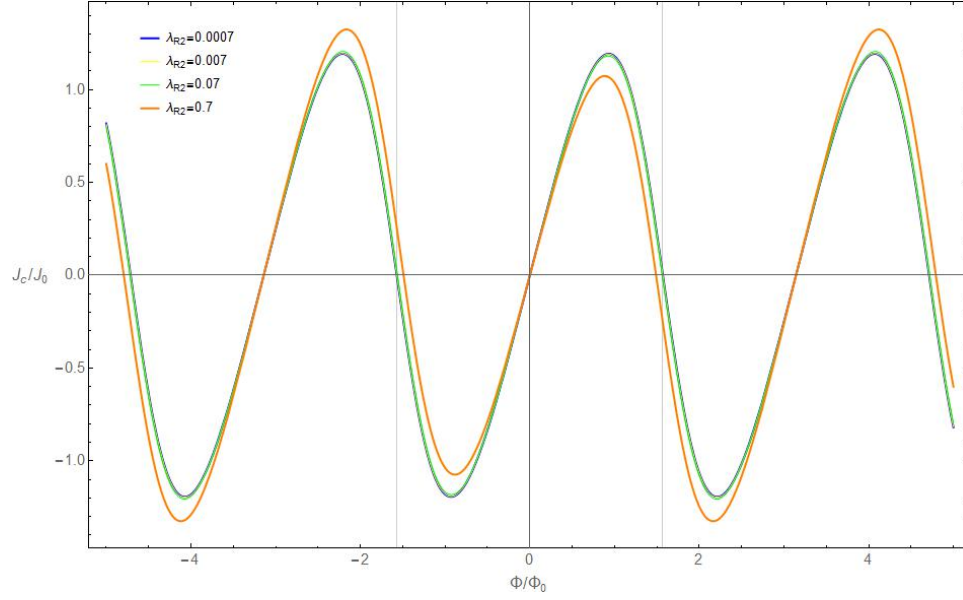


Figura 4.18: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ con $K_B T = 0$.

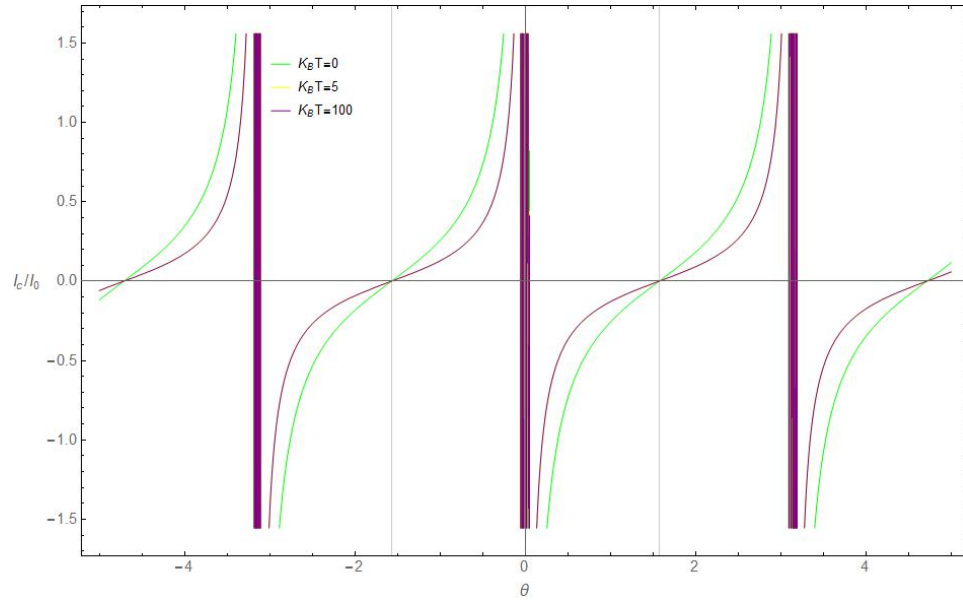


Figura 4.19: Gráfica corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.1.6. Resultados de corrientes persistentes de carga para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco.

Al resolver el sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier usando *Mathematica* y sustituyendo los valores obtenidos correspondientes a cada función de Green para la ecuación (4.18) obtenemos:

$$J_c = \frac{8t\text{sen}\phi \left[\left((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2 - t^2 \right) t \cos \phi + 16\lambda_{R1}\lambda_{R2}\omega + t^3 \cos 3\phi \right]}{(e^{\beta\omega} + 1) \left[\left((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + 2t^2(1 - \cos 2\phi) + \omega^2 + 4t\omega\text{sen}\phi \right) \left((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + 2t^2(1 - \cos 2\phi) + \omega^2 - 4t\omega\text{sen}\phi \right) \right]}, \quad (4.27)$$

con $\tau = 1$, $\nu_n = 1$ y $\xi = 1$.

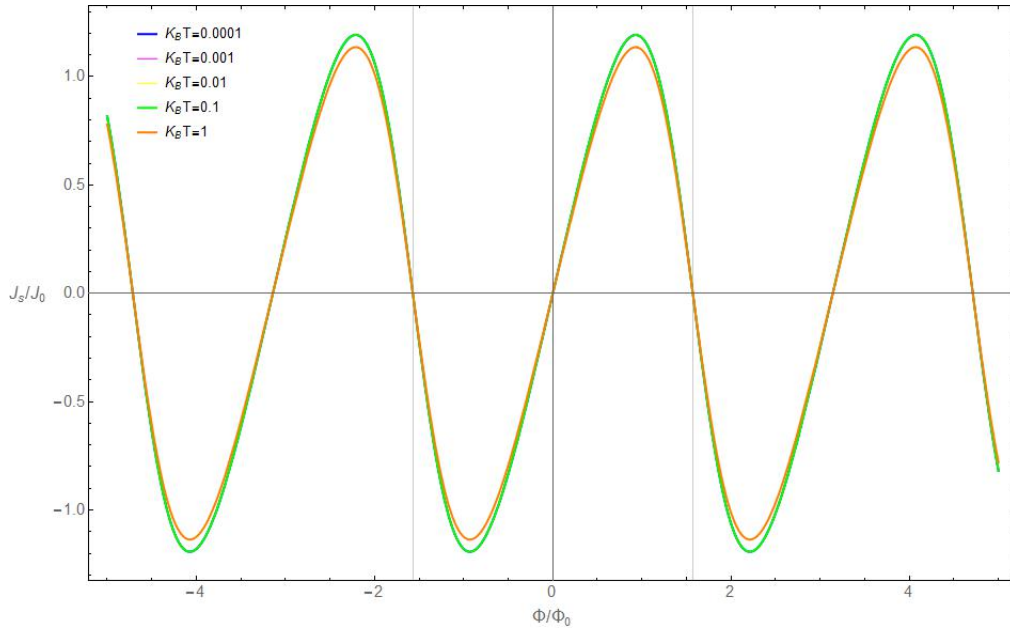


Figura 4.20: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$.

Para el caso en el que se tiene interacciones EO tipo intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco para un anillo basado en siliceno, obtenemos las gráficas de las figuras 4.20 y 4.21. Observamos la atenuación en temperatura esperada y además se tiene el mismo comportamiento que en la densidad de corriente de carga para el caso cuando sólo se tiene acoplamiento EO Rashba extrínseco en el anillo, ya que para valores altos de este acoplamiento observamos simetría entre los valores cercanos a los picos. Clara indicación

de este comportamiento se muestra en la expresión (4.27) con el término $(4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2)$, donde el aporte del acoplamiento EO Rashba extrínseco supera el aporte de los acoplos EO intrínseco y EO Rashba intrínseco. Por otro lado, a pesar de poseer términos de acoplamiento EO, la densidad de corriente no depende de la polarización de espín, dando como resultado la misma corriente de carga para cualquier polarización de espín.

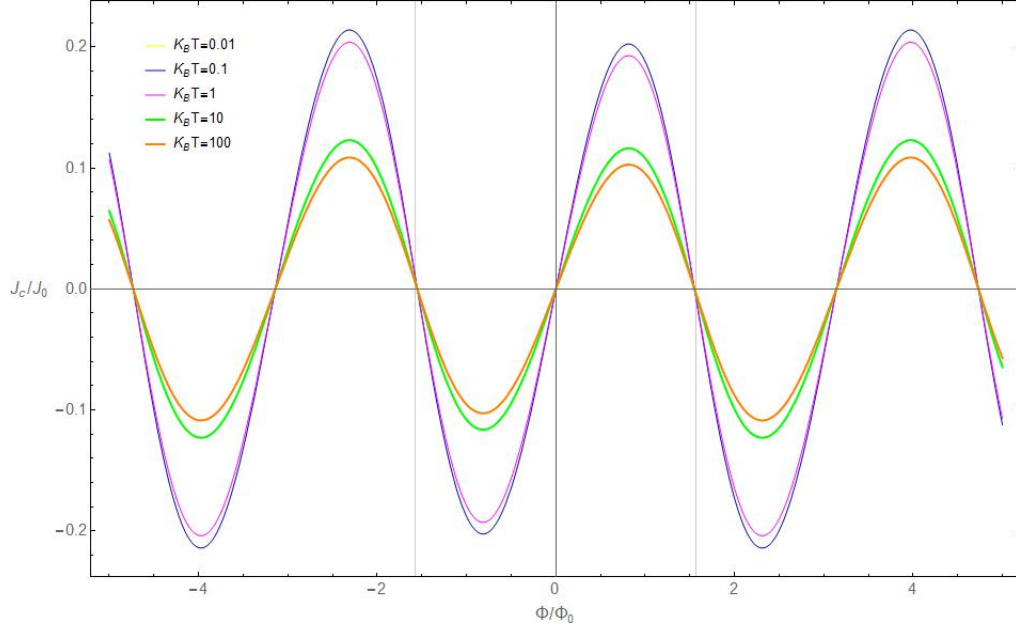


Figura 4.21: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 4$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Veamos ahora los casos de acoplamiento EO por separado, fijando los parámetros de acople de diferentes órdenes de magnitud.

En la gráfica de la figura 4.22 fijamos los parámetros EO Rashba extrínseco e intrínseco a $\lambda_{R1} = 0,12$ y $\lambda_{R2} = 0,07$ respectivamente. Observamos que la densidad de corriente no se degrada para valores pequeños del parámetro EO intrínseco, es decir, la densidad de corriente no detecta la variación del parámetro EO intrínseco. Dicho acoplamiento sólo se impone para valores mayores al acoplamiento EO Rashba extrínseco como $\lambda_{EO} = 0,39$, donde se aprecia una disminución de la amplitud de la densidad de corriente. Este comportamiento se debe a la forma en que actúan ambos acoplamientos en el término $(4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2)$ de la expresión (4.27), además del aumento en la brecha de energía.

Por otro lado, la presencia del acoplamiento EO Rashba intrínseco afecta la forma del espectro, con picos de mayor y menor amplitud, dando como resultado una densidad de corriente continua pero deformada.

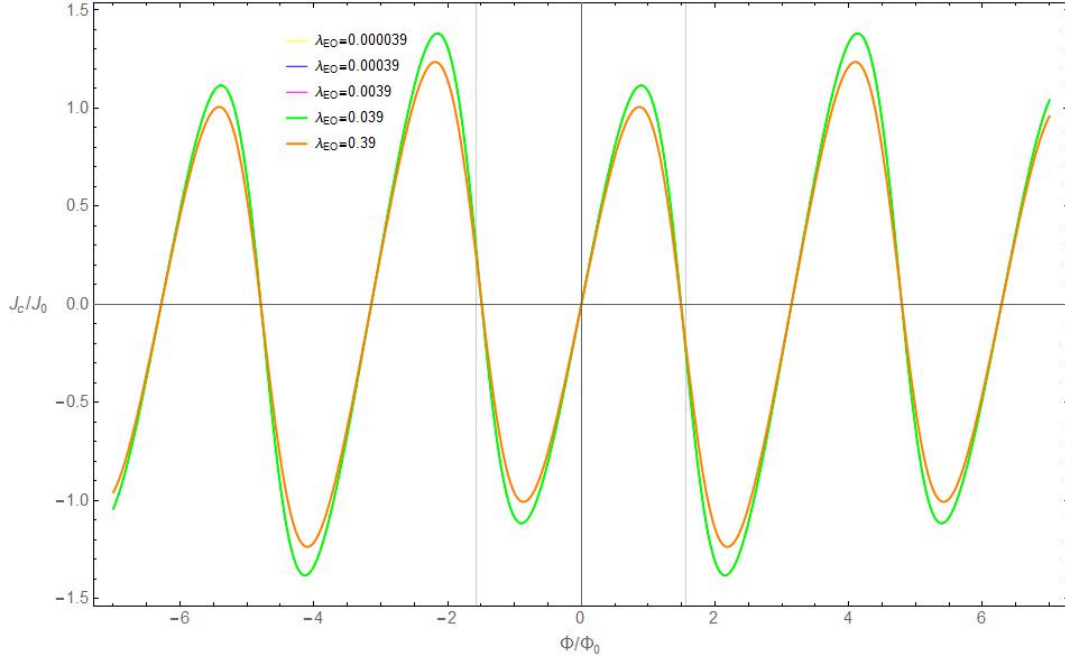


Figura 4.22: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ a $K_B T = 0$.

Fijando los parámetros EO intrínseco y EO Rashba intrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y $\lambda_{R2} = 0,007$ respectivamente, observamos en la gráfica de la figura 4.23 que la densidad de corriente de carga no es afectada por cambios del parámetro EO Rashba extrínseco.

Por último si fijamos los parámetros EO intrínseco y EO Rashba extrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y $\lambda_{R1} = 0,12$, obtenemos la gráfica de la figura 4.24. La densidad de corriente es sensible frente a cambios del valor del parámetro de EO Rashba intrínseco, debido a que notamos una oscilación modulada de la corriente con el parámetro de acoplamiento λ_{R2} , con picos de mayor y menor amplitud.

Integrando de forma numérica la densidad de corriente de carga se obtiene la corriente mostrada en la gráfica de la figura 4.25. La corriente se degrada con la temperatura, en la cual su comportamiento se debe básicamente por la interacción EO Rashba extrínse-

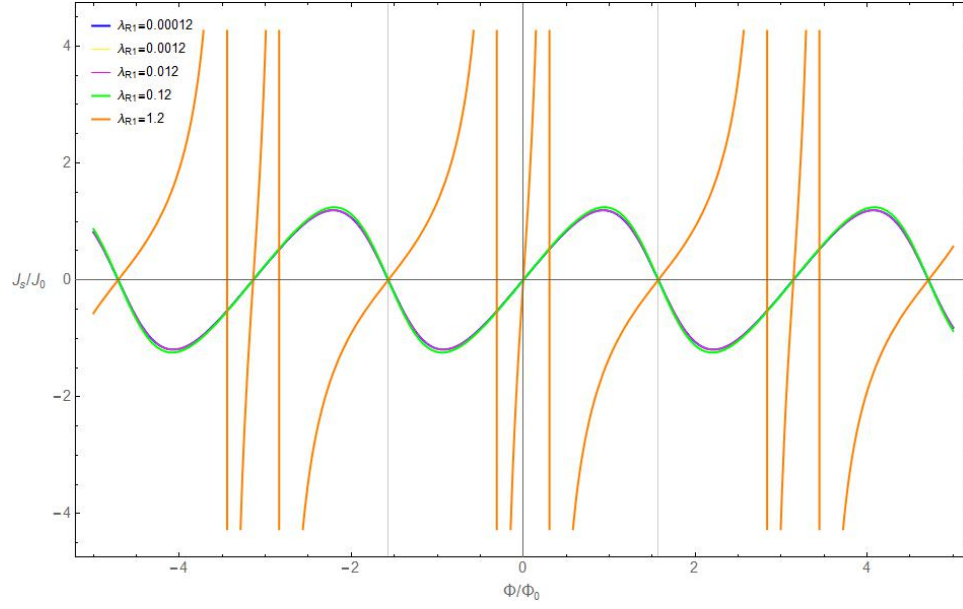


Figura 4.23: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable, intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a $K_B T = 0$.

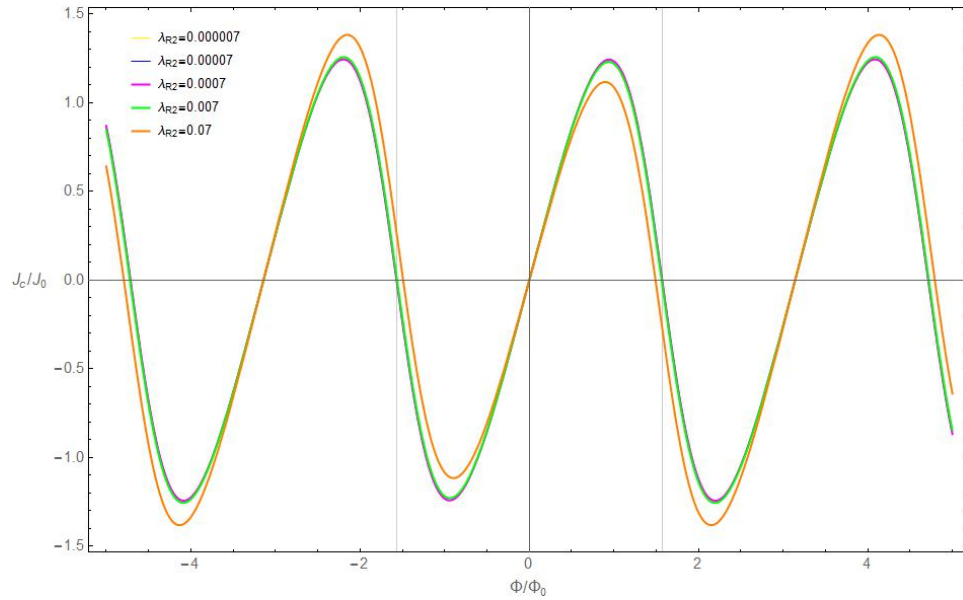


Figura 4.24: Gráfica de densidad de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable, intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a $K_B T = 0$.

ca. Por último si comparamos con el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios, los acoplamientos EO intrínseco y Rashba extrínseco proceden como una sola interacción, predominando la contribución del parámetro Rashba extrínseco y por ende la corriente de carga también se debe esencialmente por la interacción EO Rashba extrínseco.

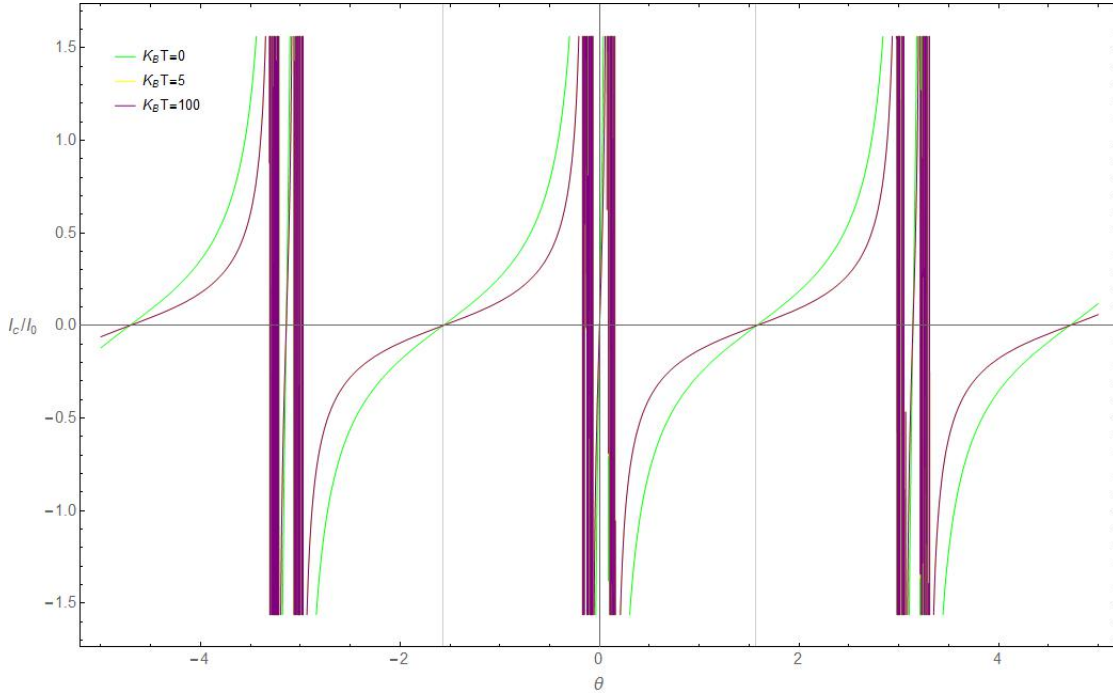


Figura 4.25: Gráfica de corriente de carga de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.2. Corrientes persistentes de espín.

En la medida que los electrones transportan tanto el espín como carga, su movimiento da lugar también a una corriente de espín. En el caso particular de una corriente de espín pura como en la figura 4.26, tenemos que al sumar una corriente de carga polarizada con todos los espines hacia arriba con una corriente de carga polarizada con los espines hacia abajo, circulando en sentidos opuestos, obtenemos que las corrientes de carga se cancelan quedando únicamente 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.

Sin embargo tenemos que tener en cuenta que la corriente de espín sólo es notoria en presencia de acoplamiento Espín-Órbita, la cual rompe la degeneración de espín permitiendo el desdoblamiento de los niveles de energía correspondientes a cada espín. Además, la corriente de espín se corresponde con una matriz de espín donde la velocidad de los electrones resulta ser un operador en el espacio de espín [18].

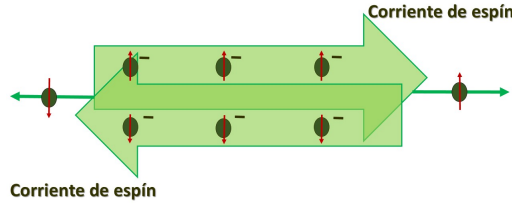


Figura 4.26: Corriente de espín pura debida al flujo de cargas transportadas por los electrones con espines hacia arriba y espines hacia abajo.

Consideremos una función de onda $\psi(\vec{r}, t)$. La componente de la densidad de espín para una partícula en la representación del espacio real está dado 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. La derivada temporal de la densidad de espín es [20]:

$$\frac{ds_v(\vec{r}, t)}{dt} = \frac{\hbar}{2} \left\{ \left[\frac{d\psi^\dagger(\vec{r}, t)}{dt} \right] \boldsymbol{\sigma} \psi(\vec{r}, t) + \left[\psi^\dagger(\vec{r}, t) \boldsymbol{\sigma} \frac{d\psi(\vec{r}, t)}{dt} \right] \right\}. \quad (4.28)$$

Si además, consideramos los efectos de la aplicación de un campo magnético en el centro del anillo como vimos anteriormente, se producirá una corriente persistente de espín cuya expresión general viene dada por [19]:

$$I_s(\phi) = \int_{-\infty}^{\mu} \vec{J}_s(E) dE, \quad (4.29)$$

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

$$\vec{J}_s = \frac{1}{2N} \{\vec{S}, \vec{v}\}. \quad (4.30)$$

Por otra parte, se sabe que para un sistema con interacción espín órbita, el espín es no conservado y esto causa problemas para describir el transporte de espín en términos de la corriente de espín. La derivada temporal de la densidad de espín no puede ser representada como la divergencia de la corriente de espín, ya que se tienen términos de torque [20]. Así la ecuación (4.28) se reduce a:

$$\frac{ds_v(\vec{r}, t)}{dt} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s(r, t) = \tau, \quad (4.31)$$

donde τ es un torque. La ecuación (4.31) es la ecuación de continuidad de espín. Aquí destacamos que esta ecuación es la consecuencia de la invariancia de la magnitud de espín, es decir, cuando un electrón realiza un movimiento, ya sea de traslación o rotación, su magnitud de espín $|\vec{S}| = \hbar/2$ permanece constante.

4.2.1. Corrientes persistentes de espín para un anillo de siliceno con interacción Espín-Órbita tipo intrínseco y Rashba.

Se desea conseguir las corrientes persistentes de espín en el anillo de siliceno descrito en la sección 4.1.1. Para ello, primero veamos la densidad de corriente de espín (4.30), la cual se reescribe como:

$$\vec{J}_s = \frac{1}{2\hbar N} \left\{ \vec{S}, [\mathbf{H}, \mathbf{x}] \right\}. \quad (4.32)$$

Para calcular el anticonmutador utilizamos la ecuación (4.14) de $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$, obteniendo ⁸:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{bc} = & \sum_n \frac{1}{4\hbar N} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x \right) + \right. \right. \\
& + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_x + \\
& - \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} + \\
& \left. + i\lambda_{R2}\xi e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} \right] \hat{x} + \\
& + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y \right) + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \boldsymbol{\sigma}_y + \right. \\
& + \frac{\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} + \\
& \left. - \lambda_{R2}\xi e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma (\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)}) I_{2 \times 2} \right] \hat{y} + \\
& + 2 \left[t \left(e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+1\sigma} \boldsymbol{\sigma}_z - e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n\sigma} \boldsymbol{\sigma}_z \right) + i\lambda_{EO}\nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \Big\}, \tag{4.33}
\end{aligned}$$

Para la densidad de corriente de espín denotaremos las entradas de la matriz 2×2 de la siguiente forma:

$$\vec{J}_s^{bc} = \begin{pmatrix} ++ & +- \\ -+ & -- \end{pmatrix}, \tag{4.34}$$

donde bc representa las entradas de las matrices.

Luego tomando el valor medio de cada término y definiendo las funciones de Green respectivas, nos queda:

⁸Ver apéndice A, sección A.4

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{bc} = & \sum_n \frac{1}{4\hbar N} \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) \right) \sigma_x + \right. \right. \\
& + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) \sigma_x + \\
& - \frac{i\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) \right) I_{2 \times 2} + \\
& \left. + i\lambda_{R2}\xi e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \left(G_{n+2(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+2\sigma}^<(0) \right) I_{2 \times 2} \right] \hat{x} + \\
& + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) \right) \sigma_y + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) \sigma_y + \right. \\
& + \frac{\lambda_{R1}}{2} e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma \left(G_{n+1(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+1\sigma}^<(0) \right) I_{2 \times 2} + \\
& \left. - \lambda_{R2}\xi e^{-i\sigma\theta} \sum_{\sigma} \sigma \left(G_{n+2(-\sigma), n\sigma}^<(0) + G_{n(-\sigma), n+2\sigma}^<(0) \right) I_{2 \times 2} \right] \hat{y} + \\
& + 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{n+1\sigma, n\sigma}^<(0) - e^{-i\phi} G_{n\sigma, n+1\sigma}^<(0) \right) \sigma_z + i\lambda_{EO}\nu_n G_{n+2\sigma, n\sigma}^<(0) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \Big\}.
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Como tenemos las mismas funciones de Green encontradas en (4.17) seguiremos el procedimiento de la sección 4.1.1 y reduciremos la densidad de corriente de espín a un solo sistema de ecuaciones en el espacio de Fourier. Esto es:

$$\begin{aligned}
\vec{J}_s^{bc} = & \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma, \sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma, \sigma}^<(\omega) \right) \sigma_x + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma, \sigma}^<(\omega) \sigma_x + \right. \right. \\
& - \frac{\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} \left(G_{2(-\sigma), \sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma), \sigma}^<(\omega) \right) I_{2 \times 2} + 2\lambda_{R2}\xi\sigma \sum_{\sigma} G_{3(-\sigma), \sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \Big] \hat{x} + \\
& + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma, \sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma, \sigma}^<(\omega) \right) \sigma_y + i\lambda_{EO}\nu_n \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma, \sigma}^<(\omega) \sigma_y + \right. \\
& - \frac{i\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} \sigma \left(G_{2(-\sigma), \sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma), \sigma}^<(\omega) \right) I_{2 \times 2} + 2i\lambda_{R2}\xi\sigma \sum_{\sigma} \sigma G_{3(-\sigma), \sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \Big] \hat{y} + \\
& \left. + 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma, \sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma, \sigma}^<(\omega) \right) \sigma_z + i\lambda_{EO}\nu_n G_{3\sigma, \sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \right\}.
\end{aligned} \tag{4.36}$$

donde $\xi = \sum_{A,B} \mu_{(A,B)}$ y $G_{\mathcal{C}, \mathcal{D}}^<(\omega) = \frac{1}{e^{\beta\omega} + 1} (2i \text{Im}(G_{\mathcal{C}, \mathcal{D}}(\omega)))$.

4.2.2. Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.

La densidad de corriente de espín (4.36) cuando sólo se tiene interacción EO tipo intrínseco, con $\nu_n = 1$ se reduce a:

$$\begin{aligned} \vec{J}_s^{bc} = & \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_x + i\lambda_{EO} \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^<(\omega) \sigma_x \right] \hat{x} + \right. \\ & + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_y + i\lambda_{EO} \sum_{\sigma} \sigma G_{3\sigma,\sigma}^<(\omega) \sigma_y \right] \hat{y} + \\ & \left. + 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_z + i\lambda_{EO} G_{3\sigma,\sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \right] \hat{z} \right\}. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Para cada componente de la densidad de corriente de espín veamos los resultados de las entradas de la matriz según (4.34), usando los valores obtenidos en *Mathematica* de cada función de Green:

Componente $\hat{x}$

1. Entrada $++$:

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

2. Entrada $+-$:

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

En la gráfica de la figura 4.27 se puede observar como la densidad de corriente de espín se degrada con la temperatura con picos simétricos para cualquier valor del flujo magnético, en donde la densidad de corriente se encuentra desplazada por encima de cero. Sin embargo, para valores muy pequeños del parámetro de acoplamiento intrínseco la densidad de corriente se aproxima a cero, clara demostración de que la corriente de espín sólo es notoria bajo la presencia de un acoplamiento Espín-Órbita.

Al integrar de manera numérica la densidad de corriente para valores por debajo de la energía de Fermi obtenemos la corriente de espín mostrada en la gráfica de la figura 4.28. Los niveles más profundos en la energía contribuyen menos para ciertos valores del flujo magnético. Al igual que en el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios, la temperatura degrada la corriente de espín desplazada por encima de cero, mostrando máximos en regiones para ciertos valores del flujo, donde toma electrones de los niveles de energía más superficiales.

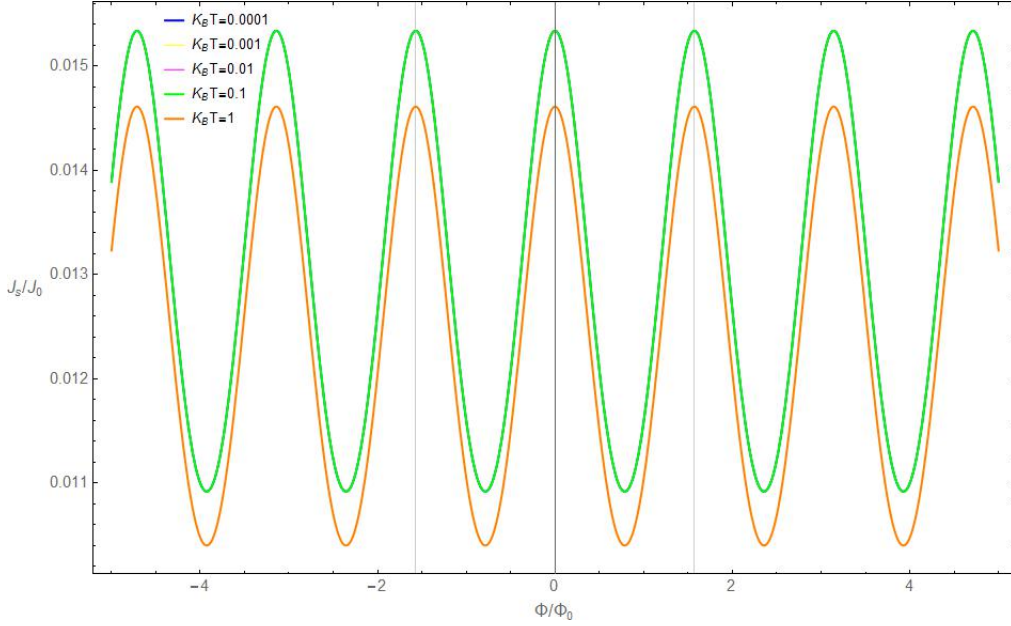


Figura 4.27: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 1$.

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

Componente $\hat{y}$

1. Entrada $++$:

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

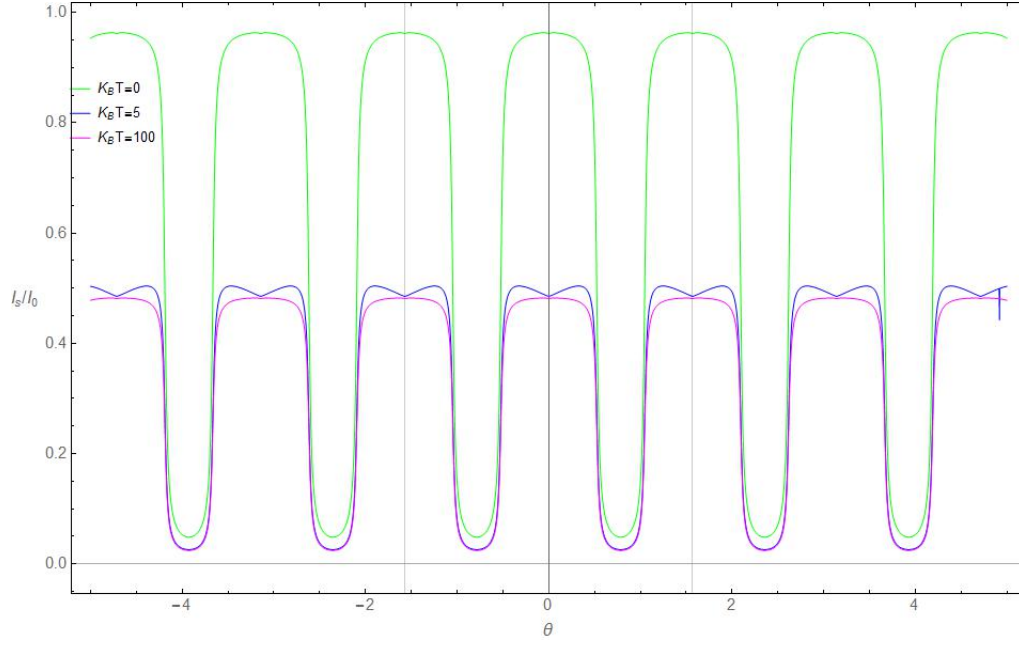


Figura 4.28: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

2. Entrada $+-$:

$$J_{sy}^{+-} = \frac{2t^2 \sin 2\phi (\lambda_{EO}^2 - \omega^2 + 2t^2(1 - \cos 2\phi))}{(e^{\beta\omega} + 1) \left(4\lambda_{EO}^2 \omega^2 + (\lambda_{EO}^2 - \omega^2 + 2t^2(1 - \cos 2\phi))^2 \right)}. \quad (4.39)$$

La densidad de corriente como se observa en la gráfica de la figura 4.29 se degrada para valores altos en la temperatura y su comportamiento es similar a la densidad de corriente de carga con acoplamiento EO intrínseco.

Para obtener la corriente de espín realizamos una integración numérica de la densidad de corriente para valores cercanos a la energía de Fermi, como se ilustra en la gráfica de la figura 4.30. Observamos una dispersión lineal en el espectro, cuya derivada en este caso es una discontinuidad. En estos puntos, los niveles de energía que contribuyen a la corriente son los más superficiales, cercanos al nivel de Fermi. Alrededor de valores pares del flujo magnético, los electrones se encuentran más hundidos en la banda de valencia, por los que los electrones disponibles cerca del nivel de Fermi disminuyen. De esta manera la corriente es resistente a cambios de temperatura, para $K_B T = 100$ es que se observa una degradación de la corriente de espín.

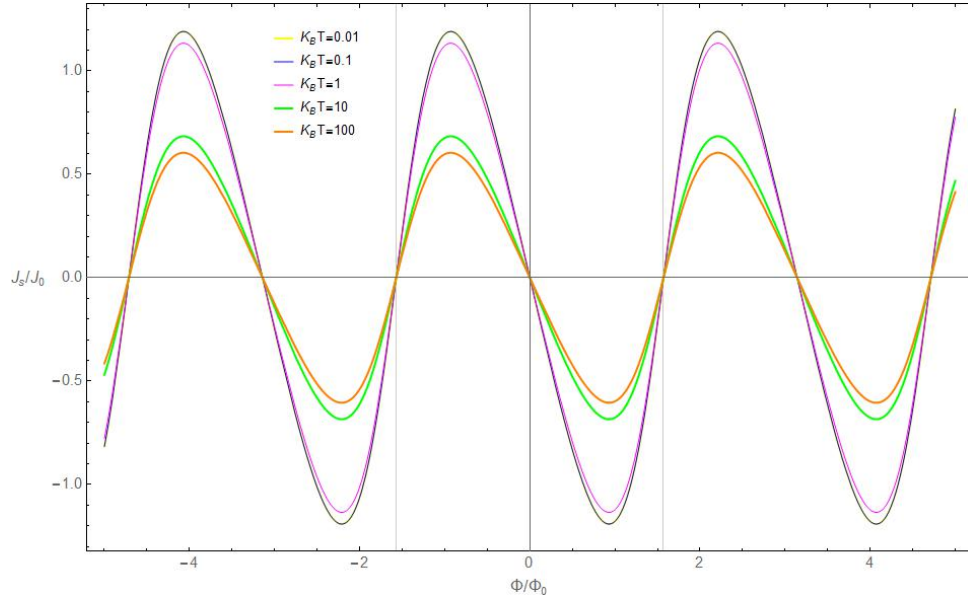


Figura 4.29: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

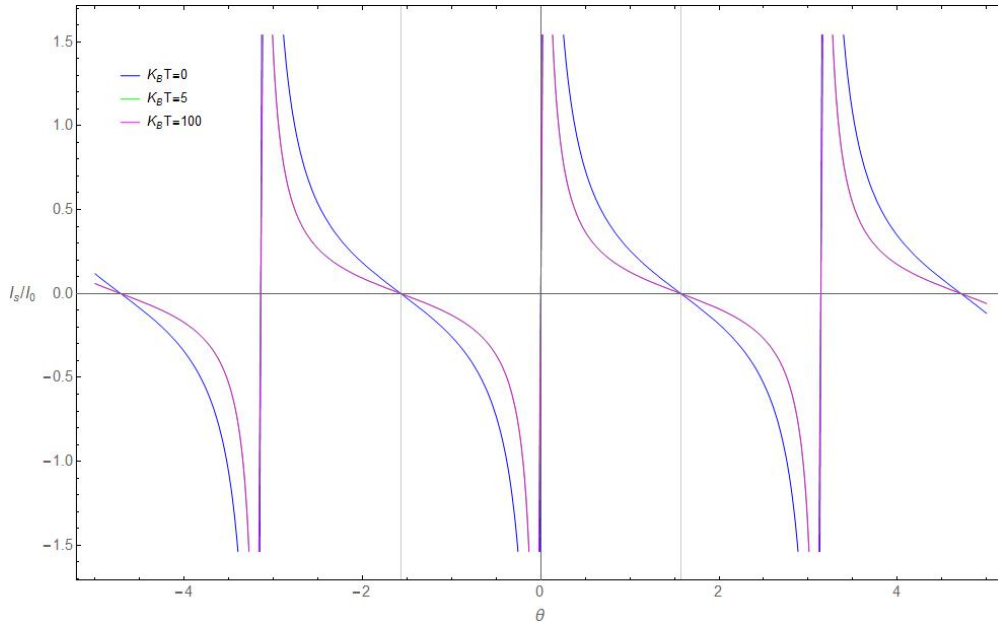


Figura 4.30: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

3. Entrada $-+$:

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

Como se puede observar en la gráfica de la figura 4.31 la corriente obtenida es el negativo de la expresión de la corriente de espín (4.39). En este caso las corrientes cambian de polarización.

4. Entrada $--$:

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

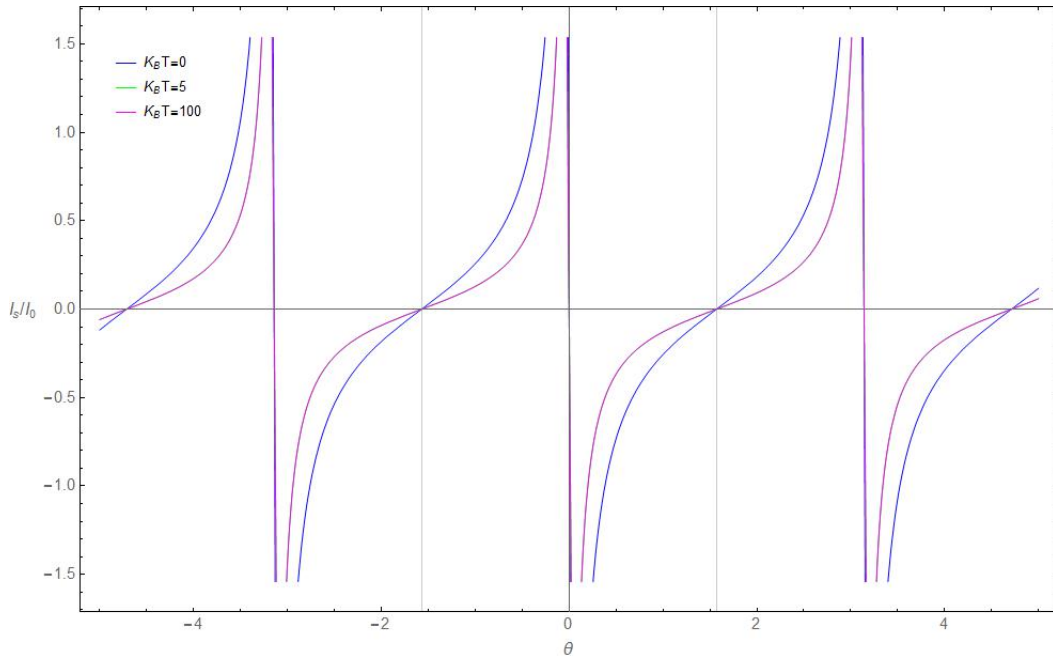


Figura 4.31: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Componente $\hat{z}$

1. Entrada ++ :

$$J_{sz}^{++} = \frac{4}{(e^{\beta\omega} + 1)^2} \left[\lambda_{EO}\sigma \left(t\text{sen}\phi \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} - \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \lambda_{EO}\sigma \left(\frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\text{sen}\phi + \omega)^2} + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\text{sen}\phi)^2} \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (\omega - 2t\cos\phi)^2} + \frac{1}{\lambda_{EO}^2 + (2t\cos\phi + \omega)^2} \right) \right) \right]. \quad (4.40)$$

En este caso como se puede observar en la ecuación (4.40) el acoplamiento EO desdobra la energía para valores de espín.

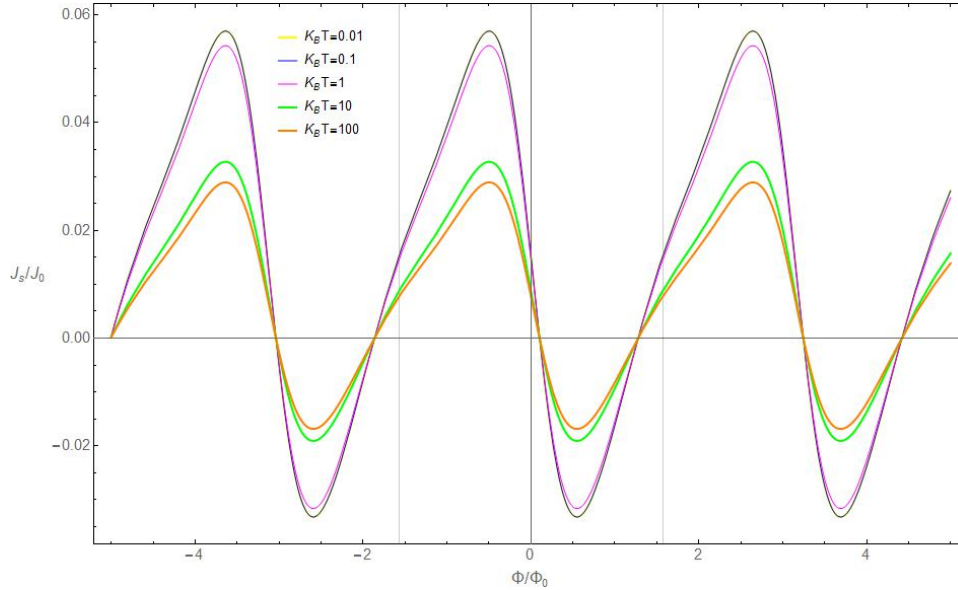


Figura 4.32: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

Para la polarización positiva $\sigma = 1$ del espectro desdoblado tenemos las gráficas de las figuras 4.32 y 4.33. Observamos que la densidad de corriente se degrada notablemente para cambios de un orden de magnitud en temperatura, en comparación con las otras componentes. En la gráfica de la figura 4.33 tenemos que al igual que para la componente $\hat{x}$ la densidad de corriente se aproxima a cero para valores pequeños del parámetro de acoplamiento. También notamos que la forma de la densidad de

corriente de espín se deforma para valores muy altos del parámetro de acoplamiento.

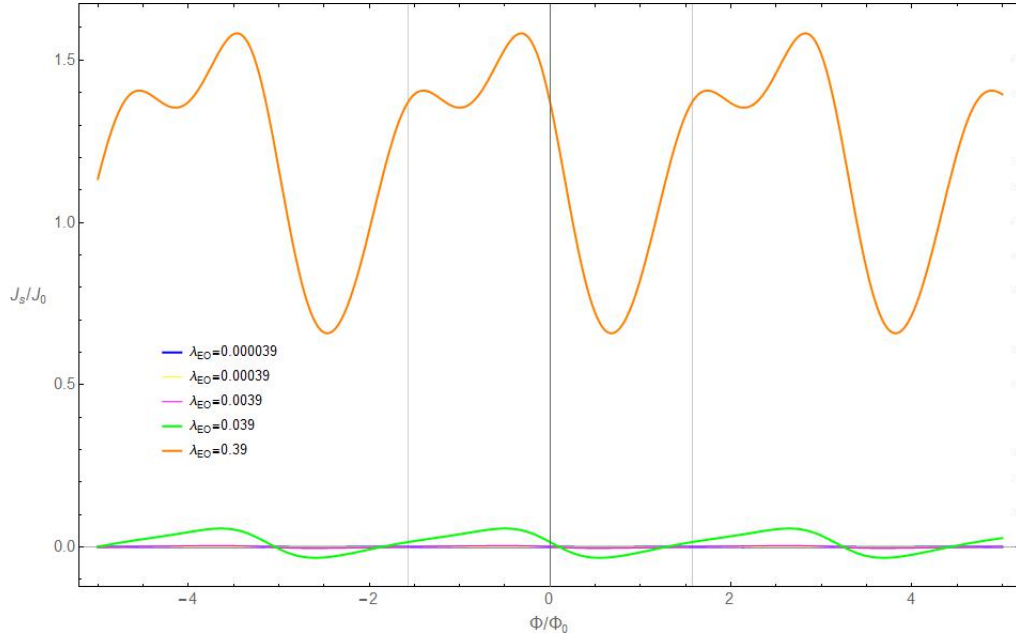


Figura 4.33: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

Al integrar de forma numérica la densidad de corriente para valores por debajo de la energía de Fermi, obtenemos la corriente de espín mostrada en la gráfica de la figura 4.34. Es notable el efecto de temperatura, ya que para altas temperaturas se observa un intervalo en el espectro de energía donde la corriente disminuye hasta un punto y se satura, comportamiento también observado para el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios. Por otra parte, cerca de los valores de flujo magnético pares se tiene poca degradación de la corriente, es decir, en esta parte del espectro la corriente se resiste a cambios de temperatura, donde los niveles de energía que contribuyen están muy por debajo del nivel de Fermi, ofreciendo pocos electrones.

Para la componente de espín con polarización negativa $\sigma = -1$ mostramos la corriente de espín de la figura 4.35, en la cual observamos el comportamiento anterior, salvo que es el negativo.

2. Entrada $+-$:

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

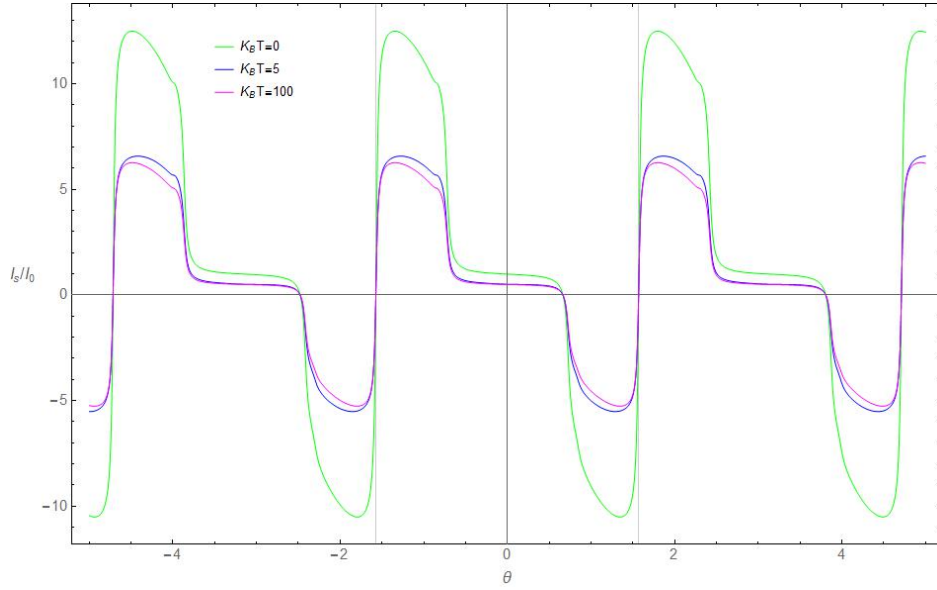


Figura 4.34: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

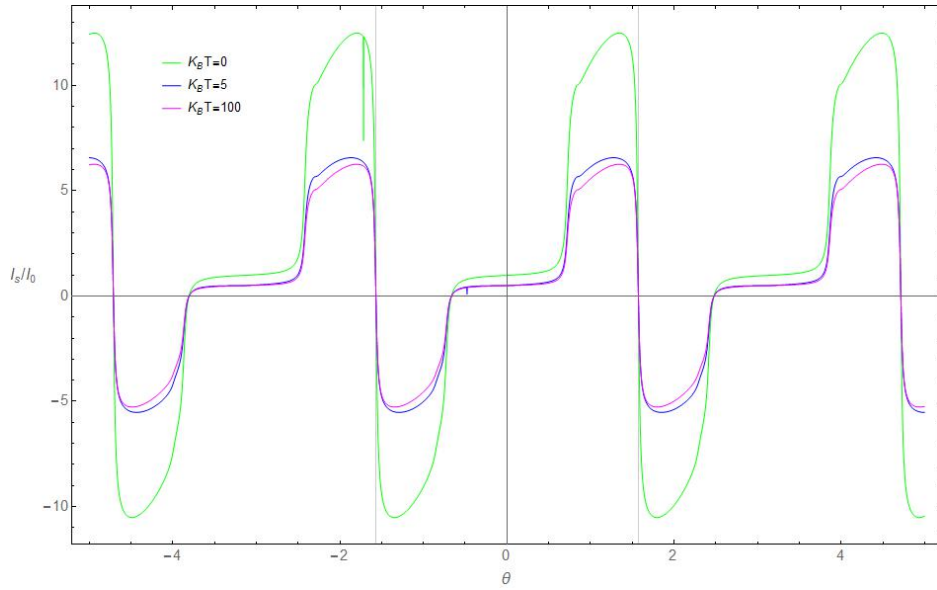


Figura 4.35: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ con polarización negativa de espín $\sigma = -1$.

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

La componente $z--$ de la corriente de espín es el negativo de la expresión (4.40), por lo tanto la corriente sólo cambia de polarización, debido a que presentan simetría entre ellas.

4.2.3. Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.

La densidad de corriente de espín (4.36) cuando sólo se tiene interacción EO tipo extrínseco de Rashba se reduce a:

$$\begin{aligned} \vec{J}_s^{bc} = & \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(\omega) \right) \sigma_x + \right. \right. \\ & \left. - \frac{\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(\omega)) I_{2 \times 2} \right] \hat{x} + \\ & + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(\omega) \right) \sigma_y + \right. \\ & \left. - \frac{i\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} \sigma (G_{2(-\sigma),\sigma}^{<}(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^{<}(\omega)) I_{2 \times 2} \right] \hat{y} + \\ & \left. + 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^{<}(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^{<}(\omega) \right) \sigma_z \right] \hat{z} \right\}. \end{aligned} \quad (4.41)$$

Componente $\hat{x}$

$$\hat{x} = 0.$$

La corriente da cero para esta componente, debido al arreglo de cuatro átomos de nuestro sistema con un ángulo de separación de $\theta = \pi/2$. Como se evidencia en la expresión del acoplamiento EO Rashba extrínseco dentro del Hamiltoniano notamos que el espaciamiento angular influye en el comportamiento de este acoplamiento y por lo tanto en la corriente de carga y espín. Tenemos entonces que la corriente sufre variaciones en la densidad de las componentes del anillo ya que cada componente es perpendicular a la

otra. Para observar esta componente espacial a lo largo del anillo, es necesario que agregar más sitios al sistema.

Componente $\hat{y}$

1. Entrada ++ :

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

2. Entrada +- :

$$J_{sy}^{+-} = -\frac{2t^2 \sin 2\phi (4\lambda_{R1}^2 + \omega^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega - 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1)) ((\omega + 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}. \quad (4.42)$$

Estudiaremos sólo la entrada $y + -$, ya que si observamos la expresión de la entrada $y - +$ notamos que es el negativo de la expresión (4.42).

El comportamiento de la densidad de corriente es similar a la densidad de corriente de carga con acoplamiento Rashba extrínseco, como se observa en la gráfica de la figura 4.36. La amplitud de la densidad se degrada con la temperatura, y como notamos ocurre en mayor grado para valores altos de temperatura con un aumento en la brecha entre las bandas de valencia y conducción, dificultando tomar electrones de los niveles desdoblados en espín. En la gráfica 4.37 tenemos poca degradación en la densidad de corriente de espín al variar el parámetro de acoplamiento, sólo se observa un cambio en la curva para $\lambda_{R1} = 1, 2$, ampliando considerablemente la forma de la curva.

Al realizar una integración numérica de la densidad de corriente de espín para valores cercanos a la energía de Fermi, obtenemos la corriente mostrada en la gráfica de la figura 4.38. Observamos que la corriente que proviene de los niveles de energía más superficiales se resisten a los cambios de temperatura, ya que sólo notamos una degradación para aumentos de dos órdenes de magnitud. Valores cercanos a enteros del flujo magnético notamos una degradación menor, ya que los niveles que se encuentran en estos valores son más profundos en la banda de valencia. Por otro lado, se refleja una dispersión cuasi-lineal en el espectro alrededor de cero y valores cercanos a enteros impares del flujo magnético para luego presentar un cambio abrupto de signo.

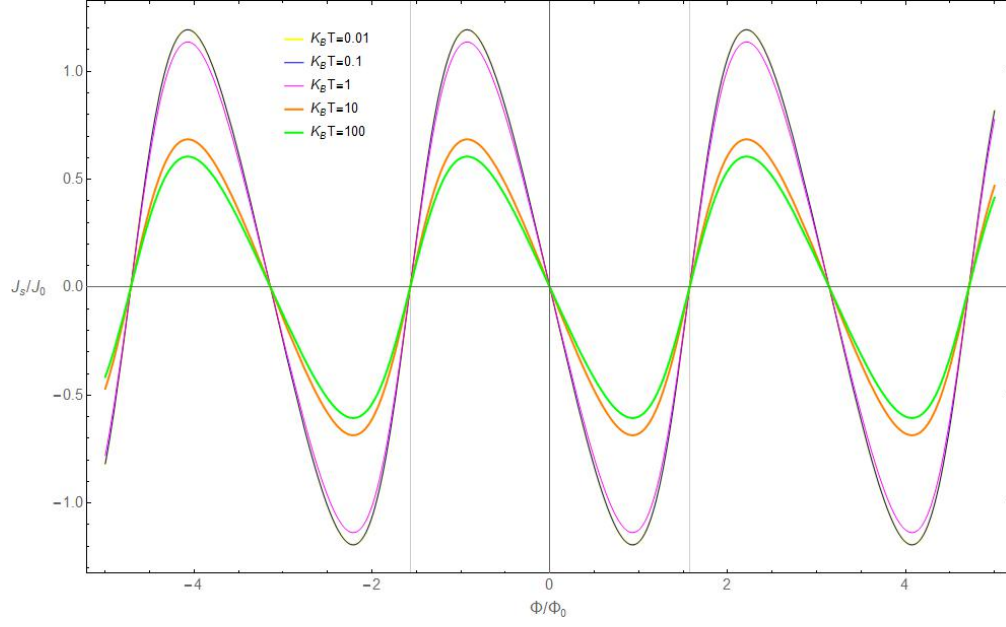


Figura 4.36: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0, 12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

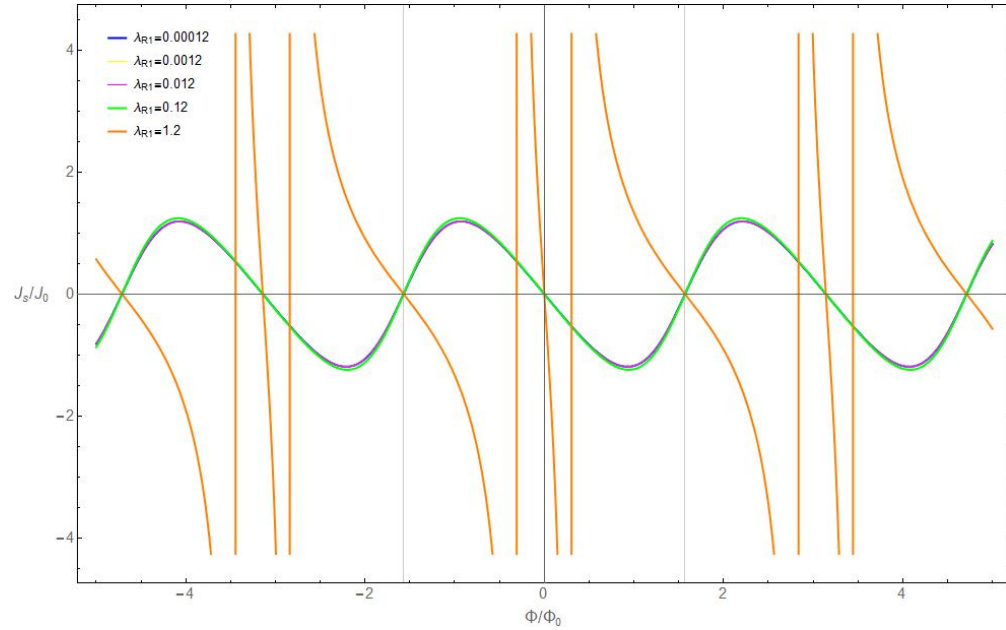


Figura 4.37: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable a temperatura $K_B T = 0$.

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

Componente $\hat{z}$

$$\hat{z} = 0.$$

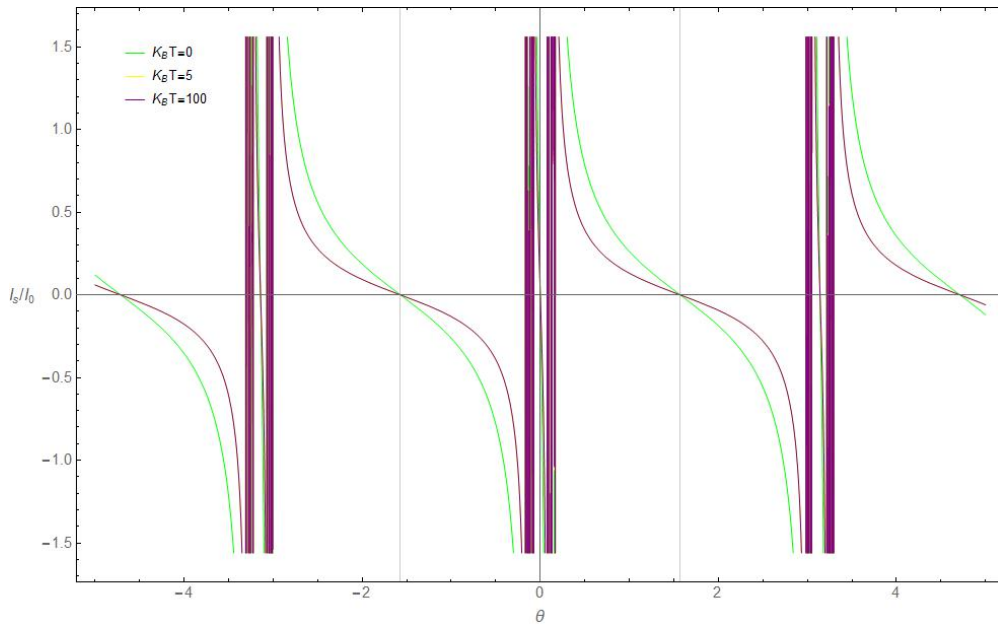


Figura 4.38: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0, 12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Cada componente de la densidad de corriente de espín con acoplamiento EO extrínseco de Rashba se comportan de manera similar que el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios en presencia de acoplamiento EO extrínseco de Rashba.

4.2.4. Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita extrínseco e intrínseco de Rashba.

La densidad de corriente de espín (4.36) cuando solo se tiene interacción EO tipo extrínseco e intrínseco de Rashba, con $\xi = 1$ se reduce a:

$$\begin{aligned} \vec{J}_s^{bc} = & \left\{ \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_x + \right. \right. \\ & - \frac{\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} (G_{2(-\sigma),\sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^<(\omega)) I_{2 \times 2} + 2\lambda_{R2}\sigma \sum_{\sigma} G_{3(-\sigma),\sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{x} + \\ & + \left[t \left(e^{i\phi} \sum_{\sigma} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} \sum_{\sigma} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_y + \right. \\ & - \frac{i\lambda_{R1}\sigma}{2} \sum_{\sigma} \sigma (G_{2(-\sigma),\sigma}^<(\omega) + G_{4(-\sigma),\sigma}^<(\omega)) I_{2 \times 2} + 2i\lambda_{R2}\sigma \sum_{\sigma} \sigma G_{3(-\sigma),\sigma}^<(\omega) I_{2 \times 2} \left. \right] \hat{y} + \\ & \left. + 2 \left[t \left(e^{i\phi} G_{2\sigma,\sigma}^<(\omega) - e^{-i\phi} G_{4\sigma,\sigma}^<(\omega) \right) \sigma_z \right] \hat{z} \right\}. \end{aligned} \quad (4.43)$$

La presencia del acoplamiento EO intrínseco de Rashba en el anillo sólo afecta el comportamiento de la densidad de corriente de espín para la componente $y++$ y $y--$, como podemos observar en la expresión (4.44) debido al arreglo de cuatro átomos en el anillo. Para las demás componentes se tiene el mismo efecto producido por el acoplamiento EO extrínseco de Rashba que analizamos anteriormente, así que sólo estudiaremos la entrada $++$ de la componente y .

Componente $\hat{x}$

$$\hat{x} = 0.$$

Componente $\hat{y}$

1. Entrada $++$:

$$J_{sy}^{++} = \frac{4\lambda_{R1}\lambda_{R2}t\omega\sin\phi}{(e^{\beta\omega}+1)(6t^4+(\omega^2-4\lambda_{R1}^2)^2-4t^2(\omega^2+4\lambda_{R1}^2)+4t^2\cos 2\phi(\omega^2+4\lambda_{R1}^2-2t^2)+2t^4\cos 4\phi)}. \quad (4.44)$$

En la densidad de corriente de espín mostrada en la gráfica de la figura 4.39 observamos la degradación en temperatura esperada, se necesitan 4 órdenes de magnitud

para degradar la amplitud. Notamos que la densidad de corriente se deforma con picos mas cerrados en las proximidades de cero y valores semi-enteros, lo que nos indica que la intensidad es afectada por el acoplamiento EO intrínseco de Rashba, ya que en la densidad de corriente (4.44), observamos una expresión definida por el parámetro de acoplamiento Rashba extrínseco multiplicado por el parámetro de acoplamiento Rashba intrínseco.

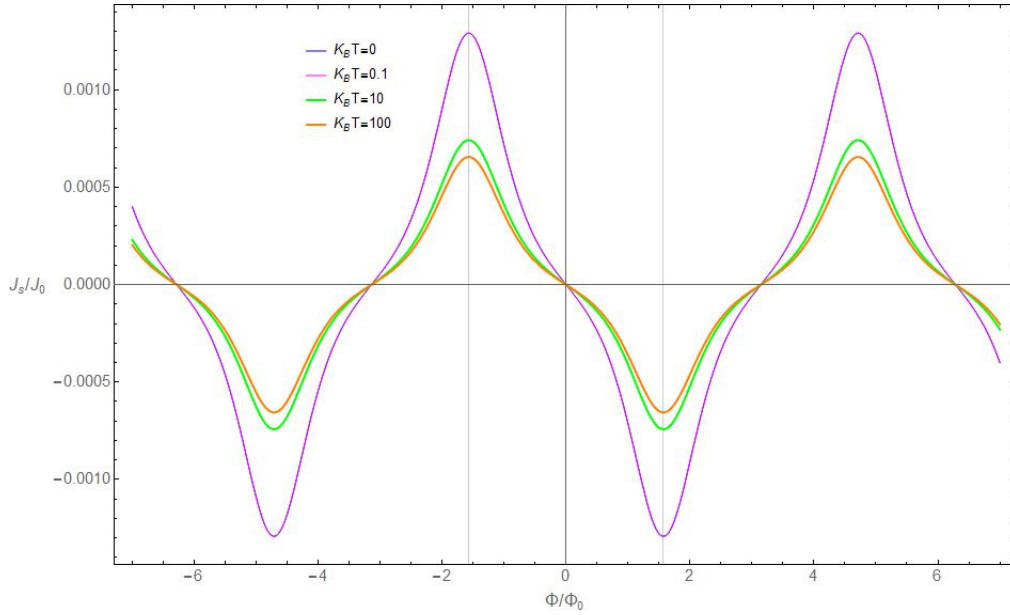


Figura 4.39: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Fijando un valor del parámetro Rashba extrínseco en $\lambda_{R1} = 0,012$ y variando el Rashba intrínseco, observamos que las variaciones en la densidad de corriente son muy pronunciadas. Para valores pequeños del parámetro Rashba intrínseco la densidad no aumenta notablemente hasta alcanzar el mismo orden de magnitud que el parámetro Rashba extrínseco, donde observamos un cambio de la forma aumentando abruptamente la densidad.

Integrando la densidad de corriente para valores cercano a la energía de Fermi, obtenemos la corriente de espín mostrada en la gráfica de la figura 4.41, la cual es robusta para variaciones en la temperatura. Se observa una dispersión en las proximidades de valores semi-enteros del flujo magnético, lo que nos dice que los niveles

que aportan a la corriente son los más cercanos al nivel de Fermi. Además observamos que existen mínimos de corriente de espín para valores por encima de cero y máximos de corriente de espín por debajo de cero.

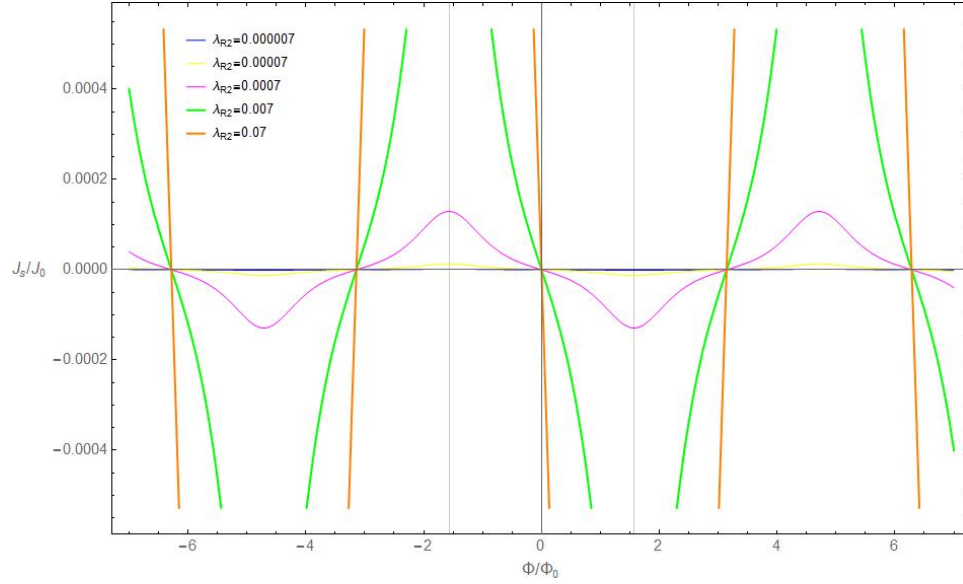


Figura 4.40: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba intrínseco variable y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ a temperatura $K_B T = 0$.

2. Entrada $+-$:

$$J_{sy}^{+-} = -\frac{2t^2 \sin 2\phi (4\lambda_{R1}^2 + \omega^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}{(e^{\beta\omega} + 1) ((\omega - 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1)) ((\omega + 2\lambda_{R1})^2 + 2t^2(\cos 2\phi - 1))}. \quad (4.45)$$

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

Componente $\hat{z}$

$$\hat{z} = 0.$$

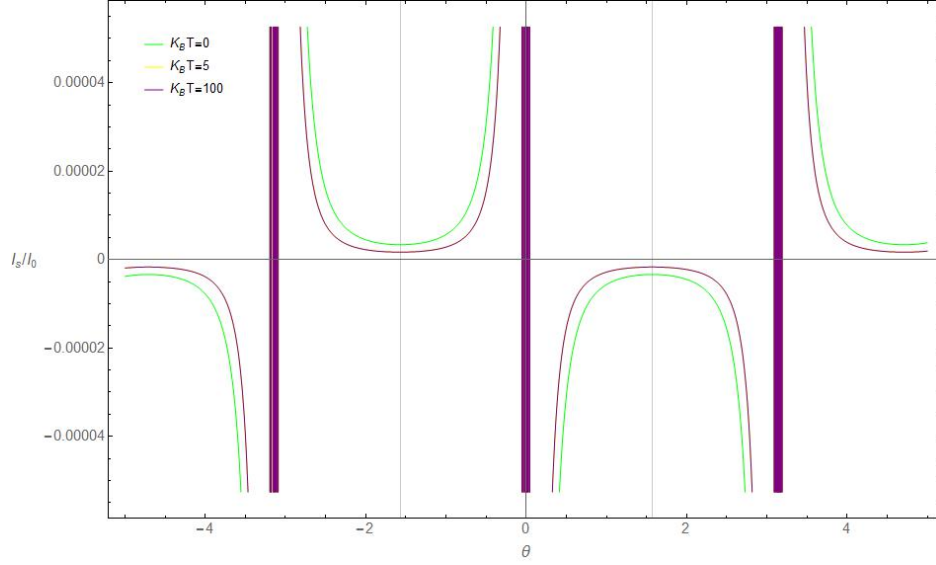


Figura 4.41: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,0012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,07$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

4.2.5. Resultados de corrientes persistentes de espín para un anillo basado en siliceno con acoplamiento Espín-Órbita intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco.

Usando los valores obtenidos en Mathematica correspondientes a cada función de Green, la ecuación (4.36) con $\nu = 1$ y $\xi = 1$ da como resultado:

Componente $\hat{x}$

1. Entrada ++ :

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

2. Entrada +- :

$$J_{sx}^{+-} = \sum_{\sigma} \frac{1}{(e^{\beta\omega} + 1)} \left[\frac{2it^2 \sin 2\phi - \lambda_{EO} \sigma (\lambda_{EO} \sigma + i\omega)}{(\lambda_{EO} \sigma + i\omega)^2 + 2t^2 (\cos 2\phi + 1)} + \frac{\lambda_{EO} \sigma (-\lambda_{EO} \sigma + i\omega) - 2it^2 \sin 2\phi}{(\lambda_{EO} \sigma - i\omega)^2 + 2t^2 (\cos 2\phi + 1)} + \frac{2\lambda_{EO}^2 ((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + 2t^2 (1 - \cos 2\phi) + \omega^2)}{((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + \omega^2)^2 + 2t^4 \cos 4\phi + 6t^4 + 4t^2 \cos 2\phi ((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2) - 4t^2 ((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2)} \right]. \quad (4.46)$$

Como podemos observar en la expresión (4.46) no tiene ninguna relevancia el acoplamiento EO intrínseco de Rashba, denotando que las interacciones EO intrínseca y Rashba extrínseca actúan en conjunto como $4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2$. Por lo tanto se obtiene un comportamiento similar a la densidad de corriente y la corriente de espín de un anillo de grafeno con cuatro sitios. En la gráfica 4.42 la densidad de corriente oscila con el flujo y la amplitud disminuye considerablemente para valores pequeños en temperatura.

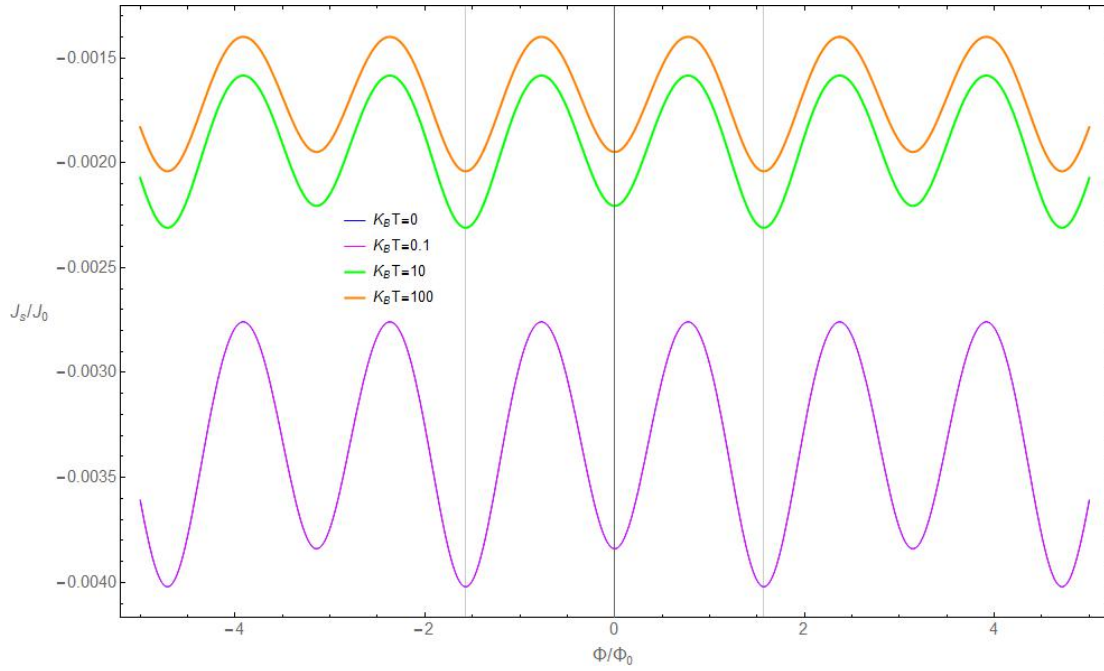


Figura 4.42: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Variando el parámetro de acoplamiento EO intrínseco y dejando fijo el parámetro Rashba extrínseco en $\lambda_{R1} = 0,12$, observamos en la gráfica de la figura 4.43 como la densidad de corriente depende del parámetro de acoplamiento intrínseco λ_{EO} , ya que para valores muy pequeños la amplitud se aproxima a cero, para luego pasar a una componente constante en la densidad de corriente de espín, hasta obtener una densidad negativa que oscila para valores mayores al parámetro EO Rashba extrínseco.

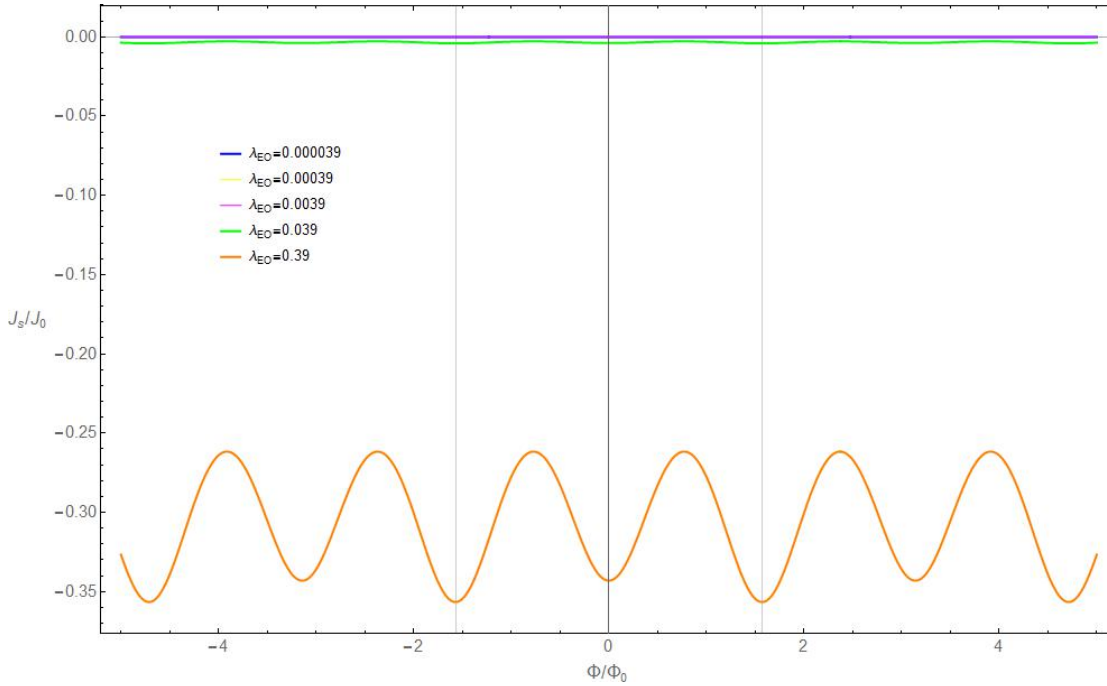


Figura 4.43: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$.

Para explicar el comportamiento descrito anteriormente veamos la gráfica de la figura 4.44, en la cual observamos los niveles de energía en las banda de valencia y conducción de un anillo de grafeno unidimensional. El nivel de Fermi se encuentra en $E_F = 0$. La presencia del acoplamiento tipo Rashba rompe la degeneración de espín dando lugar a dos niveles desdoblados de energía que se corresponden con espín para arriba ($\uparrow$ en rojo) y espín para abajo ($\downarrow$ en azul).

Los niveles para cada espín aportan las corrientes de carga que forman la corriente de espín. Como se observa en la figura la brecha que separa los niveles rojos (espín para arriba) y azules (espín para abajo) tienen distinto tamaño. La brecha asociada a espín para arriba es más angosta y se encuentra más cerca al nivel de Fermi, de manera que los electrones en este nivel pueden acceder más fácilmente a la banda de conducción. La brecha asociada a espín para abajo es más ancha y por lo tanto se encuentra más alejada del nivel de Fermi, de manera que es más difícil extraer electrones de estos niveles en la banda de valencia.

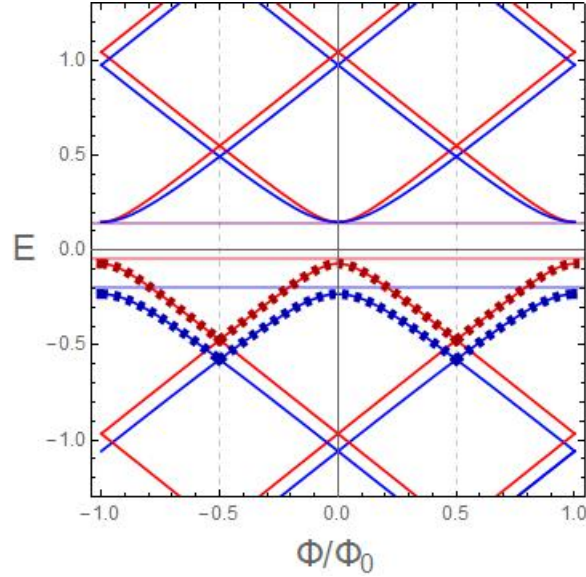


Figura 4.44: Gráfica del espectro de energías de espín de un anillo unidimensional basado en Grafeno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco a temperatura $K_B T = 0$.

La definición más fundamental de la corriente de espín es la diferencia de las corrientes de carga con espines opuestos. Si esta diferencia no cancela completamente la componente asociada a la carga resulta en un remanente que se observa en las gráficas de las figuras 4.42 y 4.43, como un desplazamiento vertical en la corriente que es dependiente además del parámetro intrínseco.

Si fijamos el parámetro EO intrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y variamos el parámetro Rashba extrínseco, obtenemos la gráfica de la figura 4.45. Observamos que al aumentar el parámetro EO Rashba extrínseco se incrementa la amplitud de la densidad de corriente. Tenemos entonces, que la presencia de EO Rashba supera la contribución de EO intrínseco, ya que el acople Rashba no desdobla más los niveles de energía en espín, reduciendo la brecha existente por parte del acople EO intrínseco.

En la gráfica de la figura 4.46 tenemos la corriente de espín para valores cercanos a la energía de Fermi, observando como decae con la temperatura. La corriente presenta máximos por debajo de cero para valores impares del flujo magnético, para luego presentar discontinuidades. Como se indicó anteriormente para las densidades de corriente, en estos puntos los niveles de energía que contribuyen a la corriente son los más cercanos al nivel de Fermi.

Como observamos en los gráficos para esta componente no existe densidad de co-

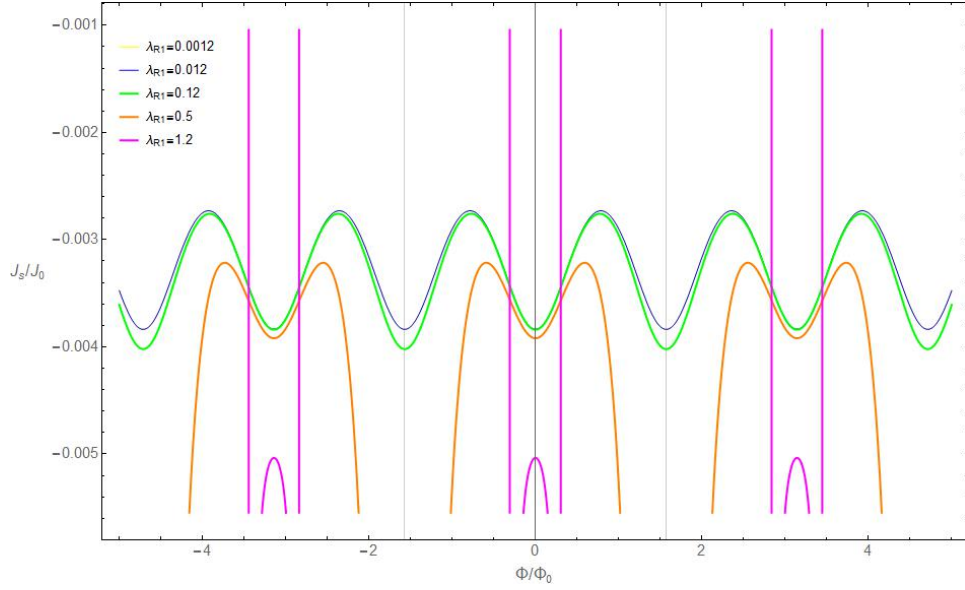


Figura 4.45: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO tipo extrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$.

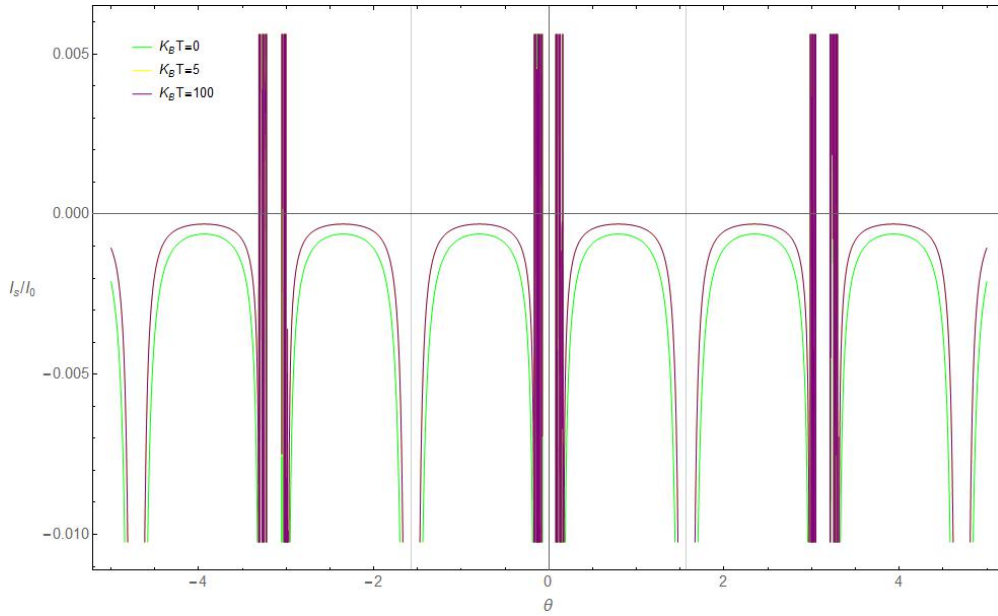


Figura 4.46: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

riente de espín para valores por encima de cero debido a la presencia del acoplamiento EO intrínseco.

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

Componente $\hat{y}$

1. Entrada $++$:

$$J_{sy}^{++} = \frac{4\lambda_{R1}\lambda_{R2}t\omega\sin\phi}{(e^{\beta\omega}+1)\left((\omega^2+(\lambda_{EO}^2-4\lambda_{R1}^2))^2+6t^4+4t^2\cos 2\phi((4\lambda_{R1}^2-\lambda_{EO}^2)-2t^2+\omega^2)-4t^2((4\lambda_{R1}^2-\lambda_{EO}^2)+\omega^2)\right)}. \quad (4.47)$$

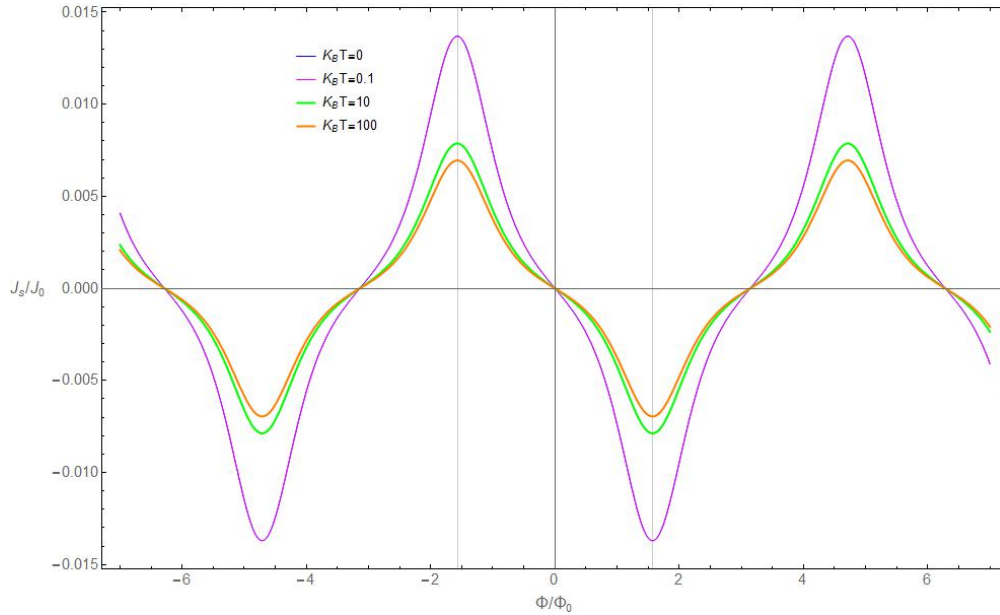


Figura 4.47: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R2} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R1} = 0,007$ variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Considerando todas las interacciones en la densidad de corriente de espín podemos observar en la expresión (4.47) que el acoplamiento EO intrínseco de Rashba afecta

únicamente esta componente. La densidad de corriente de espín en la gráfica de la figura 4.47 es robusta para cambios pequeños de temperatura y la forma de la curva está básicamente relacionada con la interacción EO Rashba intrínseca.

En la gráfica de la figura 4.48 fijamos los parámetros EO Rashba extrínseco e intrínseco a $\lambda_{R1} = 0,012$ y $\lambda_{R2} = 0,007$ respectivamente, observando que la densidad de corriente es insensible a la variación del parámetro EO intrínseco. Para valores mayores a los parámetros de Rashba es que se aprecia una degradación de la densidad, abriendo más la brecha de energía entre las bandas de valencia y conducción.

Fijando los parámetros EO intrínseco y Rashba intrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y $\lambda_{R2} = 0,007$ respectivamente, notamos en la gráfica 4.49 como la densidad de corriente se altera notablemente para cambios en el valor de λ_{R1} .

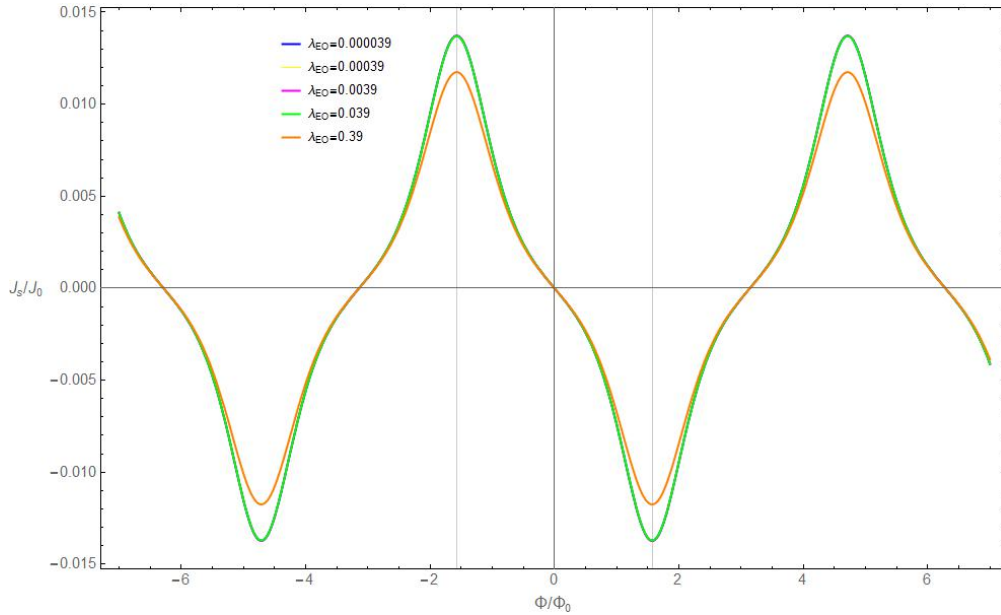


Figura 4.48: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO intrínseco variable, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,012$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a temperatura $K_B T = 0$.

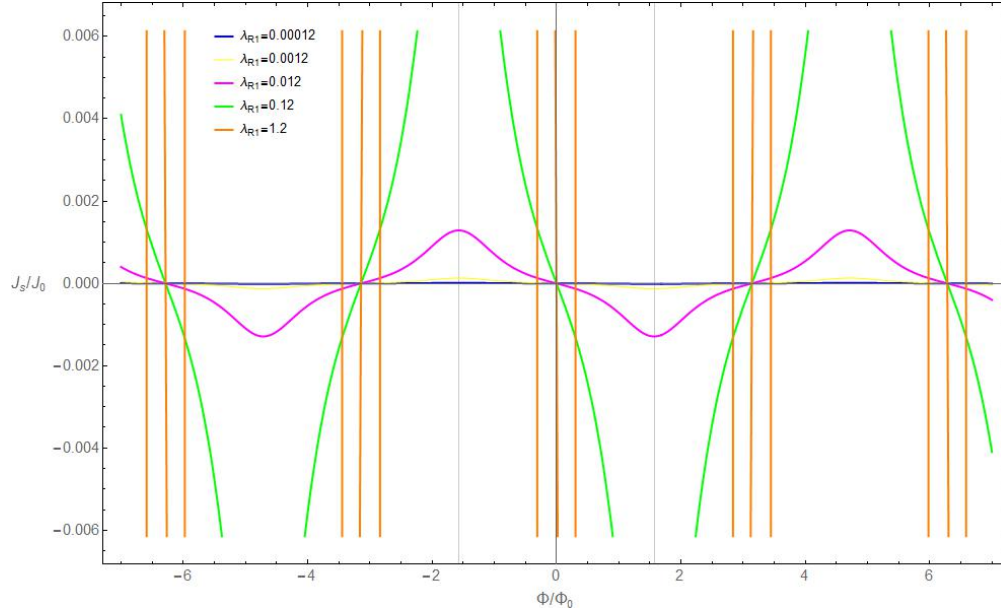


Figura 4.49: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable, EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$ a temperatura $K_B T = 0$.

Al realizar la integración numérica de la densidad de corriente de espín observamos en la gráfica 4.50 como se degrada la corriente para dos órdenes de magnitud. Por otro lado vemos como la dispersión afecta la forma de la corriente. Observamos mínimos y máximos de corriente, en la cual para valores cercanos a enteros la degradación es menor, protegiendo a la corriente contra cambios de temperatura. Se observa mayor degradación para valores alrededor de semi-enteros del flujo magnético.

2. Entrada $+-$:

$$J_{sy}^{+-} = -\frac{2t^2 \sin 2\phi \left((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) + 2t^2 (\cos 2\phi - 1) + \omega^2 \right)}{(e^{\beta\omega} + 1) \left((\omega^2 + (\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2))^2 + 6t^4 + 4t^2 \cos 2\phi \left((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2 \right) - 4t^2 \left((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2 \right) \right)}, \quad (4.48)$$

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

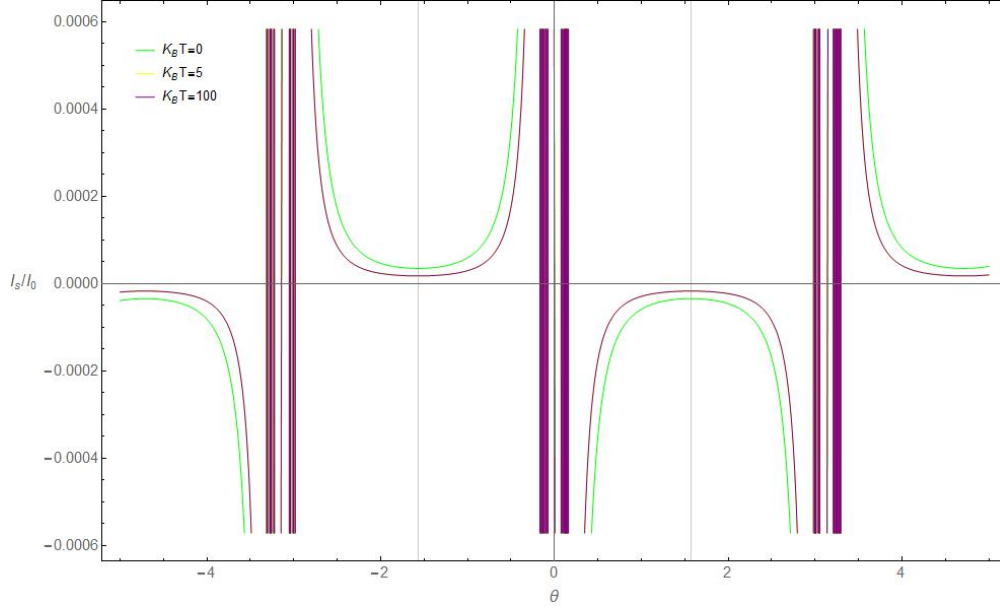


Figura 4.50: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$, Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ y Rashba intrínseco $\lambda_{R2} = 0,007$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Estudiaremos sólo la entrada $y + -$, ya que si observamos la expresión $y - +$ notamos que es el negativo de la expresión (4.47).

En la gráfica de la figura 4.51 observamos que la densidad de corriente queda dominada por el acoplamiento EO extrínseco de Rashba, ya que el aumento de la brecha entre las bandas de valencia y conducción impide que los niveles de energía más profundos aparezcan en la corriente, obteniendo el mismo comportamiento que la densidad de corriente de espín para el caso cuando sólo se tiene acoplamiento EO Rashba extrínseco.

En la gráfica de la figura 4.52 si fijamos el parámetro EO Rashba extrínseco a $\lambda_{R1} = 0,12$, observamos que la densidad de corriente no es alterada frente a cambios en el parámetro EO intrínseco. Únicamente se observa una disminución en la amplitud de la densidad cuando el parámetro EO intrínseco es mayor comparado con el parámetro EO Rashba extrínseco. Como analizamos anteriormente este comportamiento se debe a la forma en que actúan ambos acoplamientos en el término $(4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2)$ de la expresión (4.48).

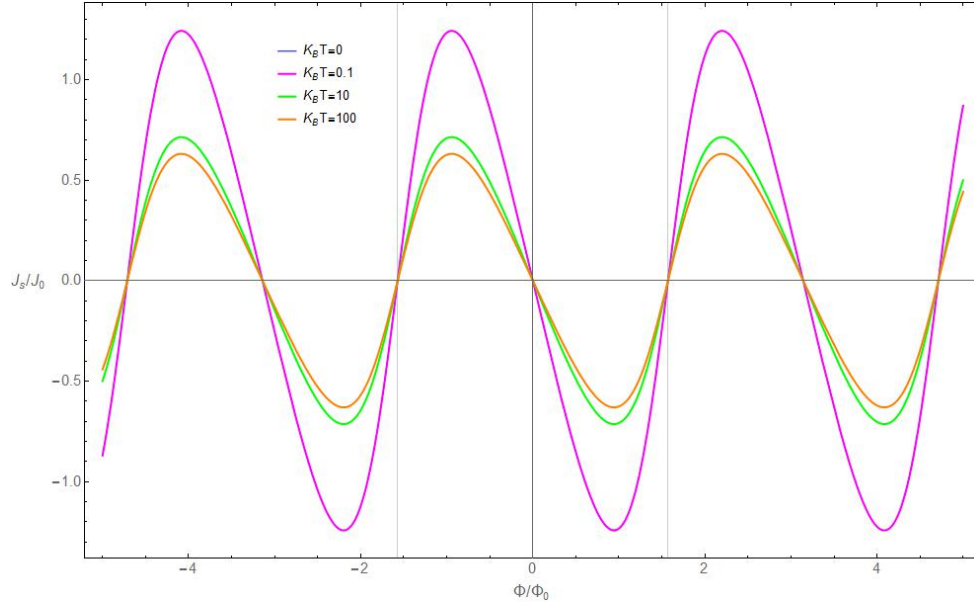


Figura 4.51: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

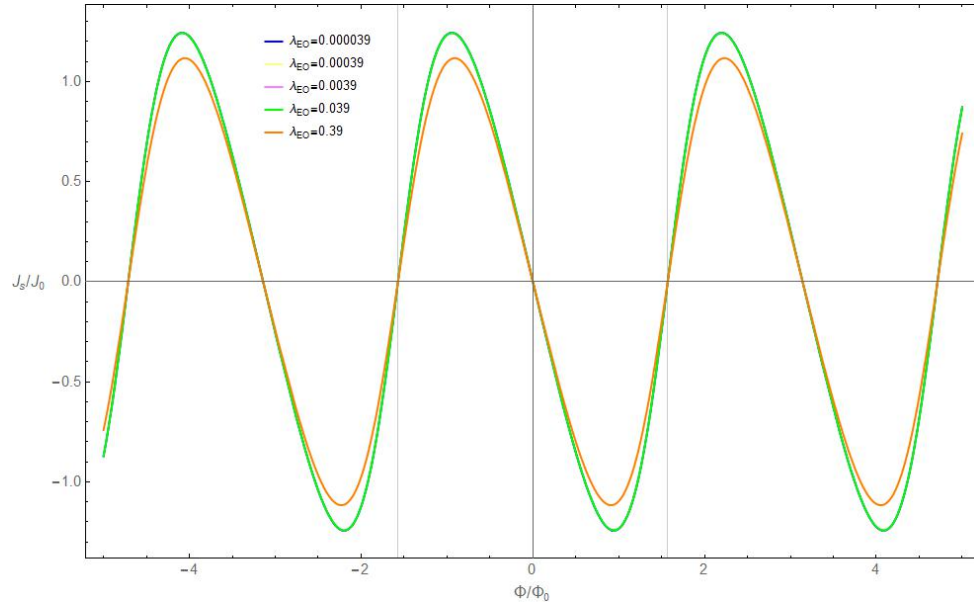


Figura 4.52: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$.

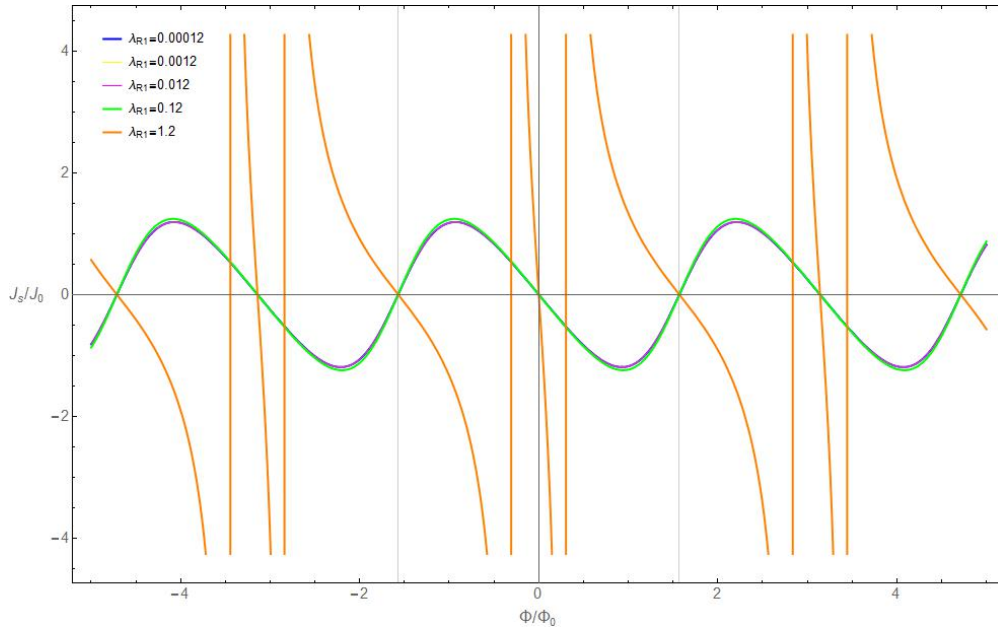


Figura 4.53: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$.

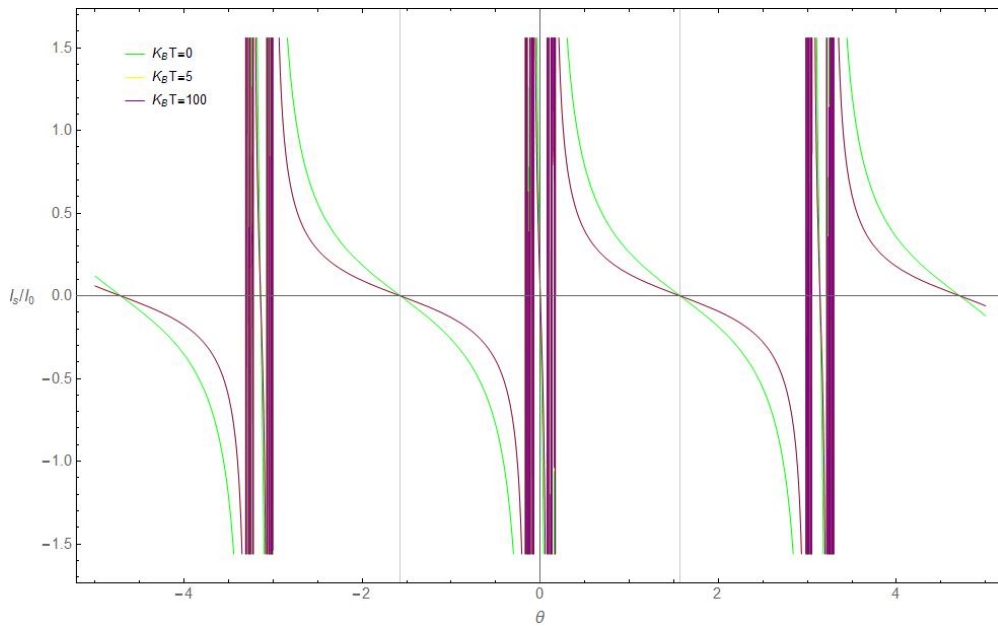


Figura 4.54: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores cercanos a la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$.

Dejando fijo ahora el parámetro EO intrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y variando el parámetro Rashba extrínseco, vemos en la gráfica de la figura 4.53 que la corriente es insensible frente a cambios del parámetro de Rashba extrínseco. En la gráfica de la corriente de espín de la figura 4.54 observamos que degrada de la forma esperada en temperatura. Se tiene entonces el mismo comportamiento que la corriente de carga sólo con acoplamiento Rashba extrínseco y con ambas interacciones.

Componente $\hat{z}$

1. Entrada ++ :

$$J_{sz}^{++} = \frac{1}{(e^{\beta\omega} + 1)} \left[\frac{2it^2 \sin 2\phi - \lambda_{EO} \sigma (\lambda_{EO} \sigma + i\omega)}{(\lambda_{EO} \sigma + i\omega)^2 + 2t^2 (\cos 2\phi + 1)} + \frac{\lambda_{EO} \sigma (-\lambda_{EO} \sigma + i\omega) - 2it^2 \sin 2\phi}{(\lambda_{EO} \sigma - i\omega)^2 + 2t^2 (\cos 2\phi + 1)} + \frac{2\lambda_{EO}^2 ((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + 2t^2 (1 - \cos 2\phi) + \omega^2)}{((\lambda_{EO}^2 - 4\lambda_{R1}^2) + \omega^2)^2 + 2t^4 \cos 4\phi + 6t^4 + 4t^2 \cos 2\phi ((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) - 2t^2 + \omega^2) - 4t^2 ((4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2) + \omega^2)} \right]. \quad (4.49)$$

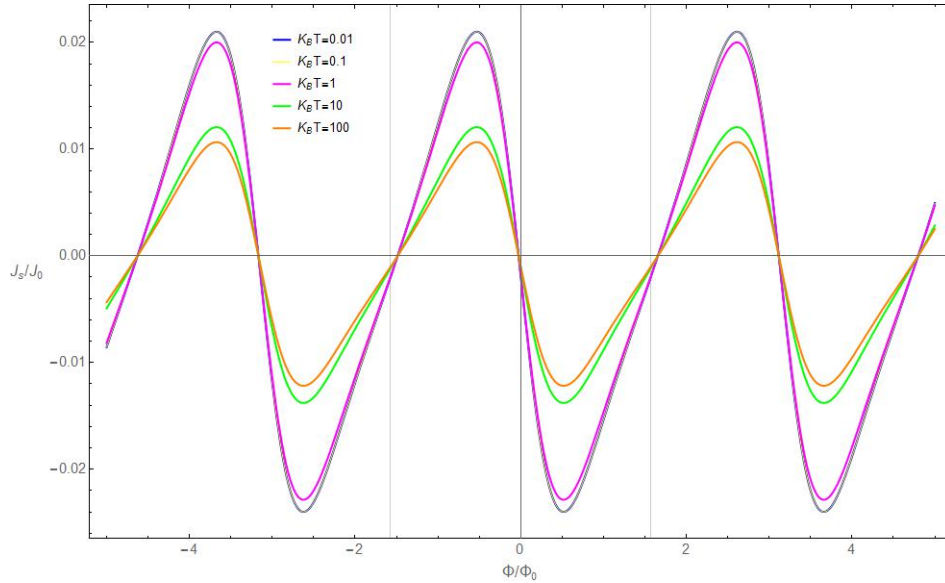


Figura 4.55: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, variando la temperatura hasta $K_B T = 100$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

Se observa en la gráfica de la figura 4.55 como la densidad decae para cambios de un orden de magnitud en temperatura. En la gráfica de la figura 4.56 fijamos el valor del parámetro EO Rashba extrínseco a $\lambda_{R1} = 0,12$ y variamos el parámetro intrínseco. Notamos que para valores pequeños la intensidad aumenta poco, hasta alterar la forma de la curva de una manera pronunciada para valores iguales en magnitud al parámetro EO Rashba extrínseco.

Fijando el valor del parámetro EO intrínseco a $\lambda_{EO} = 0,039$ y variando el parámetro Rashba extrínseco observamos un caso similar al de las componentes anteriores, en donde la densidad de corriente no es afectada notablemente cuando se varía la magnitud del parámetro de acoplamiento.

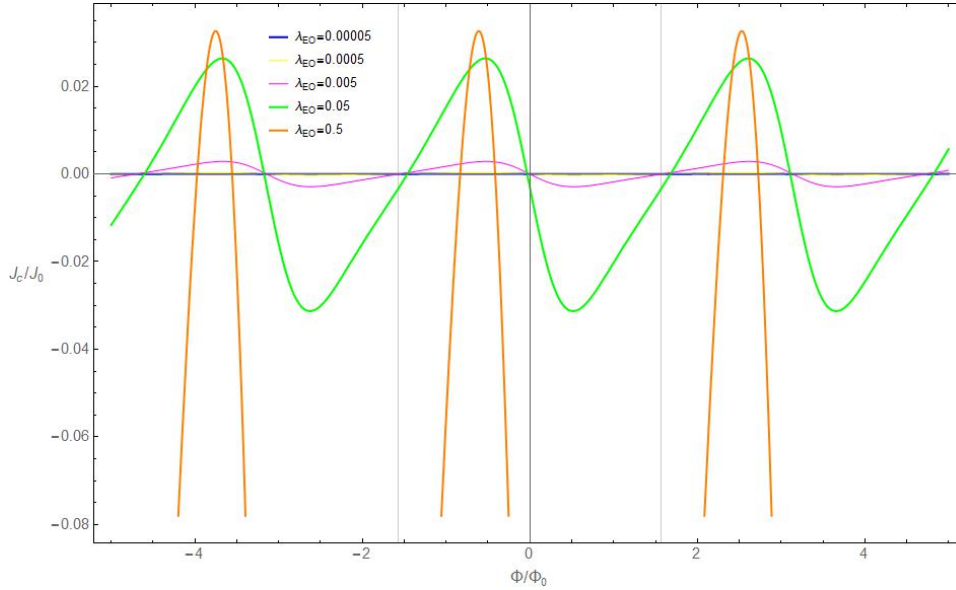


Figura 4.56: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco variable y acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$ a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

Integrando de forma numérica la densidad de corriente de espín para valores por debajo de la energía de Fermi, obtenemos la gráfica de la figura 4.58 con polarización positiva $\sigma = 1$. Se observa una degradación en temperatura esperada. Los picos alrededor de cero y en intervalos de flujo pares se deben a ruido producido en la integración. Por último, para el caso de polarización negativa en espín se tiene la

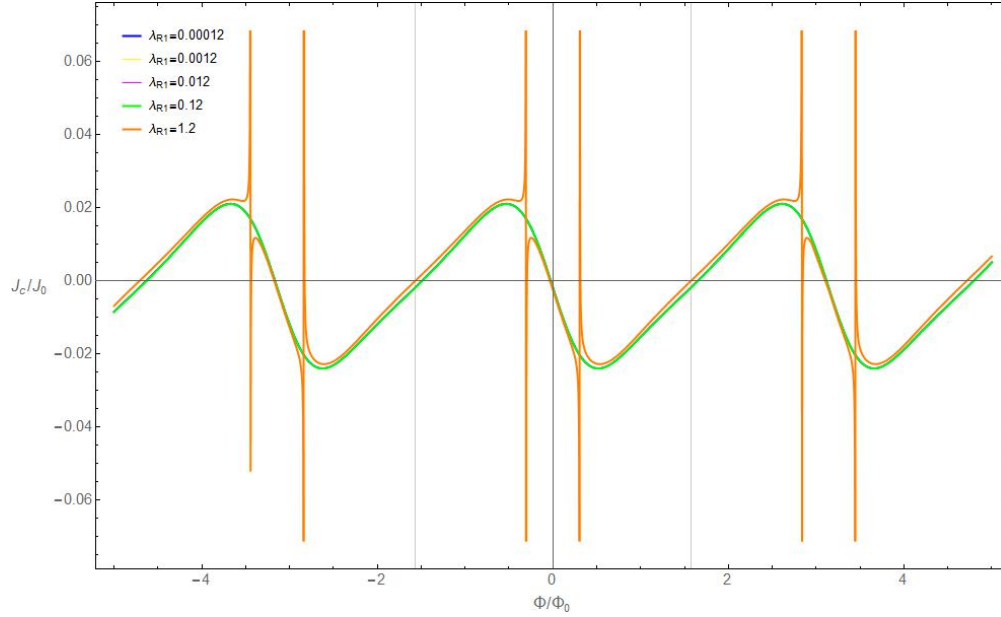


Figura 4.57: Gráfica de densidad de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo Rashba extrínseco variable y acoplamiento EO intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ a temperatura $K_B T = 0$ y polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

gráfica de la figura 4.59, el efecto es el mismo, pero la corriente es máxima para valores de flujo donde la corriente es mínima para el caso anterior.

2. Entrada $+-$:

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

3. Entrada $-+$:

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

4. Entrada $--$:

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

Es de importancia hacer notar que cada componente de la densidad de corriente de espín salvo la componente $y++$ y $y--$ se comportan de manera similar al caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios en presencia de acoplamiento EO intrínseco y Rashba extrínseco.

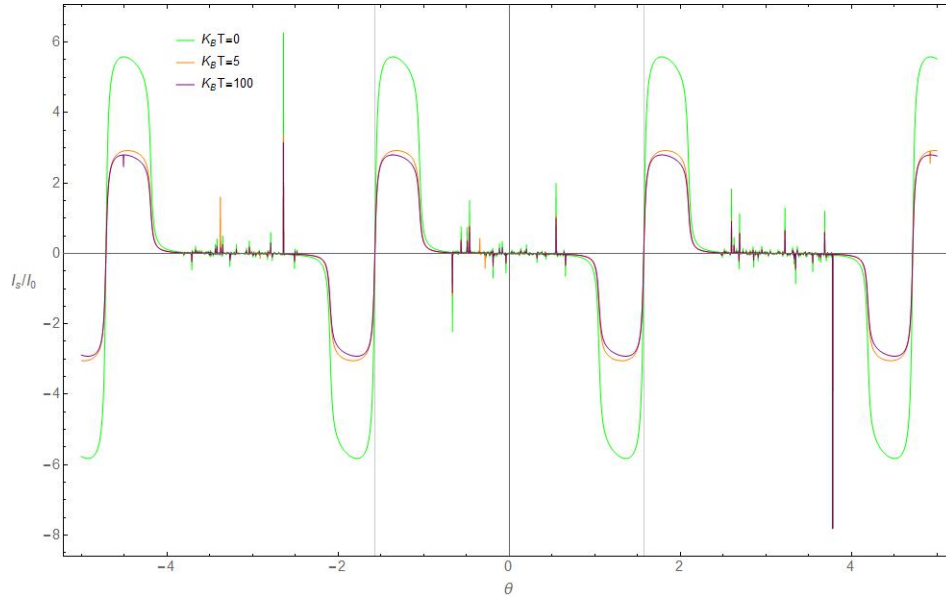


Figura 4.58: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización positiva de espín $\sigma = 1$.

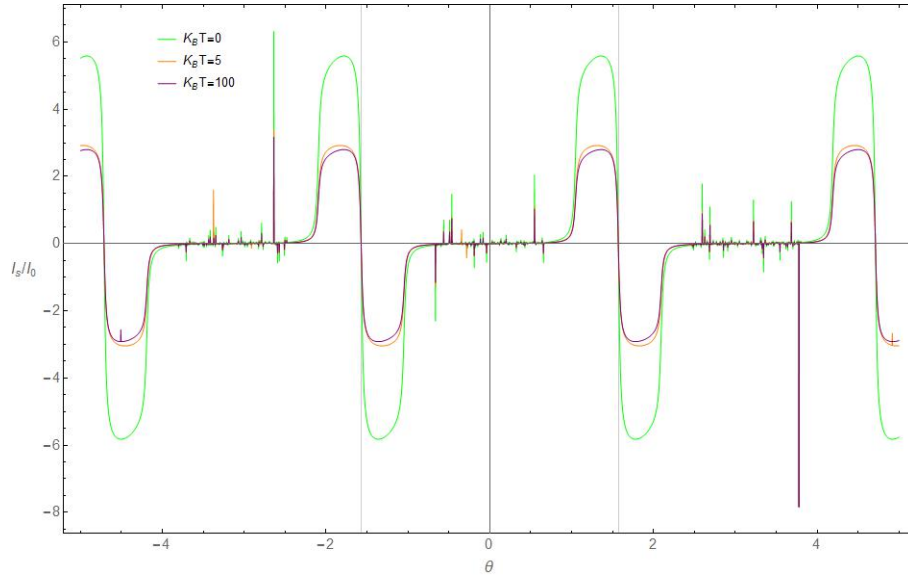


Figura 4.59: Gráfica de corriente de espín de un anillo unidimensional basado en siliceno en función del flujo magnético con acoplamiento EO tipo intrínseco $\lambda_{EO} = 0,039$ y Rashba extrínseco $\lambda_{R1} = 0,12$, integrando a valores por debajo de la energía de Fermi y variando la temperatura hasta $K_B T = 100$, con polarización negativa de espín $\sigma = -1$.

CONCLUSIONES.

En este trabajo estudiamos las corrientes persistentes de carga y de espín para un anillo unidimensional de cuatro sitios basado en siliceno con interacciones Espín-Órbita tipo intrínseca y Rashba extrínseca e intrínseca. Para el cálculo de las corrientes persistentes implementamos el formalismo de las funciones de Green en el equilibrio y la técnica de la ecuación de movimiento. Esta técnica es muy versátil, ya que a través de la función de Green menor es posible calcular cantidades físicas de importancia de una manera más sencilla, como lo son las corrientes persistentes, sin necesidad de caracterizar el material diagonalizando su Hamiltoniano. Es relevante hacer notar que para resolver el sistema de ecuaciones de movimiento acoplado se tomó la transformada de Fourier de las funciones de Green, para así representar la corriente en el espacio de frecuencias e inferir como debe ser el espectro de energía del sistema en las proximidades de la energía de Fermi.

Primero calculamos la corriente de carga en el anillo sin interacción Espín-Órbita. Al graficar la densidad de corriente en función del flujo magnético obtuvimos cambios abruptos de signo, que decaen con el aumento de la temperatura; estos puntos se deben corresponder con puntos en el espectro donde la derivada no es continua, los cuales pudiéramos identificar con los puntos donde se cruzan los niveles de energía correspondientes con cada estado. La corriente de carga también decae con el aumento de la temperatura. Para este caso la densidad de corriente y la corriente de carga se comportan de manera similar que el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios sin acoplamiento EO.

Realizamos los cálculos con acoplamiento EO intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco actuando de manera separada en el anillo. Sin embargo, para el caso con sólo acoplamiento EO Rashba intrínseco utilizamos el sistema de ecuaciones de movimiento proveniente del acoplamiento EO Rashba extrínseco, obteniendo una densidad de corriente que refleja ambos acoplamientos de Rashba. Comparando los resultados obtenidos para estos casos, observamos densidades de corriente similares, que decaen notablemente para aumentos de temperatura superiores a $K_B T = 10$. Al igual que en un anillo de grafeno con cuatro sitios, la presencia de un acoplamiento EO grande abre más la brecha entre la

banda de valencia y la banda de conducción, ocasionando que los electrones en los niveles poco profundos necesiten energías mayores para ascender a la banda de conducción, mientras que cambios pequeños en la temperatura no afectan la densidad de corriente, lo que significa que los niveles de energía que podrían contribuir con la corriente son más profundos en la banda de valencia, protegiéndolos así contra cambios de temperatura.

Al variar los parámetros de acoplamiento observamos comportamientos distintos. En el caso en que sólo se tiene interacción EO intrínseca, la densidad de corriente oscila con el flujo y se degrada al aumentar el valor del parámetro, comportamiento similar al caso de un anillo de grafeno en presencia de acoplamiento EO intrínseco. Para el caso en el que sólo se tiene interacción EO Rashba extrínseca el efecto es diferente, no se aprecia un cambio relevante de la densidad de corriente frente a cambios pequeños en el valor del parámetro de acoplamiento. Si variamos el acoplamiento EO Rashba intrínseco dejando fijo el valor de Rashba extrínseco para el caso cuando sólo se tiene ambas interacciones Rashba, tenemos una oscilación modulada en la densidad de corriente con el parámetro de Rashba intrínseco, por ejemplo para un valor cercano a -2 del flujo magnético el pico se degrada para un valor en el parámetro de acoplamiento $\lambda_{R2} = 0,07$, en el siguiente pico cercano a $3/2$ del flujo la corriente se degrada para un valor en el parámetro de acoplamiento $\lambda_{R2} = 0,7$, con un máximo de corriente de menor amplitud que el pico anterior. Este comportamiento se repite para los demás valores del flujo magnético. En todos los casos, para valores mayores del parámetro de acoplamiento EO se obtiene un comportamiento que converge a una corriente con oscilaciones típicas de un semiconductor.

Al realizar la integración numérica de la densidad de corriente, observamos para todos los casos que la corriente presenta discontinuidades para ciertos valores del flujo magnético. En estos valores es donde los niveles de energía que contribuyen a la corriente son los más superficiales, cercanos al nivel de Fermi, obteniéndose una corriente acotada entre par de picos que se degrada con el aumento de la temperatura. Para un anillo de grafeno se tiene el mismo comportamiento, ya que la corriente refleja una dispersión cuasi-lineal en el comportamiento de los electrones para valores cercanos a enteros impares del flujo magnético.

Para un anillo en el que se tiene interacciones EO tipo intrínseco y Rashba extrínseco e intrínseco, observamos que la expresión de la densidad de corriente de carga involucra dos términos, los cuales están dominados por el parámetro EO Rashba extrínseco. En uno de los términos, las interacciones intrínseca y Rashba extrínseca actúan juntas como una

sola interacción de la forma $4\lambda_{R1}^2 - \lambda_{EO}^2$, y en el otro término se refleja todas las interacciones EO. La separación de la brecha entre las bandas de valencia y conducción debido al acoplamiento EO Rashba extrínseco impide que los niveles de energía más profundos en el espectro contribuyan a la corriente. Por lo tanto, notamos en los gráficos que prevalece el efecto del parámetro de Rashba extrínseco en el comportamiento de la densidad de corriente y de la corriente de carga en el anillo. Si comparamos con el caso de un anillo de grafeno con cuatro sitios, también los acoplamientos EO intrínseco y Rashba extrínseco proceden como una sola interacción de la misma forma como en el caso del siliceno, por lo tanto en la corriente de carga predomina el efecto del acoplamiento EO Rashba extrínseco.

En las corrientes de carga notamos que la presencia de los acoplamiento EO tipo intrínseco y Rashba suavizan los picos que se obtuvieron en la corriente sin acoplamiento EO.

Siguiendo el mismo procedimiento, realizamos los cálculos para las corrientes persistentes de espín para cada componente vectorial y entrada matricial. Para la componente $\hat{x}$ tenemos que en todos los casos la diagonal es cero, mientras que las entradas antidiagonales son iguales, en la cual se suman ambas contribuciones de polarización de espín en la expresión de la densidad. En el caso de un anillo con sólo interacción EO intrínseca la densidad y la corriente de espín reflejan un comportamiento similar al caso de un anillo de grafeno ya que se degradan con la temperatura, mostrando máximos en regiones del flujo magnético donde la corriente toma electrones de los niveles de energía más superficiales, además ambas intensidades de corriente se encuentran desplazadas por encima de cero. En cambio, cuando sólo se tiene interacción EO tipo Rashba extrínseca e intrínseca la componente $\hat{x}$ se anula para todas las entradas, debido a la dependencia angular de la densidad; si se quiere observar esta componente es necesario agregar más sitios al anillo. Para el caso en el que se tiene interacciones EO tipo intrínseco y Rashba, observamos en la expresión de la densidad de corriente que no tiene ninguna relevancia el acoplamiento EO intrínseco de Rashba, a su vez observamos que la corriente posee una parte en la cual aparece únicamente el acoplamiento EO intrínseco, y otra parte en que los acoplamiento EO intrínseco y Rashba extrínseco se juntan como una sola interacción, con la misma forma que lo hacen en la densidad de corriente de carga. Si variamos el parámetro intrínseco la densidad de corriente para valores muy pequeños del parámetro se aproxima a cero, para luego pasar a una componente constante, hasta tener el comportamiento ondulatorio para valores mayores y comparables con el parámetro Rashba extrínseco. Este comportamiento se debe a que la corriente de espín es una superposición de corrientes de

carga con espines opuestos. Si la diferencia de estas corrientes no cancela completamente la componente asociada a la carga obtendremos un remanente, el cual se representa como un desplazamiento vertical en la corriente que es dependiente además del parámetro intrínseco. Si en cambio, aumentamos el parámetro de Rashba extrínseco observamos que la densidad de corriente de espín no refleja cambios notables al variar dicho parámetro. En la corriente de espín también prevalece el acoplamiento EO intrínseco ya que el comportamiento de la corriente presenta máximos por debajo de cero y cambios abruptos de signo. Como en la expresión de la densidad de corriente de espín no aparecen términos de acoplamiento Rashba intrínseco, la corriente de espín se comporta de manera similar al caso de un anillo de grafeno en presencia de interacciones EO intrínseca y Rashba extrínseca.

Para la componente $\hat{y}$ tenemos que para los casos con acoplamiento intrínseco y Rashba extrínseco separados, la diagonal es cero, y en la antidiagonal, una entrada es la negativa de la otra entrada. Observamos que la densidad y la corriente de espín en ambos casos presentan comportamientos similares a la corriente de carga en el siliceno y a la corriente de carga en un anillo de grafeno. En cambio, para el caso cuando sólo se tiene acoplamiento EO extrínseco e intrínseco de Rashba tenemos que la expresión de la antidiagonal no es afectada por el parámetro Rashba intrínseco, y en la diagonal, una entrada es la negativa de la otra, en donde la densidad presenta variaciones pronunciadas, para aumentos del parámetro de Rashba intrínseco como $\lambda_{R2} = 0,007$ la amplitud de la densidad aumenta considerablemente cambiando su forma. La corriente es robusta para variaciones en temperatura con mínimos por encima de cero y máximos por debajo de cero. Para un anillo con ambas interacciones, las entradas diagonales son equivalentes, la cual es la única componente en donde se refleja el acoplamiento EO intrínseco de Rashba, mientras que la antidiagonal, una entrada es la negativa de la otra y la corriente de espín es similar al comportamiento de la corriente de carga en el siliceno y a la corriente de carga en un anillo de grafeno.

Para la componente $\hat{z}$ la antidiagonal es cero, y en la diagonal, una entrada es la negativa de la otra, por lo que se tomó en cuenta una sólo polarización de espín. En el caso de un anillo con sólo interacción EO intrínseca la densidad de corriente se encuentra por encima cero para valores muy grandes del parámetro de acoplamiento. Al igual que en un anillo de grafeno, para altas temperaturas la degradación de la corriente satura y para valores de temperatura de dos órdenes de magnitud se degrada poco la corriente en las proximidades de valores pares del flujo magnético. Esto se debe a un efecto de protección en la corriente, donde los niveles de energía que contribuyen están muy por

debajo del nivel de Fermi, ofreciendo pocos electrones a la corriente. En el caso de un anillo en presencia de interacción EO Rashba extrínseca e intrínseca la componente $\hat{z}$ se anula para todas las entradas. Para el caso en el que se tiene interacciones tipo intrínseca y Rashba, la densidad de corriente tiene un comportamiento similar al caso de un anillo de grafeno, como se observó en la componente $\hat{x}$ prevalece el acoplamiento EO intrínseco y desaparece el acoplamiento EO intrínseco de Rashba. La corriente se degrada con la temperatura presentando máximos y mínimos con cambios de signo en la amplitud en las proximidades de valores pares del flujo magnético.

Apéndice A

Cálculos.

A.1. Operadores de creación y aniquilación.

Operadores de creación y aniquilación en el sitio n :

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

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

A.2. Términos de acoplamiento Espín-Órbita en el siliceno.

A.2.1. Término de acoplamiento Espín-Órbita intrínseco.

$$\begin{aligned} i\lambda_{EO} \sum_{n\sigma} \nu_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma}, \\ \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{S}_z \mathbf{c}_{n+2\sigma} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & -\mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & -\mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

El término de acoplamiento EO intrínseco queda entonces:

$$i\frac{\lambda_{EO}}{2} \sum_{n\sigma} \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}. \quad (\text{A.4})$$

A.2.2. Término de acoplamiento Espín-Órbita extrínseco de Rashba.

$$i\lambda_{R1} \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_n)_z \mathbf{c}_{n+1\sigma} = i\lambda_{R1} \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_{12})_z \mathbf{c}_{n+1\sigma} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_{21})_z \mathbf{c}_{n\sigma} \right),$$

donde

$$\vec{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} (\sigma_x \hat{x} + \sigma_y \hat{y} + \sigma_z \hat{z}),$$

y los vectores que van de la posición de un átomo a un primer vecino son:

$$\vec{d}_{n,n+1} = -a\hat{\theta}, \quad \vec{d}_{n+1,n} = a\hat{\theta}, \quad (\text{A.5})$$

cuyos vectores unitarios son:

$$\hat{d}_{n,n+1} = -\hat{\theta}, \quad \hat{d}_{n+1,n} = \hat{\theta}, \quad (\text{A.6})$$

$$\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (-\sigma_x \cos \theta - \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n+1\sigma} + \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger (\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n\sigma} \right),$$

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

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

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

Finalmente:

$$\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} - \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right). \quad (\text{A.7})$$

A.2.3. Término de acoplamiento Espín-Órbita intrínseco de Rashba.

$$-i\lambda_{R2} \sum_n \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{h}_n)_z \mathbf{c}_{n+2\sigma} = -i\lambda_{R2} \sum_n \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{h}_{13})_z \mathbf{c}_{n+2\sigma} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger (\vec{\mathbf{S}} \times \hat{d}_{31})_z \mathbf{c}_{n\sigma} \right),$$

donde los vectores que van de la posición de un átomo a un segundo vecino son:

$$\vec{h}_{n,n+2} = -2a\hat{\theta}, \quad \vec{h}_{n+2,n} = 2a\hat{\theta}, \quad (\text{A.8})$$

cuyos vectores unitarios son:

$$\hat{h}_{n,n+2} = -\hat{\theta}, \quad \hat{h}_{n+2,n} = \hat{\theta}, \quad (\text{A.9})$$

quedando entonces

$$\begin{aligned}
-\frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} \left(\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger (-\boldsymbol{\sigma}_x \cos \theta - \boldsymbol{\sigma}_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n+2\sigma} + \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger (\boldsymbol{\sigma}_x \cos \theta + \boldsymbol{\sigma}_y \sin \theta) \mathbf{c}_{n\sigma} \right), \\
\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{c}_{n+2\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_y \mathbf{c}_{n+2\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n+2\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= i \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_x \mathbf{c}_{n\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_y \mathbf{c}_{n\sigma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n\downarrow} \end{pmatrix} = i \begin{pmatrix} \mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} \\
&= i \begin{pmatrix} 0 & -\mathbf{c}_{n+2\uparrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\downarrow} \\ \mathbf{c}_{n+2\downarrow}^\dagger \mathbf{c}_{n\uparrow} & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)}.
\end{aligned}$$

Finalmente:

$$-\frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} - \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right). \quad (\text{A.10})$$

A.3. Valor medio del conmutador $[\mathbf{H}, \mathbf{x}]$ y definición de las Funciones de Green.

$$\begin{aligned}
[\mathbf{H}, \mathbf{x}] &= \underbrace{t \sum_n e^{i\phi} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma}}_A - \underbrace{t \sum_n e^{-i\phi} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n\sigma}}_B + \underbrace{i\lambda_{EO} \sum_n \nu_n \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2\sigma}}_C + \\
&\quad - \underbrace{\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)}}_D - \underbrace{\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)}}_E + \\
&\quad + \underbrace{i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)}}_F + \underbrace{i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)}}_G. \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

1. Valor medio de A

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

Definimos la función de Green:

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

luego:

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

y finalmente:

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

2. Valor medio de B

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

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

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

3. Valor medio de C

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

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

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

4. Valor medio de D

$$\langle D \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

$$\langle D \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\theta\sigma} G_{n+1(-\sigma),n\sigma}^<(0).$$

5. Valor medio de E

$$\langle E \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

$$\langle E \rangle = -\frac{i}{2} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\theta\sigma} G_{n(-\sigma),n+1\sigma}^<(0).$$

6. Valor medio de F

$$\langle F \rangle = i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

$$\langle F \rangle = i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\theta\sigma} G_{n+2(-\sigma),n\sigma}^<(0).$$

7. Valor medio de G

$$\langle G \rangle = i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\theta\sigma} \langle \mathbf{c}_{n+2\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \rangle.$$

Definimos:

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

luego:

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

y finalmente:

$$\langle G \rangle = i\lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\theta\sigma} G_{n(-\sigma),n+2\sigma}^<(0).$$

A.4. Anticonmutador de la corriente de espín.

El anticonmutador del vector $\vec{S}$ con la ecuación (A.11) está dado por:

$$\bullet \left\{ \vec{S}, A \right\} = \frac{t}{2} \sum_n e^{i\phi} \left(\left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} \right\} \hat{x} + \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} \right\} \hat{y} + \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1\sigma} \right\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

luego nos queda:

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

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

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

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

luego nos queda:

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

$$\bullet \{\vec{S}, C\} = \frac{i\lambda_{EO}}{2} \sum_n \nu_n \left(\{\sigma_x, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{x} + \{\sigma_y, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{y} + \{\sigma_z, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

$$\begin{aligned} \{\sigma_x, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \sigma_x, \\ \{\sigma_y, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} \sigma_y, \\ \{\sigma_z, \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma}\} &= 2\mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2\sigma} I_{2 \times 2}, \end{aligned}$$

luego nos queda:

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

$$\bullet \left\{ \vec{S}, D \right\} = -\frac{i}{4} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right\} \hat{x} + \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right\} \hat{y} + \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} \right\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

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

luego nos queda:

$$\left\{ \vec{S}, D \right\} = -\frac{i}{4} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_\sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_\sigma \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+1(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

$$\bullet \left\{ \vec{S}, E \right\} = -\frac{i}{4} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{x} + \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{y} + \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

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

luego nos queda:

$$\left\{ \vec{S}, E \right\} = -\frac{i}{4} \lambda_{R1} \sum_n e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_\sigma \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_\sigma \sigma \mathbf{c}_{n+1\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

$$\bullet \left\{ \vec{S}, F \right\} = \frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} \hat{x} + \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} \hat{y} + \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} \hat{z} \right),$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

$$\begin{aligned} \left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} &= \sum_\sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} &= i \sum_\sigma \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n\sigma}^\dagger \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} \right\} &= 0, \end{aligned}$$

luego nos queda:

$$\left\{ \vec{S}, F \right\} = \frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n+2(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

$$\bullet \left\{ \vec{S}, G \right\} = \frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{x} + \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{y} + \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} \hat{z} \right)$$

resolviendo por separado para cada componente, obtenemos:

$$\begin{aligned} \left\{ \sigma_x, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= \sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \sigma_y, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2}, \\ \left\{ \sigma_z, \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} \right\} &= 0, \end{aligned}$$

luego nos queda:

$$\left\{ \vec{S}, G \right\} = \frac{i}{2} \lambda_{R2} \sum_{A,B} \sum_n \mu_{(A,B)} e^{-i\sigma\theta} \left(\sum_{\sigma} \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{x} + i \sum_{\sigma} \sigma \mathbf{c}_{n+2\sigma}^{\dagger} \mathbf{c}_{n(-\sigma)} I_{2 \times 2} \hat{y} \right).$$

Bibliografía

- [1] K. Takeda y K. Shiraishi. Theoretical possibility of stage corrugation in Si and Ge analogs of graphite. 10.1103/PhysRevB.50.14916:1–3, 1994.
 - [2] G. Guzmán-Verri y L.C. Lew Yan Voon. Electronic structure of silicon-based nanostructures. 10.1103/PhysRevB.76.075131:1–5, 2007.
 - [3] M. Ezawa. Topological Physics of Honeycomb Dirac Systems. pages 38–40, 2016.
 - [4] P. Vogt y colaboradores. Silicene: Compelling Experimental Evidence for Graphene-like Two-Dimensional Silicon. 10.1103/PhysRevLett.108.155501:1–3, 2012.
 - [5] M. Büttiker y colaboradores. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. 96, Issue 7:365–367, 1983.
 - [6] Y. Aharonov y D. Bohm. Significance of Electromagnetic Potentials in the Quantum Theory. 10.1103/PhysRev.115.485:2–3, 1959.
 - [7] W. Nolting. Fundamentals of Many-body Physics. pages 107–117, 2009.
 - [8] C. Liu y colaboradores. Low-energy effective Hamiltonian involving spin-orbit coupling in Silicene and Two-Dimensional Germanium and Tin. 10.1103/PhysRevB.84.195430:2–9, 2011.
 - [9] N. Drummond y colaboradores. Electrically tunable band gap in silicene. 10.1103/PhysRevB.85.075423:1–5, 2012.
 - [10] J. Fuchs y M. Goerbig. Introduction to the physical properties of graphene. pages 22–25.
 - [11] M. Ezawa. A topological insulator and helical zero mode in silicene under an inhomogeneous electric field. arXiv:1201.3687 [cond-mat.mes-hall]:3–5, 2012.
 - [12] R. Eisberg y R. Resnick. Física cuántica: Átomos, moléculas, sólidos, núcleo y partículas. 220, 4598:319–419, 2011.
-

- [13] V. Torres. Efectos topológicos y cuantización en corrientes de espín. pages 17–20, 2010.
 - [14] A. Manchon. New Perspectives for Rashba Spin-Orbit Coupling. arXiv:1507.02408 [cond-mat.mes-hall]:2–8, 2015.
 - [15] F. Marín. Keldysh Elemental. 3.1:3–59, 2008.
 - [16] W. Shanks. Persistent Currents in Normal Metal Rings. arXiv:1112.3395v1 [cond-mat.mes-hall]:6–10, 2011.
 - [17] A. de Araújo. The Aharonov-Bohm Effect and Persistent Currents in Quantum Rings. pages 4–10, 2008.
 - [18] J. Splettstoesser y colaboradores. Persistent current in ballistic mesoscopic rings with Rashba spin-orbit coupling. arXiv:0305310v1 [cond-mat.mes-hall]:2–6, 2003.
 - [19] S. Maiti y colaboradores. Persistent charge and spin currents in a quantum ring using Green’s function technique: Interplay between magnetic flux and spin-orbit interactions. arXiv:1401.0262 [cond-mat.mes-hall]:176–177, 2014.
 - [20] 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.
-