



UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA
FACULTAD DE CIENCIAS EXACTAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

Tesis presentada para optar al grado de Doctor de la Facultad de Ciencias
Exactas - Área Física

Estudio sobre un modelo efectivo para la descripción del Grafeno

Lic. Mariela N. Nieto

DIRECTOR: PROF. DR. HORACIO A. FALOMIR
CO-DIRECTOR : DR. PABLO A. GONZÁLEZ PISANI

Diciembre 2015
La Plata, Buenos Aires - Argentina

Resumen

Esta tesis doctoral tuvo como objetivo la construcción de un modelo efectivo para la descripción del grafeno y el estudio de sus posibles aplicaciones a diversos problemas de interés relacionados con este nuevo material.

El modelo aquí estudiado es inferido a partir de un Hamiltoniano no relativista para partículas confinadas a un plano, el cual es modificado mediante una deformación no abeliana del álgebra de Heisenberg de sus variables dinámicas.

La idea de un espacio tiempo no-conmutativo no es moderna, en efecto, probablemente el primer ejemplo de este planteamiento haya sido discutido por L. D. Landau en 1930. Sin embargo con el advenimiento de teoría de cuerdas ha resurgido un creciente interés por estos espacios y desde entonces, las teorías de campos no-conmutativas han sido objeto de estudio en varios campos tanto en Matemática, Física Teórica como en Fenomenología.

En este contexto, las ideas referidas a espacios no conmutativos han estimulado la construcción de nuevos modelos en Mecánica Cuántica. Estos espacios también resultan de interés para la Materia Condensada. En efecto, es posible describir el problema de los niveles de Landau en térmi-

nos de un espacio no-conmutativo bidimensional. En los últimos años han surgido modelos basados en una deformación no abeliana del álgebra de Heisenberg, que puede ser realizada a través de un shift que relacione las variables dinámicas con el *spin*. Cabe destacar, no obstante, que no se ha tratado de estudiar los efectos sobre nuestro modelo de pequeñas perturbaciones debidas a la no conmutatividad en el espacio de fase.

La modificación del álgebra de Heisenberg considerada en esta tesis, que pone en juego al *pseudo-spin* (grado de libertad que distingue a las dos subredes triangulares que conforman el cristal hexagonal del grafeno) conduce a un Hamiltoniano que, además de los términos lineales que se emplean usualmente para la descripción de sus fluctuaciones en las inmediaciones de los *puntos de Dirac* de su relación de dispersión, agrega términos cuadráticos que simulan la contribución de sitios segundos vecinos en el modelo de ligadura fuerte. Este hecho distingue nuestro modelo efectivo del modelo pseudo relativista de uso común en los estudios sobre este material.

Uno de los aspectos más interesantes del grafeno es que sus excitaciones de bajas energías pueden ser descritas como estados quirales no masivos de una teoría fermiónica pseudo-relativista, dando así lugar a una relación de dispersión lineal en el cuasi-momento, válida a bajas energías, donde la velocidad de la luz es reemplazada por la *velocidad de Fermi*, $v_F \approx 10^{-3}c$. De ese modo, el Lagrangiano que describe esas excitaciones en presencia de un campo magnético uniforme y perpendicular al plano del grafeno es similar al de la QED para fermiones sin masa. Una característica distintiva de este material es que presenta un *Efecto Hall Cuántico Entero Anómalo*, mostrando valores *semienteros* del factor de llenado. En el marco de nuestro modelo, este efecto será explicado como consecuencia de los términos cuadráticos, antes mencionados, que incluye nuestro Hamiltoniano efectivo.

En resumen, en esta tesis se estudia el Hamiltoniano asociado al movimien-

to de una partícula no relativista de masa m y carga e que se mueve sobre un plano, mínimamente acoplada a un campo electromagnético tridimensional externo y al equivalente de un *campo magnético no abeliano* uniforme en el espacio de pseudo-espín, implementado mediante variables dinámicas que satisfacen una deformación no abeliana del álgebra de Heisenberg.

A continuación se detallan los contenidos de los capítulos que componen esta tesis:

- Introducción

En este capítulo se desarrollan los antecedentes en el tema y se establece el objetivo de la presente tesis.

- Capítulo 1

Este capítulo contiene el punto central de esta tesis, en él se estudia al modelo efectivo en presencia de un campo magnético uniformemente constante y perpendicular al plano sobre el que se mueve la partícula. En este contexto se resuelve el problema de autovalores hallando el espectro del Hamiltoniano, y se calcula la Conductividad Hall utilizando herramientas provistas por la Geometría Espectral y la Teoría Cuántica de Campos. Para ello se ha empleado la función $\zeta(s)$ asociada al operador cuyo *determinante* define la función de partición del sistema. También se ha considerado el efecto sobre el espectro del Hamiltoniano de perturbaciones debidas a términos que dan cuenta de la anisotropía de la red o de la presencia de campos eléctricos adicionales.

- Capítulo 2

En este capítulo se estudia el comportamiento del modelo efectivo sometido a *condiciones externas*, correspondientes a la introducción de un flujo singular o su limitación a una región con borde.

En primer lugar se estudia al modelo sometido a un campo magnético uniformemente constante y un flujo singular de Bohm-Aharonov en

el origen, ambos perpendiculares al plano sobre el que se mueve la partícula. La motivación de este problema está basada en la posibilidad de modelar, de esa manera, la presencia de defectos topológicos en la red de grafeno, debido a la sustitución de un hexágono en la red cristalina por un pentágono, que modifican las propiedades globales de la red.

Por último, dado que el modelo lineal de grafeno en el plano infinito no muestra un gap de energías, existen numerosos estudios que consideran la posibilidad de abrir y controlar un gap al considerar muestras de tamaño finito. Dado que nuestro modelo efectivo en todo el plano y en presencia de un campo magnético perpendicular al mismo muestra un gap de tamaño proporcional al campo externo, también hemos considerado el comportamiento de nuestro sistema confinado a un disco de radio R , analizando condiciones de contorno que excluyen la existencia de modos cero.

- Conclusiones

Como su nombre lo indica, este capítulo contiene las conclusiones de la tesis.

*Dedicado a mis padres,
quienes supieron ser mi incondicional soporte.*

Agradecimientos

Quisiera agradecer primeramente a la Universidad Nacional de La Plata

A Horacio

A Pablo

A Mariel

A Gaby en especial

A mis viejos y hermanos

A mis amigos, en especial a Ceci y a Arles, a Yami a Analisa

A mi amor

Índice

Introducción	1
Lista de Figuras	1
1. Grafeno y una Cuantización no abeliana	8
1.1. Introducción	8
1.2. Nuestro Modelo	9
1.2.1. El caso libre	13
1.2.2. Campo magnético constante perpendicular al plano .	16
1.3. La relación del modelo con el Grafeno	25
1.3.1. Contribución del segundo punto de Dirac	35
1.4. La conductividad Hall	37

1.4.1. Cálculo de la Conductividad Hall para nuestro modelo	42
1.5. Término anisótropo en la relación de dispersion del grafeno tratado perturbativamente	52
1.6. Campo magnético y eléctrico cruzados	57
2. Aplicaciones de nuestro Modelo	60
2.1. Introducción	60
2.2. Potencial singular del tipo Bohm-Aharonov	63
2.3. Problema en el Disco	78
Conclusiones	96
Bibliografía	101

Introducción

La idea de un espacio tiempo no-conmutativo no es moderna [1], en efecto, probablemente el primer ejemplo de este planteamiento haya sido discutido por L. D. Landau en 1930 [2]. Sin embargo con el advenimiento de teoría de cuerdas ha resurgido un creciente interés por estos espacios [3] y desde entonces, las teorías de campos no-conmutativas han sido objeto de estudio en varios campos tanto en Matemática, Física Teórica [4–7] como en Fenomenología [8].

La ruptura de la conmutatividad de los operadores de posición y su correspondiente representación del álgebra no-conmutativa de las coordenadas espacio-temporales han sido estudiadas en [9]. Por otro lado, la no-conmutatividad en el álgebra de momentos puede relacionarse con la cuantización de estructuras Poissonianas deformadas, desarrolladas en [10], y consideradas como una clase de cuantización magnética [11, 12].

En este contexto, las ideas referidas a espacios no conmutativos han estimulado la construcción de nuevos modelos en Mecánica Cuántica [13], abriendo una nueva ruta para explorar, por ejemplo en superconductividad. Asimismo, un Hamiltoniano no masivo tipo Dirac en un espacio no-conmutativo generalizado y su relación con el grafeno ha sido considerado

en [14].

Recientemente han surgido modelos basados en una deformación no estándar del álgebra de Heisenberg, que puede ser realizada a través de un shift que relacione las variables dinámicas con el spin, tal y como puede verse en [15, 16].

En esta tesis consideraremos una deformación no estándar, como la anteriormente mencionada, para la construcción de un modelo efectivo para la descripción del grafeno.

Las últimas décadas han mostrado un rápido desarrollo de nuevas ideas surgidas de algunas áreas de la Física que han tenido fundamental importancia en el desarrollo de otras, produciendo así una suerte de retroalimentación entre los avances logrados en ellas. Un típico ejemplo de nuevo conocimiento logrado en la macrofísica con impacto en la microfísica ha sido la idea de ruptura espontánea de la simetría, surgido primeramente en la teoría de Landau para las transiciones de fase de segundo orden [17] y devenido en uno de los más importantes conceptos tanto en Materia Condensada [18], como en la Física Fundamental [19, 20]. Inversamente, las ideas surgidas del grupo de renormalización, primeramente desarrolladas en el estudio del problema de las divergencias ultravioletas en la Electrodinámica Cuántica, han sido de crucial importancia para resolver problemas de la Física de la Materia Condensada como ser el problema de Kondo [21–25]. El uso del efecto Mössbauer para corroborar la teoría de la relatividad general [26] nos provee un increíble ejemplo de la relación entre la Física de Materia Condensada, Física Nuclear y Gravedad. Otro ejemplo donde la Materia Condensada, la Teoría Cuántica de Campos y la Cosmología confluyen es en la superfluidez del Helio 3, ^3He , [27].

La reciente “construcción experimental” del grafeno abrió una nueva conexión entre la Teoría Cuántica de Campos y Materia Condensada [28–

32]. Esta conexión se establece ya que las excitaciones *a bajas energías* del grafeno pueden ser representadas como fermiones de Dirac no masivos en el plano, y ser descritos por medio de una teoría pseudo-relativista.

El Carbono es un elemento fundamental en la naturaleza y es la piedra angular sobre la cual se erige la Química Orgánica, puesto que presenta gran afinidad para formar enlaces químicos con otros átomos, incluyendo átomos del mismo elemento. Los sistemas basados en Carbono muestran peculiares propiedades físicas debidas a la flexibilidad que presentan sus enlaces y que dependen de la dimensionalidad de esas estructuras.

Entre los sistemas formados únicamente por átomos de Carbono el grafeno, alótropo bidimensional del Carbono, juega un importante rol puesto que es la base para el entendimiento de las propiedades electrónicas de los otros alótropos.

El grafeno es un material de un átomo de espesor constituido por átomos de Carbono dispuestos sobre los vértices de una red hexagonal (ver Figura 0.1), formando así una red (hexagonal) tipo “panal de abeja”. Un modo alternativo de entender esta red es interpretarla como un compuesto de anillos de Benceno al que se le han removido los átomos de Hidrógeno [33], de esta manera la cuarta valencia ahora es sustituida por otro anillo bencénico. Los Fullerenos (C_{60}) [34], una de las formas más estables del Carbono, son moléculas donde los átomos de Carbono están dispuestos esféricamente de modo que, desde el punto de vista macroscópico, pueden entenderse como objetos de dimensión cero con estados discretos de energía. Este alótropo ha sido objeto de estudio durante la década de los 90 y puede ser obtenido a partir del grafeno con tan solo introducir un pentágono en la red hexagonal, creando así un defecto de curvatura positivo. Además, podemos obtener Nanotubos de Carbono [35,36] enrollando al grafeno a lo largo de una dada dirección y reconectando los enlaces del Carbono, por tal motivo podemos pensar a los nanotubos de Carbono como objetos unidimensionales. Por otro lado el Grafito, es el alótropo más

conocido del Carbono a partir de la invención del lápiz en 1564, es un objeto tridimensional que se obtiene como resultado del apilamiento de láminas de grafeno acopladas débilmente entre sí por fuerzas de van de Waals. Por lo anteriormente dicho, concluimos que el grafeno puede entenderse como la base para la construcción de los distintos alótropos.

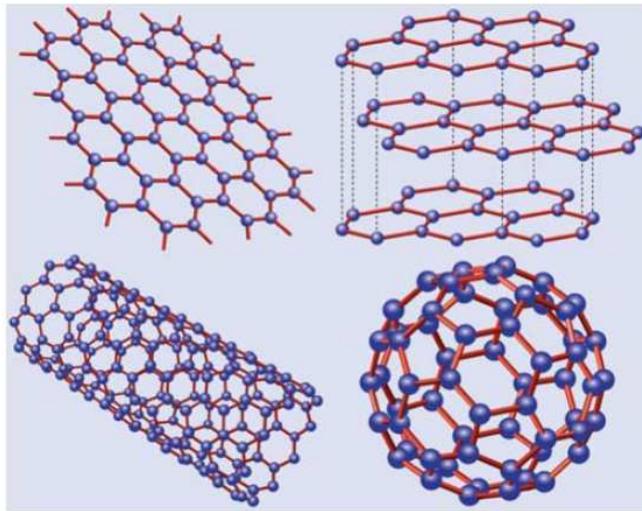


Figura 0.1: Los distintos alótropos del Carbono que pueden obtenerse a partir de una capa de grafeno [48].

Si bien la estructura de bandas del grafeno ya había sido estudiada en 1946 por P. R. Wallace, [37] lo cual le sirvió como punto de partida para estudiar al grafito (material que cobró gran relevancia en la era post- II guerra mundial debido a sus aplicaciones para reactores nucleares), este material fue descrito teóricamente por primera vez en 1984 por Gordon Semenoff [38]. Sin embargo, y hasta ese entonces, se suponía que este material no existía en estado libre, estas suposiciones estaban fundamentadas en los argumentos dados por L. Landau y R. Peierls [39, 40] basados en

consideraciones termodinámicas que explicaban las razones por las cuales no debieran existir cristales bidimensionales en la naturaleza. Por otra parte, se creía que, de poder sintetizarse, este material sería termodinámicamente inestable con respecto a la formación de estructuras curvas tales como los fulerenos o los nanotubos. Por todo lo anteriormente dicho se consideraba al grafeno mas bien como un material “de interés académico”. Fue recién 20 años después de su descripción teórica que fue sintetizado por Novoselov y su grupo utilizando al SiO_2 como sustrato, utilizando una técnica conocida como *exfoliación micromecánica*. Básicamente esta técnica consistió en usar una cinta adhesiva para quitar una capa atómica del grafito y luego presionarla sobre el sustrato, de manera que al retirar la cinta se obtuvieron pequeñas islas de grafeno sobre el sustrato. La clave de este experimento fue utilizar como sustrato al SiO_2 puesto que, siendo un compuesto amorfo, no interfiere en la visualización de la estructura cristalina del grafeno, permitiendo la observación de sutiles defectos (creados por el grafeno sobre la superficie del sustrato) mediante el empleo de un microscopio óptico, [28, 47].

La flexibilidad estructural del grafeno, producto de sus propiedades electrónicas, son el resultado de una hibridación sp^2 entre un orbital s y dos orbitales p , a partir de los orbitales $2s$; $2p_x$ y $2p_y$ del Carbono, formando una red trigonal plana con un enlace σ entre átomos de carbono separados por una distancia de 1.42 \AA . Este enlace es el responsable de la robustez de la red en todos los alótopos y, debido al principio de exclusión de Pauli, esta banda está llena, dando así lugar a una ancha banda de valencia. Queremos destacar que, debido a la rigidez brindada este por enlace σ , es difícil que otro átomo pueda reemplazar a un átomo de Carbono en la red hexagonal. Esta es una de las razones por las cuales el camino libre medio del electrón en el grafeno es del orden de $1 \mu\text{m}$, siendo un valor relativamente grande comparado con otros metales. Por otro lado, el tercer orbital, $2p_z$, del átomo de Carbono, orientado perpendicularmente al plano del grafeno, forma la banda π a través de enlaces covalentes con los átomos vecinos. Dado que este orbital contribuye con sólo un electron,

la banda π está a medio llenar en el grafeno neutro. Las propiedades electrónicas del grafeno alrededor de la energía de Fermi pueden ser descritas por el modelo de tight-binding con un sólo orbital por átomo, conocido también como la aproximación del electrón π puesto que la mezcla entre estados pertenecientes a las bandas π y σ es insignificante.

Uno de los aspectos más interesantes del grafeno es que sus excitaciones a bajas energías pueden ser descritas como estados quirales no masivos de una teoría fermiónica pseudo-relativista, dando así lugar a una relación de dispersión lineal, válida a bajas energías, donde la velocidad de la luz es reemplazada por la *velocidad de Fermi*, $v_F \approx 10^{-3}c$. De ese modo, el Lagrangiano que describe esas excitaciones en presencia de un campo magnético uniforme y perpendicular al plano del grafeno es similar al de la QED para fermiones sin masa y es, en este caso, donde aparece el *Efecto Hall Cuántico Entero Anómalo* que ocurre a valores semienteros del factor de llenado [41,42]. El Efecto Hall Cuántico Entero Anómalo ha sido observado experimentalmente en el 2005 [29, 30], y puede entenderse como relacionado con la existencia de una fase de Berry no nula en la función de onda del electrón, consecuencia de la excepcional topología de la estructura de banda del grafeno [30].

Otra característica distintiva de estos fermiones es su insensibilidad a potenciales electrostáticos externos, efecto que se conoce como la *paradoja de Klein*, en la cual los fermiones pueden ser transmitidos con una probabilidad igual a 1 a través de una región clásicamente prohibida [43,44]. En efecto, estos fermiones de Dirac se comportan de manera inusual en presencia de potenciales de confinamiento, fenómeno conocido como *Zitterbewegung* [44]. En el grafeno, estos potenciales pueden ser generados por desorden y las fuentes de desorden en este material pueden variar desde efectos encontrados comunmente en semiconductores, tales como impurezas ionizadas en sustratos de Si, vacancias, cargas sobre la superficie del material, hasta defectos tales como “ripples” (ondulaciones) asociados a la estructura “blanda” del grafeno [45] u otro tipo de defectos topológi-

cos. En este sentido, el grafeno es un material único puesto que comparte propiedades de las membranas blandas y, al mismo tiempo, se comporta como un metal, de manera que los fermiones de Dirac se propagan sobre un espacio localmente curvo. Por último queremos remarcar el hecho de que el grafeno tenga propiedades de membrana blanda está relacionado con la existencia de modos vibracionales (fonones) fuera del plano, los cuales no se encuentran en sólidos tridimensionales.

Grafeno y una Cuantización no abeliana

1.1. Introducción

El grafeno, material bidimensional constituido por átomos de Carbono dispuestos sobre una red hexagonal, ha adquirido un gran interés desde su sintetización en el laboratorio [28], 20 años después de su descripción teórica [38], tanto desde el punto de vista teórico [32,53,73] como desde el experimental [29,30] debido a sus excelentes propiedades electrónicas [31] y a su estabilidad mecánica, térmica y química.

Por otra parte, dado que la no conmutatividad entre variables dinámicas aparece naturalmente en el estudio de una partícula con carga e y masa m moviéndose en un plano en presencia de un campo magnético uniforme y perpendicular a este plano [46], conocido como el problema de Landau, vamos a estudiar en este capítulo una generalización de este problema a un espacio donde las variables dinámicas no conmutan entre sí y, a con-

tinuación, vamos a formular nuestro modelo efectivo para la descripción del grafeno.

1.2. Nuestro Modelo

Vamos a considerar un Hamiltoniano efectivo no-relativista, sugerido por una particular deformación del álgebra de Heisenberg (en nuestro caso la no-conmutatividad del momento es consistente con la introducción de un campo magnético externo uniforme no abeliano) que puede ser útil, como veremos más adelante, para describir las excitaciones a bajas energías producidas por las interacciones a primeros y segundos vecinos en el Grafeno.

El álgebra bajo consideración se define, entonces, como sigue:

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= 0, & [X_i, P_j] &= i\hbar\delta_{ij}, & [P_i, P_j] &= 2i\theta^2\epsilon_{ij3}\sigma_3, \\ [P_i, \sigma_j] &= 2i\theta\epsilon_{ij3}\sigma_3, & i, j &= 1, 2, \end{aligned} \quad (1.2.1)$$

donde $i, j, k = 1, 2$ y θ es un parámetro con dimensiones de longitud, lo que corresponde a una deformación del álgebra de Heisenberg \otimes Spin, que induce interacciones spin-dipolo y de órdenes superiores como resultado de que las interacciones de spin son de largo alcance.

En esta deformación del álgebra Heisenberg el conmutador entre momentos es proporcional al *pseudospin* σ_3 , lo cual puede relacionarse con una cuantización de estructuras Poissonianas deformadas desarrollada en [49] y considerada como una clase de cuantización magnética [50,51].

La estructura de esta álgebra implica que las partículas son descritas por funciones de onda con dos componentes, $\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} \in \mathbf{L}_2(\mathbb{R}^2) \otimes \mathbb{C}^2$, y los operadores resultan tener la estructura de matrices de 2×2 sobre \mathbb{C}^2 .

Por medio de un *corrimiento (shift) de Bopp no abeliano*, podemos expresar a los operadores $\{X_i, P_i\}$ en términos de variables dinámicas convencionales, que satisfacen el álgebra usual de Heisenberg \otimes Spin entre operadores de coordenadas, momentos y spin. De esa manera, el álgebra en (1.2.1) puede ser realizada mediante las siguientes expresiones:

$$X_i := x_i \otimes \mathbf{1}_2 \quad P_i := p_i \otimes \mathbf{1}_2 + \theta \mathbf{1}_{\mathbf{L}_2} \otimes \sigma_i, \quad (1.2.2)$$

con $x_i, i = 1, 2$ las coordenadas conmutativas (usuales) en el plano, los operadores $p_i = -i \partial_i$, definidos sobre $\mathbf{L}_2(\mathbb{R}^2)$, y $\sigma_i, i = 1, 2$ las primeras dos matrices de Pauli. Además, definimos $\boldsymbol{\sigma} := (\mathbf{1}_{\mathbf{L}_2} \otimes \sigma_1, \mathbf{1}_{\mathbf{L}_2} \otimes \sigma_2)$ y, a partir de ahora y por conveniencia vamos omitir en nuestra notación el símbolo \otimes , lo que no generará ambigüedades.

En este capítulo vamos a considerar una generalización del Hamiltoniano de una partícula no relativista de carga e y masa m , mínimamente acoplada a un campo electromagnético (3+1-dimensional) externo, $\{A_0, \mathbf{A} := (A_1, A_2)\}$, que construimos mediante el reemplazo $x_i \rightarrow X_i, p_i \rightarrow P_i$ en la expresión usual de este Hamiltoniano.

Por el momento consideramos el caso en que el potencial electrostático es nulo, es decir $A_0 = 0$. Entonces,

$$H_0 = \frac{(\mathbf{P} - e\mathbf{A})^2}{2m}, \quad (1.2.3)$$

de modo que de las relaciones (1.2.2), y tomando el potencial electromagnético en el gauge de Coulomb, $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$, obtenemos para (1.2.3):

$$\begin{aligned} H_\theta &= \frac{(\mathbf{p} + \theta\boldsymbol{\sigma} - e\mathbf{A})^2}{2m} \\ &= \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + \frac{\theta}{m} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) + \frac{\theta^2}{m} \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

Observamos que el término constante no afecta a las ecuaciones de movimiento y por lo tanto podemos sustraer ese término sin afectar las

autofunciones, con la única consecuencia de un corrimiento uniforme de las autoenergías en la cantidad $+\frac{\theta^2}{m}$. Nuestro problema se reduce entonces a hallar las soluciones del Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H &= \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + 2\theta^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla^2 + 2ie\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + e^2 \vec{A}^2 \right\} - v_F i\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \left\{ \nabla - i\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right\}, \end{aligned} \quad (1.2.5)$$

donde hemos definido *velocidad de Fermi* como

$$v_F := \frac{\theta}{m}. \quad (1.2.6)$$

Observamos que en el límite $m \rightarrow \infty$, pero manteniendo fija v_F , el Hamiltoniano resulta ser lineal y, por lo tanto, resulta apropiado para realizar una descripción efectiva del Grafeno alrededor de los puntos de *Fermi* [?, 31, 38, 41], esta es una primera justificación para el modelo que proponemos.

Advertimos que para mantener v_F fija en este límite, es necesario considerar que el parámetro de la no-conmutatividad, θ , toma también valores grandes. En consecuencia, no estamos considerando un modelo con pequeñas correcciones por no conmutatividad de sus variables dinámicas, sino que hemos usado esa analogía sólo para formular un modelo efectivo para el sistema físico que pretendemos describir.

Notemos, además, que la modificación introducida en el Hamiltoniano (2.2.1) puede ser interpretada como la introducción de un campo magnético no-Abeliano uniformemente constante en la tercera dirección del álgebra del grupo $SU(2)$, de intensidad proporcional a θ^2 . En efecto, las transformaciones de $SU(2)$ relacionan ambas componentes de la función de onda, y el conmutador entre derivadas *covariantes* resulta:

$$\begin{aligned} [p_1 - eA_1 + \theta\sigma_1, p_2 - eA_2 + \theta\sigma_2] &= [p_1 - eA_1, p_2 - eA_2] + [\theta\sigma_1, \theta\sigma_2] \\ &= ie(\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1) + 2i\theta^2 \sigma_3 = ieB + 2i\theta^2 \sigma_3. \end{aligned} \quad (1.2.7)$$

En este sentido, si tomamos un campo magnético constante $B = (\partial_1 A_2 - \partial_2 A_1)$, el sistema que estamos considerando es una suerte de versión no-Abeliana del problema de Landau [52].

El sistema bajo consideración, cuyo Hamiltoniano está dado por (1.2.4), puede ser descrito por el siguiente Lagrangiano

$$\begin{aligned}
\mathcal{L} &:= \frac{i}{2} [\psi^\dagger \partial_t \psi - \partial_t \psi^\dagger \psi] + \psi^\dagger e A_0 \psi \\
&\quad - \frac{1}{2m} \left\{ [(\mathbf{p} - e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma}) \psi]^\dagger \cdot [(\mathbf{p} - e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma}) \psi] - 2\theta^2 \psi^\dagger \psi \right\} \\
&= \frac{i}{2} [\psi^\dagger \partial_t \psi - \partial_t \psi^\dagger \psi] - \frac{1}{2m} \left\{ \boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi + i \boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger \cdot (-e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma}) \psi - \right. \\
&\quad \left. - i \psi^\dagger (-e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma}) \cdot \boldsymbol{\nabla} \psi + \psi^\dagger [(-e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma})^2 - 2\theta^2] \psi \right\}.
\end{aligned} \tag{1.2.8}$$

Su variación respecto de las variables dinámicas independientes, ψ^\dagger y ψ , nos conduce a las ecuaciones de Euler-Lagrange:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \psi^\dagger} - \partial_t \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_t \psi^\dagger)} \right) - \boldsymbol{\nabla} \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\boldsymbol{\nabla} \psi^\dagger)} \right) &= \\
= i \partial_t \psi - \frac{1}{2m} [(\mathbf{p} - e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma})^2 - 2\theta^2] \psi &= 0,
\end{aligned} \tag{1.2.9}$$

y

$$-i \partial_t \psi^\dagger - \frac{1}{2m} \left\{ [(\mathbf{p} - e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma})^2 - 2\theta^2] \psi \right\}^\dagger = 0. \tag{1.2.10}$$

Este Lagrangiano presenta una simetría de gauge $U(1)$. En efecto, \mathcal{L} permanece invariante ante las transformaciones de gauge (Abelianas)

$$\begin{aligned}
\psi(x) &\rightarrow e^{ie\alpha(x)} \psi(x) \quad \Rightarrow \quad \delta\psi(x) = ie\alpha(x)\psi(x), \\
\psi^\dagger(x) &\rightarrow \psi^\dagger(x) e^{-ie\alpha(x)} \quad \Rightarrow \quad \delta\psi^\dagger(x) = -ie\alpha(x)\psi^\dagger(x),
\end{aligned} \tag{1.2.11}$$

$$A_\mu(x) \rightarrow A_\mu(x) + \partial_\mu \alpha(x).$$

Entonces, el Teorema de Noether garantiza la existencia de una corriente localmente conservada dada por

$$\alpha j^\mu := -\delta\psi^\dagger \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi^\dagger)} \right) - \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \psi)} \right) \delta\psi. \quad (1.2.12)$$

La densidad de carga asociada es

$$j^0 = e \psi^\dagger \psi \quad (1.2.13)$$

mientras que la densidad de corriente está dada por

$$\mathbf{j} = \frac{e}{2m} \{ i (\nabla \psi^\dagger \psi - \psi^\dagger \nabla \psi) + 2\psi^\dagger (-e\mathbf{A} + \theta\boldsymbol{\sigma}) \psi \}. \quad (1.2.14)$$

Podemos verificar que la corriente j^μ es efectivamente conservada como consecuencia de las ecuaciones de movimiento (1.2.9) y (1.2.10)

$$\partial_t j^0 - \nabla \cdot \mathbf{j} = 0. \quad (1.2.15)$$

1.2.1. El caso libre

En esta sección vamos a considerar el problema libre, es decir $\mathbf{A} = 0$, por lo cual el Hamiltoniano (2.2.1) se reduce a:

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}. \quad (1.2.16)$$

Dada su estructura, observamos que se compone de un término cuadrático y de uno lineal en \mathbf{p} , por lo cual proponemos autofunciones de la forma de un producto de una onda plana y otra función que depende del vector \mathbf{k} , es decir:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} \chi(\mathbf{k}), \quad (1.2.17)$$

con $\chi(\mathbf{k}) \in \mathbb{C}^2$, de modo que si reemplazamos en la ecuación de autovalores

$$[H - \mathcal{E}(\mathbf{k})] \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.2.18)$$

obtenemos la siguiente expresión

$$\left\{ \frac{\mathbf{k}^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{k} - \mathcal{E}(\mathbf{k}) \right\} \chi(\mathbf{k}) = 0. \quad (1.2.19)$$

El requerimiento de que esta ecuación matricial tenga soluciones no triviales nos conduce a imponer que

$$\det \left\{ \begin{pmatrix} \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mathcal{E}(\mathbf{k}) & v_f (k_1 - i k_2) \\ v_f (k_1 + i k_2) & \frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mathcal{E}(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \right\} = 0, \quad (1.2.20)$$

es decir,

$$\left[\frac{\mathbf{k}^2}{2m} - \mathcal{E}(\mathbf{k}) \right] - v_F^2 (k_1 - i k_2) (k_1 + i k_2)^* = 0 \quad (1.2.21)$$

donde el símbolo * representa el complejo conjugado.

Esta última ecuación determina la siguiente relación de dispersión:

$$\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \frac{\mathbf{k}^2}{2m} \pm v_F |\mathbf{k}| \quad (1.2.22)$$

Observamos que para pequeños valores de $|\mathbf{k}|$ esa relación resulta ser aproximadamente lineal, como puede verse en la figura 1.1

Además, si reemplazamos $\mathcal{E}(\mathbf{k})$ dado por (1.2.22) en la ecuación de autovalores (1.2.19) para $\mathbf{k} \neq 0$, vemos que el pseudo-spinor $\chi(\mathbf{k})$ tiene pseudo-helicidad bien definida. En efecto,

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}} \right) \chi_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm \chi_{\pm}(\mathbf{k}). \quad (1.2.23)$$

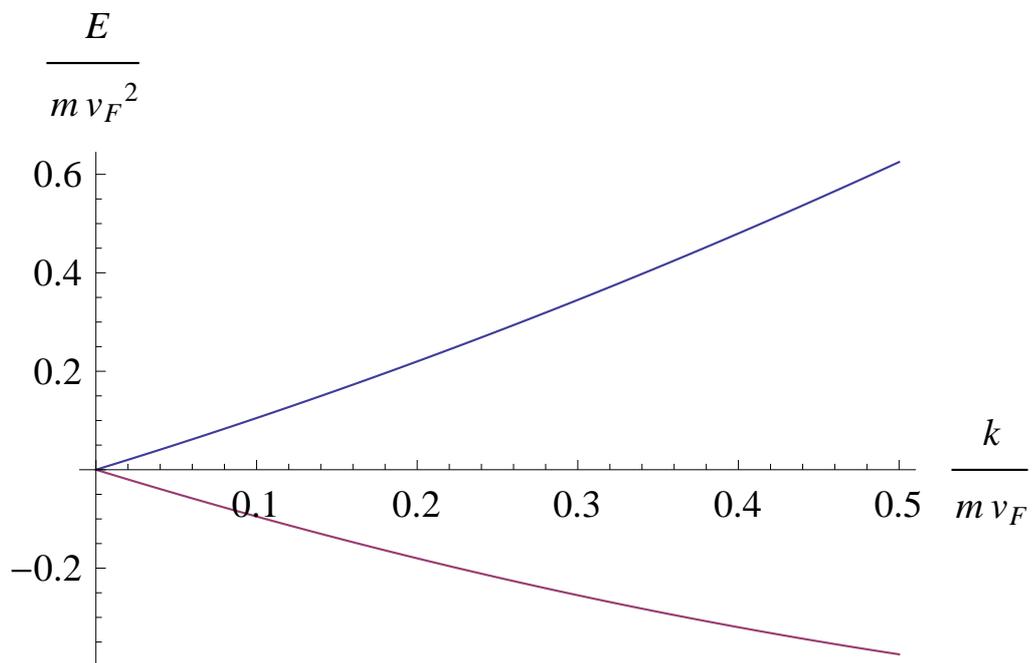


Figura 1.1: La relación de dispersión para ambas ramas de la solución para el caso libre.

Por otro lado, si resolvemos el problema para el caso particular en que $\mathbf{k} = \mathbf{0}$, encontramos que los vectores linealmente independientes $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ y $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ son las soluciones, constantes, al problema con autovalor nulo.

Es trivial verificar que el Hamiltoniano de este modelo libre, dado por (1.2.16), conmuta con el *momento angular efectivo*, que resulta ser el generador de una simetría $U(1)$,

$$J := -i\partial_\varphi + \frac{1}{2}\sigma_3, \quad [H, J] = 0. \quad (1.2.24)$$

Notamos que ante una rotación en el plano, la función de onda del Hamiltoniano libre, (1.2.17), cambia según

$$\mathcal{U}(\vartheta)\psi(\mathbf{x}) := e^{i\frac{\vartheta}{2}\sigma_3}\psi(R(\vartheta)^{-1}\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot(R(\vartheta)^{-1}\mathbf{x})}e^{i\frac{\vartheta}{2}\sigma_3}\chi(\mathbf{k}). \quad (1.2.25)$$

Para una rotación completa en $\vartheta = 2\pi$, sabemos que $R(2\pi) = \mathbf{1}_3$ y, además, $e^{i\pi\sigma_3} = -\mathbf{1}_2$. De esta manera,

$$\mathcal{U}(2\pi)\psi(\mathbf{x}) = -\psi(\mathbf{x}). \quad (1.2.26)$$

Por lo tanto, dado que esto es lo que le sucede a spinores que representan estados fermiónicos ante una rotación de 2π , estas partículas puede ser consideradas como fermiones [31].

1.2.2. Campo magnético constante perpendicular al plano

En lo siguiente, vamos a considerar el caso en que la partícula se mueve en presencia de un campo magnético uniforme y constante, B , perpendicular al plano.

Elegimos, por conveniencia, escribir el potencial vector que corresponde a este campo magnético en el *gauge de Landau*, por lo cual:

$$\mathbf{A} = Bx_1\hat{e}_2 \quad \Rightarrow \quad \partial_1 A_2 - \partial_2 A_1 = B \quad \text{y} \quad \nabla \cdot \mathbf{A} = 0. \quad (1.2.27)$$

En este caso, el Hamiltoniano (2.2.1) puede ser escrito como

$$2mH = p_1^2 + (p_2 - eBx_1)^2 + 2mv_F\sigma_1 p_1 + 2mv_F\sigma_2 (p_2 - eBx_1), \quad (1.2.28)$$

Por simple inspección vemos que este Hamiltoniano conmuta con p_2 , puesto que no depende de x_2 , esto nos permite buscar autofunciones generalizadas de la forma:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \Phi(x_1), \quad (1.2.29)$$

donde $\Phi(x_1) = \begin{pmatrix} \varphi(x_1) \\ \chi(x_1) \end{pmatrix}$, de manera que la ecuación de autovalores $(H - \mathcal{E})\psi(\mathbf{x}) = 0$ para el operador en (1.2.28) se reduce al sistema de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\begin{aligned} \left[\left(p_1^2 + (eB)^2 \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right)^2 \right) - \lambda \right] \varphi(x_1) &= -2mv_F \left[p_1 + ieB \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right) \right] \chi(x_1), \\ \left[\left(p_1^2 + (eB)^2 \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right)^2 \right) - \lambda \right] \chi(x_1) &= -2mv_F \left[p_1 - ieB \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right) \right] \varphi(x_1), \end{aligned} \quad (1.2.30)$$

en el que hemos definido $\lambda := 2m\mathcal{E}$.

Notamos que la parte diagonal del sistema tiene la estructura de la ecuación diferencial de un oscilador armónico, por lo cual realizamos el siguiente cambio de variables: $q := \sqrt{|eB|} \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right)$. De esta manera, $p_1 = \sqrt{|eB|}p$, mientras que el operador p queda definido de la manera usual, como $p := -i\frac{\partial}{\partial q}$. Con estas nuevas variables el sistema anterior (1.2.30)

queda escrito como

$$\begin{cases} [|eB| (p^2 + q^2) - \lambda] \varphi(q) = -2mv_F \sqrt{|eB|} (p + \iota \operatorname{sgn}(eB) q) \chi(q), \\ [|eB| [p^2 + q^2] - \lambda] \chi(q) = -2mv_F \sqrt{|eB|} (p - \iota \operatorname{sgn}(eB) q) \varphi(q). \end{cases} \quad (1.2.31)$$

Equivalentemente, podemos escribir este sistema en forma matricial:

$$\{|eB| [p^2 + q^2] - \lambda\} \begin{pmatrix} \varphi(q) \\ \chi(q) \end{pmatrix} = -2mv_F \sqrt{|eB|} \{p\sigma_1 - \operatorname{sgn}(eB) q\sigma_2\} \begin{pmatrix} \varphi(q) \\ \chi(q) \end{pmatrix}. \quad (1.2.32)$$

Por simplicidad, en lo siguiente vamos a considerar el caso en que $eB > 0$, puesto que el caso en que $eB < 0$ puede ser obtenido del anterior simplemente intercambiando las componentes de la solución, $\varphi(q) \leftrightarrow \chi(q)$, como puede verse del sistema (1.2.31). Por lo tanto:

$$\{eB (p^2 + q^2) - \lambda\} \begin{pmatrix} \varphi(q) \\ \chi(q) \end{pmatrix} = -2mv_F \sqrt{eB} \{p\sigma_1 - q\sigma_2\} \begin{pmatrix} \varphi(q) \\ \chi(q) \end{pmatrix}. \quad (1.2.33)$$

La presencia del doble del Hamiltoniano de un oscilador armónico unidimensional de frecuencia 1 en el lado izquierdo del anterior sistema de ecuaciones, cuyas autofunciones son bien conocidas y dadas por $\phi_n(q) = e^{-q^2/2} H_n(q)$ (donde los H_n representan polinomios de Hermite) y sus correspondientes autovalores son $2n+1$, para $n = 0, 1, \dots$, sugiere que $\varphi(q) \sim \phi_n(q)$ y $\chi(q) \sim \phi_{n'}(q)$, para $n, n' \in \mathbb{N}$. Además, como las funciones de Hermite satisfacen las siguientes relaciones de recurrencia

$$\begin{cases} \phi_n'(q) + q\phi_n(q) = 2n\phi_{n-1}(q) \\ \phi_n'(q) - q\phi_n(q) = -\phi_{n+1}(q) \end{cases} \quad (1.2.34)$$

podemos proponer como solución del sistema (1.2.33) el siguiente Ansatz

$$\varphi(q) = A_n \phi_{n+1}(q), \quad \chi(q) = B_n \phi_n(q), \quad (1.2.35)$$

para $n = 0, 1, 2, \dots$, con $A, B \in \mathbb{C}$.

Si reemplazamos esta propuesta en la ecuación (1.2.33), el sistema se reduce a un sistema homogéneo de ecuaciones algebraicas

$$\begin{pmatrix} eB(2n+3) - \lambda & i2mv_F\sqrt{eB} \\ -i2mv_F\sqrt{eB}(2n+2) & eB(2n+1) - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.36)$$

La existencia de soluciones no triviales impone la condición

$$\det \left\{ \begin{pmatrix} eB(2n+3) - \lambda & i2mv_F\sqrt{eB} \\ -i2mv_F\sqrt{eB}(2n+2) & eB(2n+1) - \lambda \end{pmatrix} \right\} =$$

$$(2eB(n+1) - \lambda)^2 - (eB)^2 - 8m^2v_F^2eB(n+1) = 0, \quad (1.2.37)$$

que determina las autonergías como

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{n,s} &= \frac{\lambda_{n,s}}{2m} = \frac{eB}{m} \left\{ n+1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + \frac{8m^2v_F^2}{eB}(n+1)} \right\} \\ &= \frac{eB}{m} \left\{ n+1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2(n+1)} \right\} \\ &= \left(v_F\sqrt{eB} \right) \frac{1}{z} \left[n+1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2(n+1)} \right], \end{aligned} \quad (1.2.38)$$

siendo $s = \pm 1$ y z un parámetro adimensional dado por

$$z := \frac{mv_F}{\sqrt{eB}} = \frac{\theta}{\sqrt{eB}}. \quad (1.2.39)$$

Los coeficientes de la función de onda $\Phi(x_1)$ satisfacen:

$$B_{n,s} = i \frac{1 - s\sqrt{1 + 8z^2(n+1)}}{2z} A_{n,s} \quad (1.2.40)$$

y, por lo tanto, las autofunciones generalizadas del Hamiltoniano (1.2.28) (correctamente normalizadas) pueden ser escritas como

$$\psi_{k,n,s}(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} K_{n,s} e^{-\frac{q^2}{2}} \begin{pmatrix} H_{n+1}(q) \\ \frac{i}{2z} \left[1 - s\sqrt{1 + 8z^2(n+1)} \right] H_n(q) \end{pmatrix}, \quad (1.2.41)$$

siendo $K_{n,s}$ la constante de normalización dada por:

$$K_{n,s} = \sqrt[4]{eB} \frac{2^{-\frac{n}{2}-1} \sqrt{\left(\frac{s}{2} + \sqrt{1 + 8z^2(n+1)}\right)^2 - \frac{1}{4}}}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{(n+1)!} \sqrt{1 + 8z^2(n+1)}} \quad (1.2.42)$$

Recordemos que la variable q está definida a partir de x_1 según

$$q = \sqrt{eB} \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right). \quad (1.2.43)$$

Observamos que, tomando en cuenta las relaciones de ortogonalidad para las funciones de Hermite,

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_m(q) H_n(q) e^{-q^2} dq = 2^n n! \sqrt{\pi} \delta_{m,n}, \quad (1.2.44)$$

es fácil verificar que estas soluciones son también ortogonales. En efecto, ellas satisfacen

$$(\psi_{k,n,s}, \psi_{k',n',s'}) = \delta_{n,n'} \delta_{s,s'} \delta(k - k'). \quad (1.2.45)$$

Finalmente, notemos que existe otra solución Φ_0 de la ecuación (1.2.33) cuyas componentes están dadas por

$$\varphi(q) = \left(\frac{eB}{\pi} \right)^{1/4} \phi_0(q), \quad \chi(q) = 0. \quad (1.2.46)$$

En efecto, dado que $H_0(q) = 1$, tenemos

$$(p - iq)\phi_0(q) = -i(\partial_q + q)e^{-q^2/2} = -i(-q + q)e^{-q^2/2} = 0 \quad (1.2.47)$$

y la (1.2.33) se reduce a

$$\left\{ \frac{eB}{m} \frac{1}{2} [p^2 + q^2] - \mathcal{E}_0 \right\} \phi_0(q) = \left\{ \frac{eB}{m} \frac{1}{2} - \mathcal{E}_0 \right\} \phi_0(q) = 0. \quad (1.2.48)$$

De manera que la energía de este estado es $\mathcal{E}_0 = eB/2m$, resultando independiente de v_F . Nótese también que se reduce a un modo cero en el límite $m \rightarrow \infty$, cuando el Hamiltoniano resulta estrictamente lineal.

Uno puede verificar que la correspondiente autofunción asociada a este modo

$$\psi_{k,0}(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{eB}{\pi} \right)^{1/4} \begin{pmatrix} \phi_0(q) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (1.2.49)$$

es ortogonal al resto, satisfaciendo

$$(\psi_{k,n,s}, \psi_{k',0}) = 0, \quad (\psi_{k,0}, \psi_{k',0}) = \delta(k - k'). \quad (1.2.50)$$

Como ya hemos mencionado anteriormente, estos resultados pueden ser interpretados como la solución de un problema de Landau no-Abeliano, en el cual hemos introducido un campo magnético no-Abeliano uniformemente constante. Además, en el límite $m \rightarrow \infty$, estas autofunciones son similares a las soluciones encontradas para la ecuación de Dirac en un campo magnético de fondo [53].

Podemos tomar combinaciones lineales apropiadas de las autofunciones generalizadas en (1.2.41) y (1.2.49) para construir un conjunto completo de vectores generalizados en nuestro espacio,

$$\left\{ \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(q) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(q) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; k \in \mathbb{R}, n = 0, 1, 2, \dots \right\}, \quad (1.2.51)$$

siendo $\phi_n(q)$ las funciones de Hermite.

Por lo tanto, el conjunto de autovectores generalizados de H es también completo. Esto nos permite justificar nuestro procedimiento y asegura que

con nuestro análisis hemos obtenemos el espectro completo de nuestro Hamiltoniano (1.2.28).

Ahora que ya tenemos las soluciones de nuestro problema, vamos a considerar los casos límites en que $z \ll 1$ y $z \gg 1$.

■ $z \ll 1$

Este caso límite corresponde a tomar el límite $m \rightarrow 0$. De esta manera, a partir de las ecuaciones (1.2.41) y (1.2.38), las energías se reducen a

$$\mathcal{E}_{n,s} = \frac{eB}{m} \left\{ \left(n + 1 + \frac{s}{2} \right) + 2sz^2(n+1) + O(z^4) \right\}. \quad (1.2.52)$$

mientras que las autofunciones se pueden escribir, para $s = 1$, como

$$\psi_{k,n,+1}(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{2^{-\frac{n}{2}-\frac{1}{2}}}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{(n+1)!}} e^{-\frac{q^2}{2}} \times \begin{pmatrix} [1 - z^2(n+1) + O(z^4)] H_{n+1}(q) \\ [-2iz(n+1) + 6iz^3(n+1)^2 + O(z^4)] H_n(q), \end{pmatrix} \quad (1.2.53)$$

mientras que para $s = -1$ resultan

$$\psi_{k,n,-1}(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{2^{-n/2}}{\sqrt[4]{\pi}\sqrt{n!}} e^{-\frac{q^2}{2}} \times \begin{pmatrix} [z - 3z^3(n+1) + O(z^5)] H_{n+1}(q) \\ i \left[1 - z^2(n+1) + \frac{11}{2} z^4(n+1)^2 + O(z^5) \right] H_n(q) \end{pmatrix}. \quad (1.2.54)$$

Observamos para este caso la presencia de niveles equiespaciados (en los órdenes dominantes en z) en cada rama del espectro. Además, el límite $z \rightarrow 0$ es consistente con el espectro del problema de Landau usual para partículas no relativistas.

- $z \gg 1$

El paso siguiente es considerar el caso límite para grande valores de z , lo cual corresponde a tomar el límite $m \rightarrow \infty$. En este caso las energías están dadas por

$$\mathcal{E}_{n,s} = v_F \sqrt{eB} \left\{ s \sqrt{2(n+1)} + \frac{(n+1)}{z} + O(z^{-2}) \right\} \quad (1.2.55)$$

y las autofunciones son

$$\psi_{k,n,s}(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \frac{2^{-\frac{n}{2}-1} e^{-\frac{q^2}{2}}}{\sqrt[4]{\pi} \sqrt{(n+1)!}} \begin{pmatrix} H_{n+1}(q) + O(z^{-1}) \\ -\frac{is}{2} \sqrt{8(n+1)} H_n(q) + O(z^{-1}) \end{pmatrix}. \quad (1.2.56)$$

Nótese que en este caso las autoenergías (al orden dominante en $1/z$) varían como $\sqrt{n+1}$, lo que corresponde al problema de Landau para partículas relativistas.

Masa negativa

Como queremos describir los estados de baja energía del grafeno (aquellos con autoenergías próximas de cero en ambas ramas del espectro) y la construcción llevada a cabo para las soluciones del sistema (1.2.30) es independiente del signo de m , mediante el mismo procedimiento también podemos estudiar la conducta del sistema para el caso en que ese parámetro de masa sea negativo, $m < 0$. En efecto, podemos cambiar el signo de m en las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales acopladas, (1.2.41) y (1.2.41), lo cual corresponde al reemplazo $z \rightarrow -w$, donde $w = |m|v_F/\sqrt{eB} > 0$, manteniendo $v_F > 0$. De ese modo las en-

energías resultan (Ver Figura 1.2)

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{n,s} &= - \left(v_F \sqrt{eB} \right) \frac{1}{w} \left[n + 1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8w^2(n+1)} \right] = \\ &= \left(v_F \sqrt{eB} \right) \left\{ -s \sqrt{2(n+1)} - \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\}, \end{aligned} \quad (1.2.57)$$

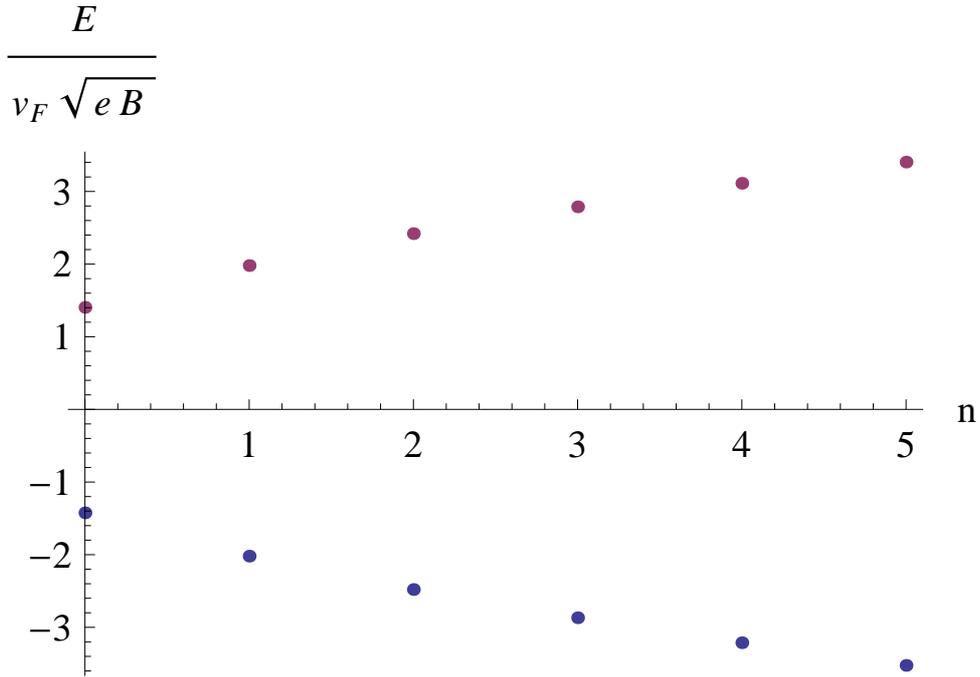


Figura 1.2: Niveles de energía $\mathcal{E}_{n,s}$ para $m < 0$, en unidades de $v_F \sqrt{eB}$, para el caso $w = 1000$.

Por su parte, el estado de energía más próxima de cero tiene ahora un autovalor *negativo* $\mathcal{E}_0 = -eB/2|m| < 0$, estado de *agujero* que también tiende a cero en el límite $m \rightarrow \infty$, resultando consistente con la existencia de modos ceros en el espectro de fermiones de Dirac sin masa acoplados a este campo de gauge (ver [55], [56] y [57], por ejemplo).

1.3. La relación del modelo con el Grafeno

Hemos señalado en la Introducción, que la estructura del Grafeno corresponde a una red hexagonal. Sin embargo, esa estructura no corresponde a una red de Bravais, puesto que no es posible definir vectores primitivos que permitan cubrir toda la red. No obstante, ella puede entenderse como la superposición de dos redes de Bravais triangulares cuya base está constituida por sólo dos átomos por celda unidad [31]. Es precisamente este hecho, el de ser entendida como la superposición de dos redes triangulares (A y B), el que nos conduce a tener un grado de libertad interno, correspondiente a un índice de subred, que es llamado *pseudoespín*.

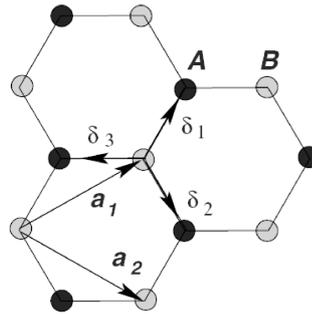


Figura 1.3: Estructura del Grafeno

En este material, el ángulo de enlace entre átomos vecinos de Carbono es de $\frac{2\pi}{3}$, de manera que para cada subred triangular podemos escribir a los vectores de la base generadora como:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{3}{2} a \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{3}{2} a \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad (1.3.1)$$

siendo $a \approx 1.42\text{\AA}$ la constante de red, que es la distancia de equilibrio entre átomos de Carbono. De esa manera, estos vectores conectan átomos pertenecientes a cada subred. Por otra parte, alrededor de cada átomo en la subred A hay tres primeros vecinos, todos pertenecientes a la subred B , de manera que los átomos de Carbono vecinos en la red hexagonal del Grafeno están conectados por los vectores:

$$\delta_1 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \delta_2 = \frac{a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \delta_3 = a \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.3.2)$$

Estos vectores conectan cada sitio en la subred A con sus primeros vecinos en la subred B (y similarmente para cada sitio en la subred B).

La red recíproca está caracterizada por una base de vectores $\{\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2\}$, tales que

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 &= 2\pi, & \mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_2 &= 0, \\ \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_1 &= 0, & \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{b}_2 &= 2\pi \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

(base bi-ortogonal respecto de la generadora de la red directa).

En la red recíproca se define la *primera zona de Brillouin* como la celda unidad en el espacio recíproco (espacio de cuasi-momentos). En nuestro caso particular, esta celda resulta ser un hexágono con los lados opuestos identificados (Ver Figura 1.4). Los vectores que caracterizan esta celda son:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (1.3.4)$$

Como los lados opuestos de esta zona están identificados dado que corresponden a los mismos pseudo-momentos, sólo dos de los 6 vértices son

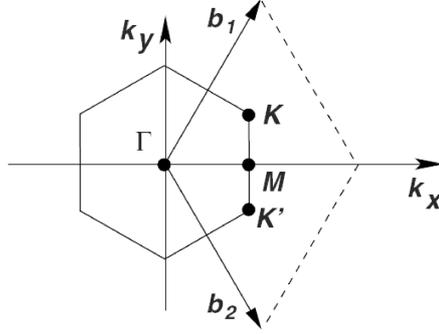


Figura 1.4: Primer zona de Brillouin

no equivalentes, por ejemplo K y K' en la figura 1.4, estos dos vértices (no equivalentes entré sí) están separados por un ángulo de $\frac{2\pi}{3}$. En el modelo pseudo-relativista (lineal), las fluctuaciones alrededor de estos dos vértices corresponden a las dos representaciones irreducibles no equivalentes del álgebra de Clifford en (2+1) dimensiones [53,54]. La existencia de esos dos vértices no equivalentes introduce otro grado de libertad interno, al que se conoce como *sabor*.

El modelo de *ligadura fuerte* (*tight-binding*) de la Física del Estado Sólido supone que las partículas están fuertemente ligadas a los sitios de la red, de modo que las contribuciones dominantes al Hamiltoniano describen su desplazamiento entre sitios próximos. Para el grafeno, podemos referirnos a una aproximación de ese tipo que contemple sólo el salto de electrones entre sitios primeros vecinos (y, por lo tanto, entre subredes, lo que se denota por $\langle i, j \rangle$) y entre sitios segundos vecinos (y, por lo tanto, dentro de la misma subred, lo que se señala por $\langle\langle i, j \rangle\rangle$). El correspondiente Hamiltoniano se escribe en términos de operadores de creación y destrucción de partículas en cada sitio de las subredes como [31]

$$H = -t \sum_{\langle i, j \rangle} \sum_{s=\pm} \left(a_{i,s}^\dagger b_{j,s} + \text{h.c.} \right) - t' \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} \sum_{s=\pm} \left(a_{i,s}^\dagger a_{j,s} + b_{i,s}^\dagger b_{j,s} + \text{h.c.} \right), \quad (1.3.5)$$

donde los parámetros t y t' están relacionados con la amplitud de probabilidad de los electrones de efectuar transiciones entre sitios primeros y segundos vecinos respectivamente. Los operadores $a_{i,s}^\dagger$ y $a_{i,s}$ son los usuales de creación y aniquilación de electrones en el sitio i con spin s perteneciente a la subred triangular A que conforma la red hexagonal, y similarmente para la subred B .

Ahora bien, si escribimos estos operadores de creación y aniquilación en términos de su transformada de Fourier [38] y diagonalizamos las expresiones resultantes, obtenemos la *estructura de bandas* (relación de dispersión) del sistema [31].

Para ello imponemos condiciones de contorno periódicas sobre los autovectores del Hamiltoniano, de modo que $\psi(\mathbf{x} + N\mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{x})$, $i = 1, 2$ para un dado $N \in \mathbb{N}$, y escribimos a los operadores de cada subred directa como

$$a_n^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} A_{\vec{k}}^\dagger \quad (1.3.6)$$

$$a_n = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} A_{\vec{k}} \quad (1.3.7)$$

$$b_n^\dagger = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{x}_i + \vec{c}_3)} B_{\vec{k}}^\dagger \quad (1.3.8)$$

$$b_n = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot(\vec{x}_i + \vec{c}_3)} B_{\vec{k}} \quad (1.3.9)$$

donde los operadores $A_{\vec{k}}^\dagger$ y $A_{\vec{k}}$ son operadores de creación y aniquilación de partículas con cuasi-momento \vec{k} definido, y similarmente para la subred B . Como paso final, debe tomarse el límite $N \rightarrow \infty$.

Consideremos primeramente la contribución del término de primeros vecinos del Hamiltoniano (1.3.5),

$$-t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{s=\pm} \left(a_{i,s}^\dagger b_{j,s} + b_{j,s}^\dagger a_{i,s} \right) \quad (1.3.10)$$

Omitiremos a partir de este momento el subíndice s y la suma sobre $s = \pm 1$, dado que el spín del electrón no juega en lo que sigue un papel significativo, y expresaremos el primer término de la contribución anterior en función de $A_{\vec{k}}^\dagger$, $A_{\vec{k}}$, $B_{\vec{k}}^\dagger$ y $B_{\vec{k}}$, ya que el segundo término es el conjugado hermítico del primero. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \sum_{\langle i,j \rangle} a_i^\dagger b_j &= \sum_{\langle i,j \rangle} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} A_{\vec{k}}^\dagger \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_j+\vec{c}_3)} B_{\vec{k}'} \\ &= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{1}{N^2} \sum_{\langle i,j \rangle} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}_j} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{c}_3} \\ &= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{1}{N^2} \sum_i e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} \left\{ e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}_i} + e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_i+\vec{a}_1)} + e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_i+\vec{a}_2)} \right\} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{c}_3} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}'} \\ &= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{1}{N^2} \sum_i e^{i(\vec{k}'-\vec{k})\cdot\vec{x}_i} \left\{ 1 + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_2} \right\} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{c}_3} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}'} \\ &= \sum_{\vec{k},\vec{k}'} \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \left\{ 1 + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_2} \right\} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{c}_3} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}'} \\ &= \sum_{\vec{k}} \left\{ 1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right\} e^{i\vec{k}\cdot\vec{c}_3} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}}, \end{aligned} \quad (1.3.11)$$

donde hemos usado que

$$\frac{1}{N^2} \sum_i e^{i(\vec{k}-\vec{k}')\cdot\vec{x}_i} = \delta_{\vec{k},\vec{k}'} \quad (1.3.12)$$

El paso siguiente es calcular el primer término de la contribución que corresponde a segundos vecinos del Hamiltoniano (1.3.5), puesto que el

segundo término se obtiene de este mediante el cambio $a_i \rightarrow b_i$ y los restantes términos corresponde a los conjugados hermíticos de cada uno de éstos. Tenemos entonces:

$$\begin{aligned}
\sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} a_i^\dagger a_j &= \sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} A_{\vec{k}}^\dagger \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}_j} A_{\vec{k}'} \\
&= \sum_i \frac{1}{N^2} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{x}_i} \left\{ e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_i+\vec{a}_1)} + e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_i+\vec{a}_2)} + e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{x}_i+(\vec{a}_1-\vec{a}_2))} \right\} A_{\vec{k}}^\dagger A_{\vec{k}'} \\
&= \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \frac{1}{N^2} \sum_i e^{i\vec{x}_i\cdot(\vec{k}'-\vec{k})} \left\{ e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}'\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}'\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right\} A_{\vec{k}}^\dagger A_{\vec{k}'} \\
&= \sum_{\vec{k}} \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right\} A_{\vec{k}}^\dagger A_{\vec{k}}
\end{aligned}$$

donde hemos usado la ecuación (1.3.12).

Resulta inmediato comprobar que el segundo término en la contribución de segundos vecinos resulta

$$\sum_{\langle\langle i, j \rangle\rangle} b_i^\dagger b_j = \sum_{\vec{k}} \left\{ e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right\} B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}}, \quad (1.3.13)$$

de modo que el Hamiltoniano en la aproximación de tight-binding, (1.3.5), via transformada de Fourier se reduce a

$$\begin{aligned}
H &= -t \sum_{\vec{k}} \left\{ \left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{c}_3} A_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}} + \text{h.c.} \right\} \\
&\quad -t' \sum_{\vec{k}} \left\{ \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right] \left(A_{\vec{k}}^\dagger A_{\vec{k}} + B_{\vec{k}}^\dagger B_{\vec{k}} \right) + \text{h.c.} \right\},
\end{aligned} \quad (1.3.14)$$

que puede ser escrito en forma matricial como

$$H = \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} A_{\vec{k}}^\dagger & B_{\vec{k}}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & D \\ D^* & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{\vec{k}} \\ B_{\vec{k}} \end{pmatrix} \quad (1.3.15)$$

donde hemos definido:

$$C := -t' \left[\left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} \right) + \left(e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right) + \left(e^{i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} + e^{-i\vec{k}\cdot(\vec{a}_1-\vec{a}_2)} \right) \right] \quad (1.3.16)$$

$$D := -t \left[1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right]$$

En esas condiciones, la relación de dispersión resulta de diagonalizar el Hamiltoniano resultante, (1.3.15). Consideramos entonces la condición algebraica

$$\det \left[\begin{pmatrix} C - E(\mathbf{k}) & D \\ D^* & C - E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \right] = (C - E(\mathbf{k}))^2 - |D|^2 = 0 \quad (1.3.17)$$

de donde resulta que las bandas de energía quedan determinadas por

$$E(\mathbf{k}) = C \pm |D| \quad (1.3.18)$$

Entonces expresando las constantes C, D según las ecuaciones (1.3.16) y recordando la expresión de los vectores $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ dados en (1.3.1) obtenemos:

$$E(\mathbf{k}) = -2t' \left\{ \cos \left(\frac{3}{2}ak_1 + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_2 \right) + \cos \left(\frac{3}{2}ak_1 - \frac{\sqrt{3}}{2}ak_2 \right) + \cos \left(\sqrt{3}ak_2 \right) \right\} \quad (1.3.19)$$

$$\pm t \sqrt{3 + 2 \cos \left(\sqrt{3}ak_2 \right) + 4 \cos \left(\frac{3}{2}ak_1 \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_2 \right)}$$

es decir

$$E_{\pm}(\mathbf{k}) = \pm t \sqrt{f(\mathbf{k})} - t' [f(\mathbf{k}) - 3], \quad (1.3.20)$$

donde hemos definido la función $f(\mathbf{k})$ como

$$f(\mathbf{k}) = 3 + 4 \cos \left(\frac{3k_1a}{2} \right) \cos \left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_2a \right) + 2 \cos \left(\sqrt{3}k_2a \right) \geq 0. \quad (1.3.21)$$

La gráfica de esta relación de dispersión puede verse en la Figura 1.5.

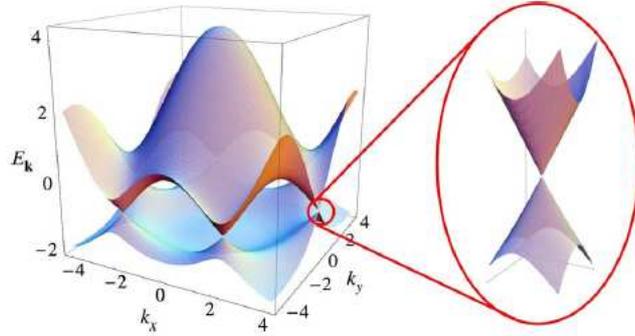


Figura 1.5: Relación de dispersión del Grafeno [31]

El mínimo de la función $f(\mathbf{k})$ en la zona de Brillouin queda determinado por las condiciones

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial k_1} f(\mathbf{k}) = -6a \sin\left(\frac{3}{2}k_1 a\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_2 a\right) = 0, \\ \frac{\partial}{\partial k_2} f(\mathbf{k}) = -2\sqrt{3}a \cos\left(\frac{3}{2}k_1 a\right) \sin\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_2 a\right) - 2\sqrt{3}a \sin\left(\sqrt{3}k_2 a\right) = 0, \end{cases} \quad (1.3.22)$$

correspondiendo a los *puntos de Dirac*

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}, \quad (1.3.23)$$

que satisfacen $f(\mathbf{K}) = 0 = f(\mathbf{K}')$. Entonces, las bandas descritas por la relación de dispersión (1.3.20) (correspondientes a cada signo) se tocan en estos puntos. Esos puntos de Dirac no equivalentes (también conocidos como puntos de Fermi, puesto que corresponden a la superficie de Fermi en el grafeno neutro) fueron elegidos de manera que estén relacionados entre sí a través de una reflexión de \mathbf{k} respecto del eje k_1 (es decir, a través del reemplazo $k_2 \rightarrow -k_2$) [31].

A partir de un desarrollo en series de las energías $E_{\pm}(\mathbf{k})$ dadas por (1.3.20) alrededor del punto de Dirac $\mathbf{k} = \mathbf{K}$ obtenemos

$$E_s(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = st \left[\frac{3}{2} a|\mathbf{k}| - \frac{3}{8} a^2 \mathbf{k}^2 \sin(3\theta) \right] + t' \left[-\frac{9}{4} a^2 \mathbf{k}^2 + 3 \right] + O(|\mathbf{k}|^3), \quad (1.3.24)$$

donde $\tan(\theta) = k_2/k_1$ y $s = \pm 1$.

El desarrollo alrededor del segundo punto de Fermi, \mathbf{K}' , nos conduce a

$$E_s(\mathbf{K}' + \mathbf{k}) = st \left\{ \frac{3}{2} a|\mathbf{k}| + \frac{3}{8} a^2 \mathbf{k}^2 \sin(3\theta) \right\} + t' \left\{ -\frac{9}{4} a^2 \mathbf{k}^2 + 3 \right\} + O(|\mathbf{k}|^3). \quad (1.3.25)$$

Observamos que ésta expresión es la misma que la obtenida para \mathbf{K} pero con \mathbf{k} es reflejado respecto del eje k_1 , es decir $k_2 \rightarrow -k_2$. Esto corresponde a cambiar $\theta \rightarrow -\theta$ en la relación (1.5.1), lo cual cambia el signo del segundo término correspondiente a la contribución de primeros vecinos en el lado derecho de esa relación de dispersión.

A continuación vamos a comparar estos resultados con los obtenidos utilizando nuestro modelo. De la comparación entre la relación de dispersión alrededor del punto de Fermi \mathbf{K} , (1.5.1), y la relación de dispersión para el modelo libre, (1.2.22), observamos que podemos identificar $v_F \equiv \frac{3}{2} at$. Además, la contribución de segundos vecinos puede ser representada en nuestro modelo libre por el término de *masa* a partir de la identificación $-\frac{9}{4} t' a^2 \equiv \frac{1}{2m}$, a menos de un corrimiento rígido en el espectro de $3t'$ (al que podemos sustraer para restaurar la simetría partícula-agujero, al menos al orden lineal en $|\mathbf{k}|$). Esto significa que debemos considerar *masas negativas* en nuestro modelo efectivo de bajas energías para las fluctuaciones alrededor del punto K : $m = -2/(9t'a^2) < 0^1$.

¹De acuerdo a los valores de esos parámetros reportados en [31], tenemos

$$a = 1.42\text{\AA}, \quad t = 2.8\text{eV}, \quad t' = 0.1\text{eV}. \quad (1.3.26)$$

Queremos destacar que el término cuadrático en la contribución de primeros vecinos de la relación de dispersión (1.5.1), depende de la dirección del vector de onda k y, por lo tanto, no podemos reproducir esta conducta con nuestro modelo invariante frente a rotaciones. Sin embargo, podemos considerar a este término como una perturbación sobre nuestras soluciones, lo que será hecho más adelante.

Lo anteriormente expresado nos permite justificar nuestro modelo. En efecto, podemos suponer que el Hamiltoniano efectivo para los estados de baja energía de este sistema alrededor del punto K en presencia de un campo magnético uniforme y constante, H_K , puede obtenerse a través de un acoplamiento mínimo y coincide con el Hamiltoniano dado por (2.2.1).

Dado que la aplicación de nuestro modelo al Grafeno requiere $w \approx 10^3$ (ver nota al pie 1), un desarrollo para grandes valores de w para las energías (1.2.38) y autofunciones (1.2.38) dan, en una buena aproximación, una adecuada descripción del sistema. Así, para estados de cuasipartículas obtenemos

$$\mathcal{E}_{n,-} = (v_F \sqrt{eB}) \left\{ \sqrt{2(n+1)} - \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\}, \quad (1.3.29)$$

y para huecos

$$\mathcal{E}_{n,+} = (v_F \sqrt{eB}) \left\{ -\sqrt{2(n+1)} - \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\}. \quad (1.3.30)$$

Entonces,

$$v_F = 600 \text{ Km/sec}, \quad m = -3 \times 10^{-29} \text{ Kg}, \quad mc^2 = -4.3 \times 10^6 \text{ eV}, \quad (1.3.27)$$

mientras que en unidades naturales ($v_F/c \rightarrow v_F$, $mc/\hbar \rightarrow m$),

$$v_F = 2 \times 10^{-3}, \quad m = -8.53 \times 10^{13} \text{ m}^{-1}. \quad (1.3.28)$$

Es decir $|m| \simeq 32.9 m_e$, que corresponde a un valor grande para la masa (negativa) de las cuasipartículas. Por ejemplo, para un campo magnético externo del orden de $B = 10$ Tesla, obtenemos $w = \frac{|m|c}{\hbar} \frac{v_F}{c} \sqrt{\frac{\hbar}{eB}} = 1385$.

Existe, además, un estado de hueco adicional cuya energía es $\mathcal{E}_0 = -\frac{v_F\sqrt{eB}}{2w} < 0$, ligeramente por debajo del nivel de energía cero (ver (1.2.48)).

Si calculamos la diferencia de energías para los dos primeros estados de hueco, ésta resulta ser $v_F\sqrt{eB}(\sqrt{2} + O(w^{-1}))^2$.

1.3.1. Contribución del segundo punto de Dirac

Como mencionamos anteriormente, la relación de dispersión en las cercanías de los puntos de Dirac, \mathbf{K} y \mathbf{K}' , están relacionadas a través de una reflexión del vector \mathbf{k} alrededor del eje k_1 y por lo cual $p_2 \rightarrow -p_2$. Entonces el término lineal en el Hamiltoniano efectivo que describe los estados alrededor del segundo punto de Dirac puede escribirse según [31]

$$v_F(\sigma_1 p_1 - \sigma_2 p_2) = v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot \mathbf{p} = -\sigma_2 (v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \sigma_2. \quad (1.3.32)$$

En consecuencia, vamos a suponer que el Hamiltoniano efectivo que describe a las cuasi-partículas en las cercanías del segundo punto de Dirac en nuestro modelo, $H_{\mathbf{K}'}$, puede ser obtenido a partir del Hamiltoniano alrededor de \mathbf{K} a través de la transformación

$$H_{\mathbf{K}'} = -\sigma_2 H_{\mathbf{K}} \sigma_2 = -\frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}). \quad (1.3.33)$$

Notamos que tanto $H_{\mathbf{K}}$ como $H_{\mathbf{K}'}$ resultan invariantes ante transformaciones de inversión temporal (*time-reversal*) veces paridad, \mathcal{TP} ([?]). En

²Si $w = 10^3$ y $B = 10$ Tesla, en unidades completas obtenemos

$$v_F\sqrt{eB} \rightarrow \hbar c \frac{v_F}{c} \sqrt{\frac{eB}{\hbar}} = 4.87 \times 10^{-2} \text{ eV}. \quad (1.3.31)$$

y por lo tanto $\mathcal{E}_0 = -2.43 \times 10^{-5} \text{ eV}$ y $\mathcal{E}_{0,+} = -6.89 \times 10^{-2} \text{ eV}$.

efecto,

$$\begin{aligned}
(\mathcal{TP}) H_{\mathbf{K}} (\mathcal{TP})^\dagger &= \sigma_1 H_{\mathbf{K}}^* \sigma_1 \\
&= \sigma_1 \left\{ \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma}^* \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \right\} \sigma_1 \\
&= H_{\mathbf{K}}
\end{aligned} \tag{1.3.34}$$

y similarmente

$$\begin{aligned}
(\mathcal{TP}) H_{\mathbf{K}'} (\mathcal{TP})^\dagger &= -\sigma_2^* (\mathcal{TP}) H_{\mathbf{K}} (\mathcal{TP})^\dagger \sigma_2^* \\
&= -\sigma_2 H_{\mathbf{K}} \sigma_2 \\
&= H_{\mathbf{K}'} .
\end{aligned} \tag{1.3.35}$$

Resulta entonces evidente que el espectro de $H_{\mathbf{K}'}$ puede ser obtenido a partir del espectro de $H_{\mathbf{K}}$ mediante una reflexión alrededor del origen y sus correspondientes autofunciones generalizadas son σ_2 veces las de $H_{\mathbf{K}}$. Esto intercambia quasi-partículas con agujeros. En efecto,

$$H_{\mathbf{K}'} (\sigma_2 \psi_{k,n,s}) = -\sigma_2 (H_{\mathbf{K}} \psi_{k,n,s}) = -\mathcal{E}_{n,s} (\sigma_2 \psi_{k,n,s}) . \tag{1.3.36}$$

Además,

$$H_{\mathbf{K}'} (\sigma_2 \psi_0) = -\sigma_2 (H_{\mathbf{K}} \psi_0) = -\mathcal{E}_0 (\sigma_2 \psi_0) , \tag{1.3.37}$$

con una energía fundamental $\mathcal{E}'_0 = -\mathcal{E}_0 = \frac{v_F \sqrt{eB}}{2w} > 0$. Este estado corresponde a una quasi-partícula de energía ligeramente por encima de cero.

Entonces, tomando en cuenta los autoestados de ambos Hamiltonianos $H_{\mathbf{K}}$ y $H_{\mathbf{K}'}$ obtenemos, para estados de quasi-partículas y de huecos, un

espectro casi-doblemente degenerado, excepto para un estado de cuasi-partícula y un estado de hueco con energías cercanas a cero. Para estados de cuasi-partículas tenemos

$$\begin{aligned}\mathcal{E}_{n,-} &= \left(v_F \sqrt{eB}\right) \left\{ \sqrt{2(n+1)} - \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\}, \\ -\mathcal{E}_{n,+} &= \left(v_F \sqrt{eB}\right) \left\{ \sqrt{2(n+1)} + \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\},\end{aligned}\tag{1.3.38}$$

Con éstas expresiones calculamos el gap entre estados contiguos, resultan-do

$$\Delta\mathcal{E}_n = 2 \left(v_F \sqrt{eB}\right) \left\{ \frac{n+1}{w} + O(w^{-2}) \right\}.\tag{1.3.39}$$

Como discutiremos en la siguiente sección, éste espectro reproduce cualitativamente el efecto Hall cuántico entero anómalo encontrado en Grafeno [29, 30, 41, 42], que manifiesta una conductividad Hall no nula para pequeños (positivos o negativos) niveles de Fermi.

1.4. La conductividad Hall

Para entender el término “Resistencia Hall” vamos a considerar primero una aproximación intuitiva a la siguiente situación:

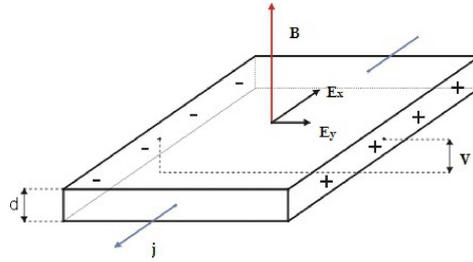


Figura 1.6: Esquema experimental

Imaginemos un material conductor o semiconductor, de ancho w y espesor d , en presencia de un campo magnético B y por el que circula una corriente I debida al movimiento de portadores de carga q que se mueven con rapidez v_q , entonces la densidad de corriente es:

$$j = \frac{I}{w d} = N q v_q \quad (1.4.1)$$

siendo N el número de portadores de carga por unidad de volumen.

Debido al campo magnético B , los portadores de carga experimentan una fuerza de Lorentz $F = \frac{1}{c} q v_q B$ que empujan las cargas y las reagrupan a un lado y al otro del conductor. Esta separación de las cargas produce un campo eléctrico $E = \frac{F}{q} = \frac{1}{c} v_q B$ entre los dos lados del conductor y una fuerza que balancea la Fuerza de Lorentz, asimismo este campo eléctrico produce una diferencia de potencial llamada "Potencial Hall" dada por $V_H = E w$, por lo cual definimos la "Resistencia Hall" como

$$R_H = \frac{V_H}{I} = \frac{1}{c} \frac{B}{N d q} = \frac{1}{c} \frac{B}{q N_a} \quad (1.4.2)$$

donde N_a es la densidad superficial de portadores de carga sobre el plano.

A nivel cuántico y para una muestra finita de dimensiones L_1 y L_2 , los valores posibles de k de la función de ondas (1.2.29), determinados por condiciones periódicas, son $k = \frac{2\pi}{L_2} l$, con $l \in \mathbb{Z}$. Entonces, el punto de equilibrio del oscilador armónico en la dirección x_1 correspondiente a las

soluciones de(1.2.30) ocurre en

$$\frac{k}{eB} = \frac{2\pi}{eBL_2} l \Rightarrow 0 \leq l \leq \frac{eBL_1L_2}{2\pi}. \quad (1.4.3)$$

Por lo cual $0 \leq l \leq l_0$, donde l_0 es la parte entera del producto de $\frac{eB}{2\pi}$ veces el área de la muestra.

Este número l_0 es el número de estados disponibles en cada nivel de Landau (despreciando el spin) para una muestra de área $L_1 L_2$, entonces el cociente $l_0/L_1 L_2$ determina la degeneración por unidad de área de la muestra en cuestión. La degeneración resultante, para cada nivel es:

$$N_0 = \frac{l_0}{L_1 L_2} = \frac{e B}{h c} \quad (1.4.4)$$

Ahora bien, cada nivel de Landau puede tomar el mismo número N_0 de electrones por unidad de área. Por lo tanto, si para un dado potencial químico ϵ_F tenemos exactamente n niveles de Landau llenos, entonces la densidad superficial de portadores de carga $N_a = n N_0$, $n = 1, 2, 3 \dots$ de modo que la resistencia Hall resulta

$$R_H = \frac{1}{\sigma_{xy}} = \frac{1}{c e n N_0} = \frac{h}{n e^2} = \frac{h}{e^2} \frac{1}{\nu} \quad (1.4.5)$$

donde σ_{xy} la *conductividad Hall* y donde hemos definido la *fracción de llenado* ν según

$$\nu = \frac{\text{número de partículas}}{\text{números de cuantos de flujo}} \quad (1.4.6)$$

que para el caso cuántico $\nu = n$, $n = 1, 2, 3 \dots$

Queremos destacar dos cosas:

La primera es que la resistencia Hall solamente depende del cociente de dos constantes fundamentales, la carga del electrón y la constante de Planck.

La segunda observación hace referencia a que en el caso cuántico la resistencia Hall ya no resulta proporcional al campo magnético B (esto solamente ocurre a campos magnéticos débiles) sino más bien aparece cuantizada o discretizada.

En 1980 von Klitzing y su grupo [58] estudiaron el comportamiento de un gas de electrones bidimensional bajo la influencia de un fuerte campo magnético (~ 10 Tesla), encontrando que al enfriar el gas a muy bajas temperaturas (~ 1 K) la resistencia Hall, ρ_{xy} , presenta una estructura de plateaus como podemos ver en la Figura 1.7. Los electrones forman un estado incompresible en esos plateaus, que corresponden a $\nu = 1, 2, 3 \dots$, debido a la estructura de los niveles de Landau. A este efecto de lo conoce como *Efecto Hall Cuántico Entero* (IQHE). Además, la resistencia se mantiene constante sobre un rango de valores de campo magnético (los plateaus) cuyo origen reside en los defectos presentes al material. Este efecto IQHE es característico de los sistemas semiconductores bidimensionales [61,62].

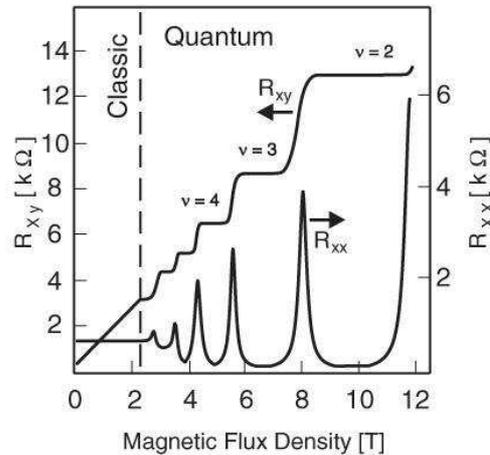


Figura 1.7: Resistencia Hall ρ_{xy} y Resistividad ρ_{xx} como función del campo B , para $T \sim 8$ mK [58]

Para el Grafeno, el Efecto Hall fue predicho por varias teorías que combinan niveles de Landau relativistas con la simetría partícula-hueco [41,60], pero sólo pudo medirse después de haber sido sintetizado ese material en el laboratorio, en el año 2005 [30]. Dos características resultan relevantes: la primera es que el Efecto Hall aparece a temperatura ambiente, a diferencia de lo que ocurre en un semiconductor en donde el efecto aparece sólo a bajas temperaturas, puesto que la energía de ciclotron para estos fermiones es grande. La segunda y principal es que los plateaus ocurren en valores semienteros de la fracciones de llenado ν , lo cual está relacionado con el hecho de que en el Grafeno los portadores de carga pueden ser descritos alrededor de los puntos de Dirac, en una primera aproximación, por una teoría de Dirac relativista no masiva y que la función de onda de los electrones tiene una fase de Berry de π , consecuencia de la excepcional topología de la estructura de bandas de este material. Por tal motivo a este efecto se lo conoce como *Efecto Hall Cuántico Entero Anómalo*. En la siguiente figura podemos observar el gráfico de la conductividad Hall σ_{xy} y la resistencia longitudinal ρ_{xx} para el grafeno como función de la concentración de los portadores.

La conductividad Hall $\sigma_{xy} = \frac{4e^2}{h}\nu$ es calculada a partir de las medidas de la Resistencia Hall, ρ_{xy} , y de la Resistencia longitudinal, ρ_{xx} , como función del potencial de gate V_g aplicado al sustrato de Si para controlar la densidad de carga en la muestra. Recordamos que $\sigma_{xy} = \frac{\rho_{xy}}{(\rho_{xy} + \rho_{xx})^2}$.

El primer plateau de la Conductividad Hall para el electrón y el hueco se sitúa en $\pm \frac{4e^2}{2h}$, cada vez que la *Energía de Fermi*, ϵ_F , ajustada a través del potencial de gate, cruce un nivel de Landau, σ_{xy} se incrementará (o disminuirá en caso de tratarse de un nivel de Landau asociado a un hueco) en una cantidad $4e^2/h$, de modo que los plateaus en la conductividad Hall aparecen para valores semienteros de la fracción de llenado ν .

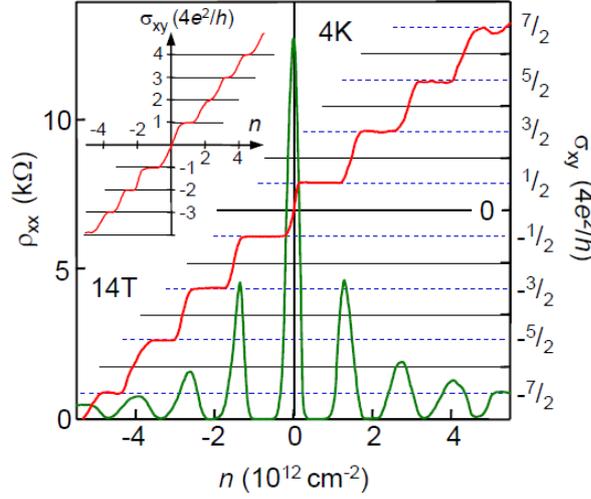


Figura 1.8: Conductividad Hall σ_{xy} y Resistencia longitudinal ρ_{xx} en función de la densidad a $B=14\text{T}$, [29].

1.4.1. Cálculo de la Conductividad Hall para nuestro modelo

La conductividad Hall tiene un carácter topológico [63, 64], por lo que puede ser calculada a partir de un desarrollo de la acción efectiva del sistema para campos y gradientes débiles. En efecto, la funcional generatriz de funciones de Green de este sistema bidimensional es

$$Z[A] = e^{i\Gamma[A]} := \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi e^{i \int dt \int d^2x \mathcal{L}(x)}, \quad (1.4.7)$$

donde $\Gamma[A]$ es la acción efectiva. A partir de esta funcional generatriz obtenemos que la primera derivada funcional respecto del campo $A_\mu(x)$ nos da el valor medio de la densidad de la corriente $j^\mu(x)$, es decir:

$$-i \frac{\delta \log Z[A]}{\delta A_\mu(x)} = \langle j^\mu(x) \rangle = J^\mu(x) \quad (1.4.8)$$

y la segunda derivada funcional nos da el negativo de la función de correlación corriente-corriente.

Para un sistema con un *gap* en su espectro (como es el caso de nuestro modelo para niveles de Landau llenos), la acción efectiva es una funcional del campo electromagnético externo que debe resultar invariante frente a transformaciones de gauge (locales) [63,64],

$$\Gamma[A] = \int dt \int d^2x \mathcal{L}_{eff}(A_\mu(x), \partial_\nu A_\mu(x), \dots) . \quad (1.4.9)$$

En general, en un desarrollo asintótico a campos y gradientes débiles, la invariancia de gauge determina que el Lagrangiano efectivo \mathcal{L}_{eff} aparece como un desarrollo en términos de las intensidades de campo \mathbf{E} y B y de sus derivadas. Sin embargo, en una teoría en 2+1 dimensiones existe una posibilidad adicional: un término de *Chern-Simons* que puede resultar dominante en este desarrollo [63,64],

$$\mathcal{L}_{eff} = \frac{K}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu \partial_\nu A_\lambda - \frac{1}{2} E_i \rho^{ij} E_j - \frac{1}{2} \chi B^2 + \dots , \quad (1.4.10)$$

donde $\epsilon^{\mu\nu\lambda}$ es el tensor antisimétrico de Levi-Civita, con $\epsilon^{012} = 1$, y los puntos suspensivos representan términos de orden superior.

De hecho, el término de Chern-Simons es el que determina la conductividad Hall puesto que

$$J^\mu(x) = \frac{\delta\Gamma[A]}{\delta A_\mu(x)} = \frac{K}{2\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} \partial_\nu A_\lambda + \dots = \frac{K}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} F_{\nu\lambda} + \dots . \quad (1.4.11)$$

En particular, las componentes espaciales y temporal de la corriente para la expresión anterior se reducen a

$$J_i(x) = \frac{K}{2\pi} \epsilon_{0ij} E_j + \dots , \quad J_0(x) = \frac{K}{2\pi} B + \dots . \quad (1.4.12)$$

La primera de estas ecuaciones en (1.4.12) implica que la conductividad Hall es $\sigma_{xy} = \frac{K}{2\pi}$ (ó $\sigma_{xy} = Ke^2/h$ en unidades completas). Entonces,

$$J_0 = \sigma_{xy}B. \quad (1.4.13)$$

Se puede mostrar que K toma valores enteros si el estado fundamental es no degenerado y tiene un gap de energía finito [63,64,74]. En este caso, K tiene un carácter topológico: puede ser relacionado a la fase de Berry, la cual toma valores 2π veces un número (entero) de Chern.

En nuestro caso particular conocemos exactamente a las autoenergías, por lo cual podemos emplear un método de evaluación más directo, basado en la relación establecida entre la corriente conservada y el campo magnético externo, (1.4.12) y (1.4.13).

Para nuestra propuesta será suficiente considerar el valor medio de la densidad $j_0(x)$ en el caso en que el campo eléctrico es nulo, mientras que el campo magnético \mathbf{B} es perpendicular al plano donde se mueve la partícula.

Comenzaremos escribiendo la función de partición de la partícula alrededor de un punto de Fermi para una dada temperatura $T = \frac{1}{\beta}$ (estamos considerando que $k_B = 1$) y un potencial químico μ , unívocamente determinada en el ensamble Gran Canónico. Ésta función de partición puede ser obtenida a través de una rotación de Wick de la funcional generatriz $Z[A]$ ((1.4.7)) del espacio Euclídeo (2+1)-dimensional, a la cual está relacionada por medio del reemplazo de los parámetros $x^0 = t \rightarrow -i\tau$ (con lo cual estamos compactificando el tiempo Euclídeo), $A_0 \rightarrow iA_3$, y manteniendo las otras coordenadas y componentes del campo de gauge \mathbf{A} inalteradas.

Para nuestro caso, $A_0 = 0 = A_1$, $A_2 = Bx_1$, y tomando en cuenta la expresión del del Lagrangiano correspondiente (1.2.8) y la función de partición $Z[A]$ (1.4.7), la rotación de Wick nos conduce a la siguiente función

de partición:

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu, B) := \int \mathcal{D}\psi^\dagger \mathcal{D}\psi e^{\int_0^\beta dt \int d^2x \psi^\dagger \left\{ -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu - H \right\} \psi}, \quad (1.4.14)$$

siendo H el Hamiltoniano $H_{\mathbf{K}}$ dado por (2.2.1) (o $H_{\mathbf{K}'}$) y la integral funcional es evaluada sobre el conjunto de configuraciones del campo fermiónico que satisfacen condiciones de contorno antiperiódicas en el intervalo $[0, \beta]$, de manera de reproducir la estadística de Fermi-Dirac. Bajo estas condiciones el valor medio del número de partículas está dado en este ensamble por

$$\langle N \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \mu}(\beta, \mu, B), \quad (1.4.15)$$

puesto que el número medio de partículas multiplicado por $|e|$, da por resultado la carga media.

Por lo tanto, comenzaremos calculando la carga media de la teoría en cada una de las dos representaciones, correspondientes a los dos puntos de Dirac \mathbf{K}, \mathbf{K}' . Entonces, a partir de la función de partición (1.4.14) podemos obtener:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \mu}(\beta, \mu, B) &= \int_0^\beta dt \int d^2x \langle \psi^\dagger \psi \rangle = \\ &= \beta \int d^2x \frac{1}{e} J_0(\beta, \mu, B) = \beta \int d^2x \frac{\sigma_{xy}}{e} B, \end{aligned} \quad (1.4.16)$$

donde hemos usado la ecuación (1.4.13).

El paso siguiente es evaluar la función de partición como el determinante funcional

$$\mathcal{Z}(\beta, \mu, B) = \text{Det}(D) \quad (1.4.17)$$

siendo $D = -\frac{\partial}{\partial \tau} + \mu - H$ el operador diferencial definido sobre el dominio de las funciones antiperiódicas de $\tau \in [0, \beta]$. Destacamos que aún cuando este operador D no es simétrico, posee un conjunto completo de autofunciones generalizadas que son ortogonales, puesto que H no depende de τ ,

construidas como

$$\Psi_{l,k,n,s} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-i\omega_l \tau} \psi_{k,n,s}, \quad \Psi_{l,k,0} = \frac{1}{\sqrt{\beta}} e^{-i\omega_l \tau} \psi_{k,0}, \quad (1.4.18)$$

con $l \in \mathbb{Z}$, $k \in \mathbb{R}$, $n = 0, 1, 2, \dots$, $s = \pm 1$. Las frecuencias de Matsubara ω_l resultan de imponer condiciones antiperiódicas en $\tau \in [0, \beta]$, y están dadas por

$$\omega_l = \frac{2\pi}{\beta} \left(l + \frac{1}{2} \right), \quad \text{with } \omega_l = -\omega_{-l-1}. \quad (1.4.19)$$

Entonces, los autovalores del operador D están dados por

$$D\Psi_{l,k,n,s} = \lambda_{l,n,s} \Psi_{l,k,n,s}, \quad \lambda_{l,n,s} = i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_{n,s}, \quad (1.4.20)$$

$$D\Psi_{l,k,0} = \lambda_{l,0} \Psi_{l,k,0}, \quad \lambda_{l,0} = i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_0,$$

donde $\mathcal{E}_{n,s}$, (1.2.38) y $\mathcal{E}_0 = -\frac{v_F \sqrt{eB}}{2w} < 0$.

Observamos que tanto $\lambda_{l,n,s}$ como $\lambda_{l,0}$ son independientes de k , entonces al evaluar $\text{Det}(D)$ vamos a olvidar el índice k y, al finalizar el cálculo, introduciremos la degeneración *por unidad de área* multiplicando nuestros resultados por este valor.

Esta degeneración, conocida como *Degeneración de Landau*, está dada por el número de cuantos de flujo por unidad de área [63, 64], $\Delta = eB/2\pi$ (ó $\Delta = eB/h$ en unidades completas).

Recordamos que podemos definir $\text{Det}(D)$ a través de la función (invariante de gauge) ζ asociada a ese operador [65, 66], de modo que

$$\log \text{Det}(D) := -\frac{d}{du} \text{Tr} \left\{ \left(\frac{D}{\Lambda} \right)^{-u} \right\} \Bigg|_{u \rightarrow 0}, \quad (1.4.21)$$

donde hemos introducido una escala arbitraria de masa, Λ , de manera que el cociente $\frac{D}{\Lambda}$ resulte adimensional. Destacamos que los resultados con significado físico deben ser independientes de esta escala de masa.

La traza es evaluada para $\Re(u)$ suficientemente grande y el símbolo $u \rightarrow 0$ indica la continuación analítica de sus derivadas a un entorno de $u = 0$. En nuestro caso,

$$\log \mathcal{Z}(\beta, \mu, B) = -\frac{d}{du} \left\{ \sum_{l,n,s} \left(\frac{\lambda_{l,n,s}}{\Lambda} \right)^{-u} + \sum_l \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} \right\} \Big|_{u \rightarrow 0}. \quad (1.4.22)$$

Para calcular esto vamos a considerar, primeramente, la contribución correspondiente al segundo término del lado derecho de la igualdad anterior, es decir la contribución del modo de energía más próxima de cero, de esta manera

$$\begin{aligned} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} + \sum_{l=-\infty}^{-1} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u} + \sum_{l=1}^{\infty} \left(\frac{i\omega_{-l} + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u} + \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{i\omega_{-l-1} + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u} \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u} + \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{-i\omega_l + \mu - \mathcal{E}_0}{\Lambda} \right)^{-u}, \end{aligned} \quad (1.4.23)$$

donde hemos empleado las propiedades de las frecuencias de Matsubara. Reemplazando explícitamente estas frecuencias (1.4.19), podemos escribir

la contribución de ese modo como

$$\begin{aligned}
\sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} &= \left(\frac{2\pi}{\beta\Lambda} \right)^{-u} \left\{ \sum_{l=0}^{\infty} \left[i \left(l + \frac{1}{2} \right) + \frac{\beta}{2\pi} (\mu - \mathcal{E}_0) \right]^{-u} \right. \\
&\quad \left. + \sum_{l=0}^{\infty} \left[-i \left(l + \frac{1}{2} \right) + \frac{\beta}{2\pi} (\mu - \mathcal{E}_0) \right]^{-u} \right\} \\
&= \left(\frac{2\pi}{\beta\Lambda} \right)^{-u} \left\{ (i)^{-u} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) - i \frac{\beta}{2\pi} \text{sign}(\mu - \mathcal{E}_0) |\mu - \mathcal{E}_0| \right]^{-u} \right. \\
&\quad \left. + (-i)^{-u} \sum_{l=0}^{\infty} \left[\left(l + \frac{1}{2} \right) + i \frac{\beta}{2\pi} \text{sign}(\mu - \mathcal{E}_0) |\mu - \mathcal{E}_0| \right]^{-u} \right\}.
\end{aligned} \tag{1.4.24}$$

Las series de la ecuación anterior puede ser expresadas en términos de la función ζ de Hurwitz, $\zeta(s, a)$ [69]. Tomando en cuenta que esta función tiene un corte ramal en el plano complejo de su segundo argumento y considerando la rama principal, $-\pi < \arg(a) < \pi$, podemos escribir

$$\begin{aligned}
\sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} &= \left(\frac{2\pi}{\beta\Lambda} \right)^{-u} \left\{ e^{-i\frac{\pi}{2}u} \zeta \left(u, \frac{1}{2} + e^{-i\frac{\pi}{2} \text{sign}(\mu - \mathcal{E}_0)} \frac{\beta}{2\pi} |\mu - \mathcal{E}_0| \right) \right. \\
&\quad \left. + e^{i\frac{\pi}{2}u} \zeta \left(u, \frac{1}{2} + e^{i\frac{\pi}{2} \text{sign}(\mu - \mathcal{E}_0)} \frac{\beta}{2\pi} |\mu - \mathcal{E}_0| \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{1.4.25}$$

La expresión encerrada entre corchetes tiene una continuación analítica nula en $u = 0$, en consecuencia, la derivada de esta contribución con respecto a u evaluada en el límite $u \rightarrow 0$ no depende de la escala arbitraria Λ . Por lo tanto, la contribución de este nivel de Landau al $\log \text{Det} D$ por unidad de área y en el límite de bajas temperaturas está dado por [67, 68]

$$\Delta \left\{ -\frac{d}{du} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \left(\frac{\lambda_{l,0}}{\Lambda} \right)^{-u} \Big|_{u \rightarrow 0} \right\} = \frac{eB}{2\pi} \left\{ \beta (\mathcal{E}_0 - \mu) \Theta (\mathcal{E}_0 - \mu) + o \left(\frac{1}{\beta |\mu - \mathcal{E}_0|} \right) \right\}. \tag{1.4.26}$$

Tomando en cuenta que estamos interesados en el número medio de partículas con respecto al material neutro (*i.e.*, con todos los niveles de Landau asociados a energías negativas llenos, lo que corresponde a $\mu = 0$), a partir de (1.4.22) vemos que la contribución del nivel más bajo de Landau con energía \mathcal{E}_0 a la conductividad Hall a temperatura cero resulta ser

$$\begin{aligned} \frac{B}{e} \sigma_{xy} \Big|_{\mathcal{E}_0} &= \frac{Be}{2\pi} \left\{ \frac{\partial}{\partial \mu} [(\mathcal{E}_0 - \mu) \Theta(\mathcal{E}_0 - \mu)] - \frac{\partial}{\partial \mu} [(\mathcal{E}_0 - \mu) \Theta(\mathcal{E}_0 - \mu)] \Big|_{\mu=0} \right\} \\ &= \frac{Be}{2\pi} \{-\Theta(\mathcal{E}_0 - \mu) + \Theta(\mathcal{E}_0)\} \\ &= \frac{Be}{2\pi} \{\Theta(\mathcal{E}_0)\Theta(\mu - \mathcal{E}_0) - \Theta(-\mathcal{E}_0)\Theta(\mathcal{E}_0 - \mu)\} \end{aligned} \quad (1.4.27)$$

Entonces, si \mathcal{E}_0 es positivo, la contribución del nivel de Landau más bajo a la conductividad Hall, σ_{xy} , es $(+\frac{e^2}{2\pi})$ siempre que el potencial químico satisfaga $\mu > \mathcal{E}_0$ y cero en caso contrario. Por otro lado, para energías \mathcal{E}_0 negativas, la contribución a σ_{xy} resulta ser $(-\frac{e^2}{2\pi})$ si $\mu < \mathcal{E}_0$ y cero en caso contrario.

En este punto está claro que obtendremos un resultado similar para cualquier otro nivel de Landau. En efecto, podemos hacer las mismas consideraciones para cualquier otro autovalor \mathcal{E} . Entonces, para un dado potencial químico μ , sólomente hay un número finito de contribuciones no nulas a la conductividad Hall y, por lo tanto, podemos escribir

$$\sigma_{xy}|_{H_{\mathbf{K}}} = \frac{e^2}{2\pi} \left\{ \Theta(\mu) \left(\sum_{0 < \mathcal{E} < \mu} 1 \right) - \Theta(-\mu) \left(\sum_{\mu < \mathcal{E} < 0} 1 \right) \right\}, \quad (1.4.28)$$

donde las sumas son extendidas sobre todos los niveles de energía. Destacamos que este resultado es general para el problema de Landau de un sistema fermiónico con espectro discreto sin puntos de acumulación.

Para el modelo que hemos desarrollando, el espectro resulta ser la unión del espectro del Hamiltoniano alrededor de \mathbf{K} , $H_{\mathbf{K}}$, y del correspondiente

a \mathbf{K}' , $H_{\mathbf{K}'}$, es decir $\mathcal{E} \in \text{Spec}H_{\mathbf{K}} \cup \text{Spec}H_{\mathbf{K}'}$, el cual toma en cuenta los estados alrededor de ambos puntos de Fermi. Es importante recordar que, además, debemos considerar la degeneración adicional que corresponde a las dos polarizaciones del spin del electron, que hasta el momento no ha jugado ningún rol en nuestro análisis.

En unidades completas la conductividad Hall puede escribirse entonces como

$$\sigma_{xy} = \frac{2e^2}{h} \left\{ \Theta(\mu) \left(\sum_{0 < \mathcal{E} < \mu} 1 \right) - \Theta(-\mu) \left(\sum_{\mu < \mathcal{E} < 0} 1 \right) \right\}. \quad (1.4.29)$$

Observamos que

$$\left| \frac{h}{4e^2} \sigma_{xy} \right| = \frac{1}{2} \quad (1.4.30)$$

para pequeños valores del potencial químico $|\mu|$ (tal que $|\mu| > |\mathcal{E}_0| = \frac{v_F \sqrt{eB}}{2w}$). Este valor es característico del *Efecto Hall cuántico entero anómalo* (AIQHE) encontrado experimentalmente para el grafeno [29, 30, 41, 42], que muestra una conductividad Hall que resulta no nula para los niveles más bajos de Fermi (positivos o negativos).

En la figura 1.9 hemos graficado la conductividad Hall para nuestro modelo como función del potencial químico μ (igual al nivel de Fermi ϵ_F a temperatura cero) para $w = 10^3$ (ver nota 1). Destacamos que no es posible apreciar la estructura del doble escalón en el gráfico y esto se debe a que la diferencia entre dos niveles contiguos es proporcional al $\frac{1}{w}$, (1.3.39) (Ver Figura 1.10).

Señalemos el hecho de que la conductividad Hall para nuestro modelo se anula en un pequeño entorno del origen, para potenciales químicos tales que $|\mu| < \frac{v_F \sqrt{eB}}{2w}$.

Por último, destaquemos que en nuestros cálculos de la Conductividad Hall a partir de la función ζ para nuestro modelo no hemos hecho elección

alguna de las fases del determinante del operador D , lo que en cambio resulta necesario al calcular la Conductividad Hall a partir de la función ζ para el modelo (lineal) pseudo-relativista [73], el cual presenta un par de modos cero degenerados. En efecto, nuestro Hamiltoniano es un operador diferencial de segundo orden que no tiene modos ceros.

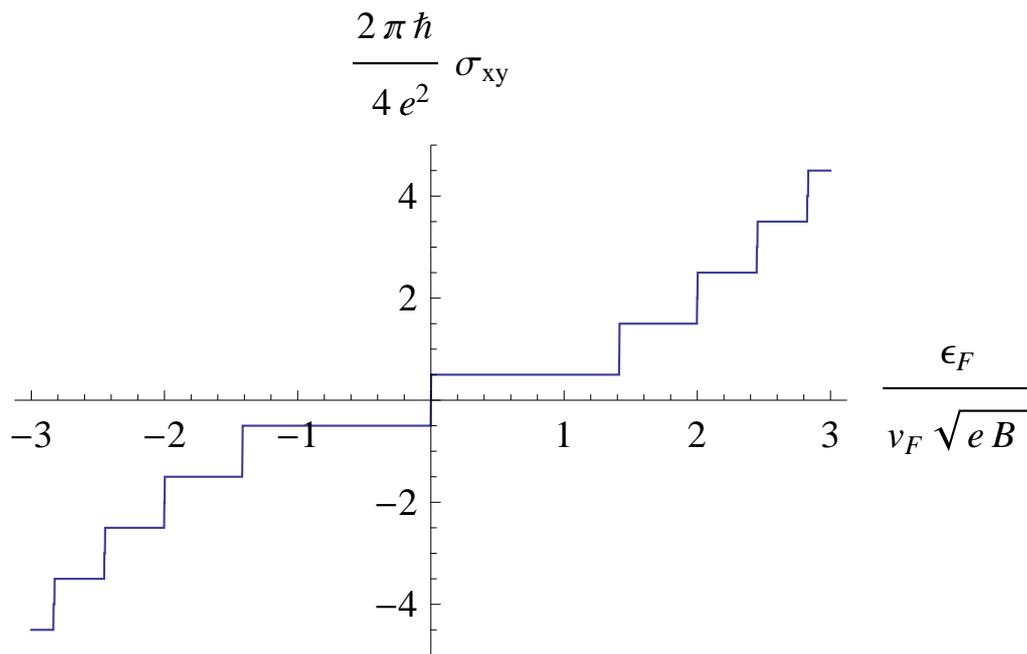


Figura 1.9: La conductividad Hall calculada a partir de nuestro modelo para $w = 10^3$

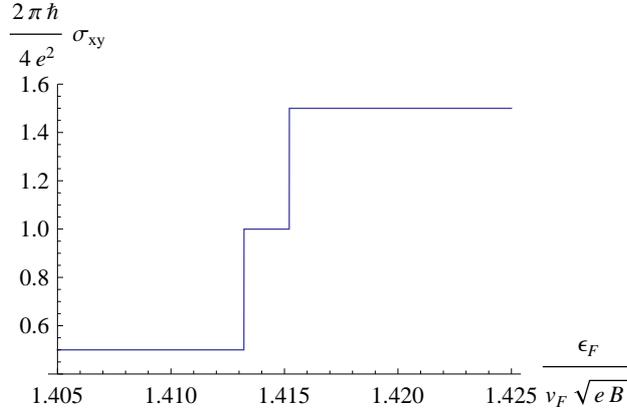


Figura 1.10: La estructura de los escalones en la conductividad Hall de $\frac{1}{2}$ a $\frac{3}{2}$, $w = 10^3$

1.5. Término anisótropo en la relación de dispersion del grafeno tratado perturbativamente

Recordamos que la relación de dispersion obtenida para el grafeno de la aproximación de tight-binding, en las cercanías de un punto de Dirac es

$$E_s(\mathbf{K} + \mathbf{k}) = st \left[\frac{3}{2} a|\mathbf{k}| - \frac{3}{8} a^2 \mathbf{k}^2 \sin(3\theta) \right] + t' \left[-\frac{9}{4} a^2 \mathbf{k}^2 + 3 \right] + O(|\mathbf{k}|^3), \quad (1.5.1)$$

donde $\tan(\theta) = k_2/k_1$ y $s = \pm 1$.

Como hemos mencionado anteriormente, el término cuadrático no isótropo en esta relación no puede ser representada por nuestro modelo (isótropo). Sin embargo, podemos pensarlo como una perturbación (que rompe la simetría rotacional) sobre el sistema libre, cuyas soluciones ya conocemos, (1.2.17) y (1.2.23).

Consideremos entonces

$$\Delta H = -\frac{a}{4} v_F p_2 [4p_1^2 - \mathbf{p}^2] (\mathbf{p}^2)^{-1} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \quad (1.5.2)$$

y apliquémoslo a una solución del problema libre $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})$. Obtenemos

$$\Delta H \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = -\frac{a}{4} v_F e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}} k_2 [4k_1^2 - \mathbf{k}^2] (\mathbf{k}^2)^{-1/2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{k}}) \chi_s(\mathbf{k}) \quad (1.5.3)$$

$$= -s \frac{a}{4} v_F k_2 [4k_1^2 - \mathbf{k}^2] (\mathbf{k}^2)^{-1/2} \psi_s(\mathbf{k}) \quad (1.5.4)$$

$$= -s \frac{3}{8} t a^2 \mathbf{k}^2 \sin(3\theta) \psi_s(\mathbf{k}).$$

donde hemos usado la identificación $v_F \equiv \frac{3a}{2}t$ y las siguientes relaciones:

$$\cos(\theta) = \frac{k_1}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad \sin(\theta) = \frac{k_2}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}}, \quad \tan(\theta) = \frac{k_2}{k_1} \quad (1.5.5)$$

Este resultado nos permite suponer que, en presencia de un campo electromagnético \mathbf{A} , las derivadas cambian a derivadas covariantes permitiéndonos escribir a la perturbación en su forma hermítica como

$$\begin{aligned} \Delta H = -\frac{a}{8} v_F \left\{ (p_2 - eA_2) [4(p_1 - eA_1)^2 - (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2] [(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2]^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \right. \\ \left. + \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) [(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2]^{-1} [4(p_1 - eA_1)^2 - (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2] (p_2 - eA_2) \right\}. \end{aligned} \quad (1.5.6)$$

Si bien observamos una indeterminación en el orden en que aparecen los operadores, volveremos a tratar este tema más adelante, por lo cual nos olvidaremos de esto por el momento.

Consideremos el caso de un campo magnético constante como el dado en (1.2.27), para el cual tenemos

$$p_1 - eA_1 = p_1 = \sqrt{eB} p, \quad p_2 - eA_2 = p_2 - eBx_1 = -\sqrt{eB} q, \quad (1.5.7)$$

de modo que la perturbación ΔH se reduce a

$$\begin{aligned} \Delta H &= -\frac{a}{8}v_F\sqrt{eB} \left\{ q [4p^2 - (p^2 + q^2)] [p^2 + q^2]^{-1} [p\sigma_1 - q\sigma_2] \right. \\ &\quad \left. + [p\sigma_1 - q\sigma_2] [p^2 + q^2]^{-1} [4p^2 - (p^2 + q^2)] q \right\} \quad (1.5.8) \\ &= \mathfrak{H} + \mathfrak{H}^\dagger, \end{aligned}$$

donde hemos definido al operador \mathfrak{H} como

$$\mathfrak{H} = -\frac{a}{8}v_F\sqrt{eB} q [4p^2 - (p^2 + q^2)] [p^2 + q^2]^{-1} [p\sigma_1 - q\sigma_2]. \quad (1.5.9)$$

Entonces, tomando en cuenta la ecuación (1.2.33),

$$[p\sigma_1 - q\sigma_2] \psi_{k,n,s}(\mathbf{x}) = -\frac{1}{w} \left\{ \frac{m}{eB} \mathcal{E}_{n,s} - \frac{1}{2} (p^2 + q^2) \right\} \psi_{k,n,s}(\mathbf{x}), \quad (1.5.10)$$

donde $\mathcal{E}_{n,s}$ están dadas por (1.2.57), al aplicar el operador hermítico \mathfrak{H} a las autofunciones del Hamiltoniano de nuestro modelo en presencia de un

campo magnético uniforme y constante, (1.2.41), podemos escribir:

$$\begin{aligned}
 \mathfrak{H}\psi_{k,n,s}(\mathbf{x}) &= \frac{a}{4} v_F \sqrt{eB} \frac{K_{n,s}}{w} \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} q [4p^2 - (p^2 + q^2)] [p^2 + q^2]^{-1} \left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s - \frac{1}{2}}(p^2 + q^2) \right\} \times \\
 &\quad e^{-\frac{q^2}{2}} \left(\begin{array}{c} H_{n+1}(q) \\ -\frac{i}{2w} \left[1 - s \sqrt{1 + 8w^2(n+1)} \right] H_n(q) \end{array} \right) \\
 &= \frac{a}{8} v_F \sqrt{eB} \frac{K_{n,s}}{w} \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} q \times \tag{1.5.11} \\
 &\quad \left(\begin{array}{c} \left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s - \frac{1}{2}}(2n+3) \right\} [4\partial_p^2 + (2n+3)] e^{-\frac{q^2}{2}} H_{n+1}(q) \\ -\frac{i}{2w} \left[1 - s \sqrt{1 + 8w^2(n+1)} \right] \left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s - \frac{1}{2}}(2n+1) \right\} [4\partial_p^2 + (2n+1)] e^{-\frac{q^2}{2}} H_n(q) \end{array} \right) \\
 &= \frac{a}{8} v_F \sqrt{eB} \frac{K_{n,s}}{w} \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} q e^{-\frac{q^2}{2}} \times \\
 &\quad \left(\begin{array}{c} \left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s - \frac{1}{2}}(2n+3) \right\} [4q^2 - 3(2n+3)] H_{n+1}(q) \\ -i \left[\frac{1 - s \sqrt{1 + 8w^2(n+1)}}{2w} \right] \left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s - \frac{1}{2}}(2n+1) \right\} [4q^2 - 3(2n+1)] H_n(q) \end{array} \right).
 \end{aligned}$$

La corrección a primer orden perturbativo para los autovalores del

Hamiltoniano (1.2.28) está dada por los elementos de matriz

$$\begin{aligned}
 (\psi_{k',n,s}, \Delta H \psi_{k,n,s}) &= (\psi_{k',n,s}, \mathfrak{H} \psi_{k,n,s}) + (\mathfrak{H} \psi_{k',n,s}, \psi_{k,n,s}) \\
 &= 2\Re \{(\psi_{k',n,s}, \mathfrak{H} \psi_{k,n,s})\} \\
 &= \delta(k - k') a v_F \sqrt{eB} \frac{K_{n,s}^2}{w} \times \\
 &\quad \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{-q^2} q \left\{ \frac{\left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s} - \frac{1}{2}(2n+3) \right\}}{[2n+3]} [4q^2 - 3(2n+3)] H_{n+1}^2(q) + \right. \\
 &\quad \left. + \left[\frac{1-s\sqrt{1+8w^2(n+1)}}{2w} \right]^2 \frac{\left\{ \frac{m}{eB} \varepsilon_{n,s} - \frac{1}{2}(2n+1) \right\}}{[2n+1]} [4q^2 - 3(2n+1)] H_n^2(q) \right\} \\
 &= 0,
 \end{aligned} \tag{1.5.12}$$

que se anulan trivialmente puesto que tenemos la integral sobre toda la recta real de una función impar de q , dado que las funciones de Hermite tienen paridad bien definida [70].

Como hemos notado anteriormente, existe una indeterminación de orden en la expresión del operador \mathfrak{H} , (1.5.9), puesto que los operadores en el lado derecho de (1.5.2) no conmutan. Sin embargo, para cualquier ordenamiento de los operadores que elijamos obtendremos una expresión en el integrando del valor medio $(\psi_{k',n,s}, \Delta H \psi_{k,n,s})$ que será impar en q , resultando así una corrección a primer orden perturbativo nula.

Por otra parte, es trivial demostrar que $\mathfrak{H} \psi_0 = 0$, siendo ψ_0 la solución asociada al modo cero dada en (1.2.49).

Por consiguiente, el término anisotrópico de la relación de dispersion (1.5.1) no produce correcciones al primer orden de la teoría de perturbaciones en las autoenergías dadas por (1.2.57), donde la perturbación está dada por ΔH , (1.5.6) (aún cuando tomemos cualquier otra permutación

de los factores en ξ en la (1.5.9)). Esto significa que, en presencia de un campo magnético constante ortogonal al plano, el espectro del Hamiltoniano de nuestro modelo se mantiene estable ante perturbaciones que rompen la simetría ante rotaciones como en (1.5.8). Por lo tanto, la conductividad Hall y la explicación del efecto Hall cuántico entero anómalo basada en nuestro modelo efectivo no resulta modificada, a primer orden en teoría de perturbaciones, por el término anisótropo ΔH proveniente del orden cuadrático en la relación de dispersion originado en la interacción de primeros vecinos en la aproximación de tight-binding.

1.6. Campo magnético y eléctrico cruzados

Consideremos ahora el caso en que no sólo está presente un campo magnético B uniformemente constante perpendicular al plano sino también un campo eléctrico en la dirección de x_1 .

Bajo estas consideraciones, podemos escribir al campo electromagnético A_μ como

$$\mathbf{A} := Bx_1 \hat{\mathbf{e}}_2, \quad A_0 := -Ex_1, \quad (1.6.1)$$

Entonces, el Hamiltoniano en el gauge de Coulomb resulta

$$H = \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) - eA_0. \quad (1.6.2)$$

En el límite en que $m \rightarrow \infty$, podemos resolver la ecuación de autovalores para campos magnético y eléctrico cruzados en términos de las soluciones para el caso en que solo está presente un campo magnético perpendicular al plano del grafeno, empleando una pseudo transformación de Lorentz [71–73]. Sin embargo en nuestro modelo no relativista el término cuadrático nos impide resolver el problema de esa manera.

Observamos que, para estos campos, el Hamiltoniano asociado (1.6.2) es independiente de la coordenada x_2 . En otras palabras, resulta invariante ante traslaciones en esta dirección, por lo cual proponemos la misma clase de soluciones que para el caso en que el campo eléctrico está ausente,

$\Psi(\mathbf{x}) = \frac{e^{ikx_2}}{\sqrt{2\pi}} \begin{pmatrix} \varphi(x_1) \\ \chi(x_1) \end{pmatrix}$, de modo que la ecuación de autovalores se reduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales acopladas

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\left[p_1^2 + (eB)^2 \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right)^2 \right] - \lambda + 2meEx_1 \right) \varphi = \\ \qquad \qquad \qquad = -2mv_F \left(p_1 + ieB \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right) \right) \chi, \\ \left(\left[p_1^2 + (eB)^2 \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right)^2 \right] - \lambda + 2meEx_1 \right) \chi = \\ \qquad \qquad \qquad = -2mv_F \left(p_1 - ieB \left(x_1 - \frac{k}{eB} \right) \right) \varphi, \end{array} \right. \quad (1.6.3)$$

donde $\lambda = 2m\mathcal{E}$ en unidades naturales.

Al igual que en el caso donde el campo eléctrico está ausente, resulta conveniente definir nuevas variables q y su correspondiente variable conjugada p de la siguiente manera

$$q := \sqrt{eB} \left[x_1 - \frac{k}{eB} + \frac{mE}{eB^2} \right], \quad p := -i \frac{\partial}{\partial q} = \left(\frac{-i}{\sqrt{eB}} \right) \frac{\partial}{\partial x_1} \quad (1.6.4)$$

en términos de las cuales la ecuación de autovalores se escribe como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \left[p^2 + q^2 - \frac{\Lambda}{eB} \right] \varphi(q) = 2w \left[[p + iq] + iw \frac{E}{v_F B} \right] \chi(q), \\ \left\{ p^2 + q^2 - \frac{\Lambda}{eB} \right\} \chi(q) = 2w \left[[p - iq] - iw \frac{E}{v_F B} \right] \varphi(q), \end{array} \right. \quad (1.6.5)$$

donde hemos definido

$$\Lambda := \lambda + \frac{mE}{B} \left[\frac{mE}{B} - 2k \right] \quad (1.6.6)$$

y $\lambda = 2m\mathcal{E}$.

Notamos que, para pequeños campos eléctricos, el último término en el lado derecho del sistema anterior (1.6.5) puede ser tratado como una perturbación $\left(\frac{w^2 E}{mv_F B}\right) \sigma_2$ del Hamiltoniano cuyas soluciones son las mismas funciones de q que las obtenidas anteriormente (1.2.29), con la diferencia de que la posición de equilibrio del oscilador armónico en la dirección x_1 está desplazada en una cantidad $\left(-\frac{mE}{eB^2}\right)$. Asimismo, las energías a orden cero perturbativo están dadas por la ecuación (1.2.57) pero corridas en una cantidad $\frac{E}{B} \left[k - \frac{mE}{2B}\right]$.

Por otro lado, como la perturbación es proporcional a σ_2 , entonces la primera corrección a las energías es nula, puesto que las funciones de Hermite son ortogonales entre si, (1.2.29). Entonces, el efecto de considerar un campo eléctrico ortogonal al campo magnético, solo produce un corrimiento rígido del espectro correspondiente a $A_0 = 0$, al menos a primero orden en teoría de perturbaciones en el parámetro $(E/v_F B)$.

Aplicaciones de nuestro Modelo

2.1. Introducción

Desde la sintetización del grafeno en el laboratorio [28] y sus posibles aplicaciones a dispositivos electrónicos, numerosas investigaciones se han enfocado en las propiedades electrónicas de este material bidimensional. Se sabe que las propiedades electrónicas de transporte y mecánicas del grafeno pueden cambiar en presencia de defectos en la red, de hecho las consecuencias de la presencia de defectos en grafeno ya habían sido analizadas antes de su sintetización [75]. Las propiedades electrónicas de defectos topológicos en el grafeno han sido ampliamente estudiadas en la literatura a través de métodos numéricos [76–78], encontrando que estos defectos inducen una inhomogeneidad de carga en las muestras con patrones característicos, lo cuales pueden ser observados a través de medidas efectuadas por el Microscopio de Efecto Túnel (STM), y de Microscopio de Fuerza Electroestática (EFM).

En presencia de defectos topológicos, la topología de la red del grafeno cambia, afectando así sus propiedades globales. De entre los defectos to-

pológicos se pueden mencionar las disclinaciones (relacionados a la introducción de pentágonos o heptágonos en la red) o las dislocaciones (relacionados a la introducción de pares de pentágonos-heptágonos en la red del grafeno). Queremos remarcar el hecho de que en el límite continuo el material es descrito por una variedad donde la curvatura está asociada a las disclinaciones y la torsión a las dislocaciones en el medio [32].

Una manera natural de producir una curvatura local en la red del grafeno es sustituyendo algunos hexágonos por pentágonos (que producen curvatura positiva) o heptágonos (curvatura negativa). En el límite continuo, podemos sustituir un pentágono en la red por un flujo magnético ficticio localizado en ese mismo punto, en otras palabras podemos modelar un pentágono en la red mediante un flujo singular del tipo Bohm-Aharonov. En estas condiciones, podemos ajustar el flujo del campo de manera tal que la fase adquirida por el espinor cuando da una vuelta alrededor del flujo singular sea la misma que la inducida cuando se da una vuelta alrededor del pentágono. Este procedimiento tiene la ventaja de ser fácilmente generalizado a defectos cónicos de un ángulo de apertura arbitrario. En el laboratorio podemos obtener la anterior configuración de campo magnético al poner un superconductor *tipo-II* sobre una capa de grafeno o bien utilizando heterojunciones (interfases) semiconductoras que contienen un gas de electrones bidimensional (2DEG) [54, 79–83]. Teniendo en cuenta lo anteriormente dicho, estudiaremos en la primera parte de este capítulo la modificación del espectro de nuestro modelo efectivo, y consecuentemente de la Conductividad Hall, debido a la presencia de un flujo singular Φ en el origen del plano.

Por otra parte, la sintetización experimental de este material ha dado impulso a la consideración y estudio de sus posibles aplicaciones prácticas. En el marco de la teoría lineal para las fluctuaciones alrededor de los puntos de Dirac, en la cual los electrones son descritos como fermiones de Dirac no masivos, y empleando métodos propios de la teoría cuántica de campos [73, 84, 85], se ha establecido la ausencia de gap en muestras de

tamaño infinito de este material bidimensional (esto se debe a que las bandas de conducción y de valencia, las cuales tienen la forma de un par de conos invertidos, se encuentran en un solo punto $E = 0$ en el espacio de momentos), así como la existencia de una conductividad mínima no nula, características que constituyen un obstáculo para el empleo del grafeno en dispositivos electrónicos.

Experimentalmente se encontró un modo inusual de controlar la densidad de portadores en el grafeno. Al aplicar un *gate voltage* (compuerta de tensión) positivo al grafeno los electrones son atraídos, de manera que la energía de Fermi pertenece a las bandas de energías positivas, $E > 0$, que corresponde a las bandas de conducción del material. A medida que el potencial de gate disminuye, la densidad de electrones decrece, pero la conductancia no se anula para $E = 0$ (como sucede para un semiconductor normal), hasta alcanzar un valor mínimo comparable a la conductancia cuántica e^2/h . A medida que el potencial se hace cada vez más negativo, la conductancia aumenta de nuevo, puesto que los huecos son atraídos [28, 47]. En el grafeno, la ausencia de un gap de energía imposibilita reducir la concentración de portadores completamente y producir una conductancia nula. Esto nos conduce a buscar nuevos caminos para poder aplicar este nuevo material a la fabricación de transistores. En ese contexto, han tenido lugar un gran número de estudios que consideran la posibilidad de abrir y controlar un gap de energía en el grafeno, por ejemplo, en muestras de tamaño finito como nanodots y nanoribbons. En efecto, existen medidas experimentales de la conductividad eléctrica en dispositivos basados en grafeno que muestran la existencia de un gap bajo ciertas condiciones [86–89], en particular se encontró que para discos de tamaño $< 100nm$ se pudo alcanzar regímenes donde los picos de conductancia dejan de ser periódicos, los cuales son controlados por la energía de los electrones atrapados dentro del disco [90]. De hecho, en el modelo efectivo descrito en el Capítulo 1 de esta tesis [93] hemos visto que la aplicación de un campo magnético B perpendicular al plano del sistema remueve los modos cero del modelo lineal llevando al estado fundamental

a una energía proporcional a B , $\mathcal{E}_0 = |eB/2m|$.

A diferencia del caso usual de semiconductores, en el límite continuo de la teoría de Dirac, el confinamiento de los portadores de carga a una región finita no puede ser modelada por la condición de que los campos en el borde se anulen (condiciones Dirichlet). En la referencia [91] los autores encontraron que de entre el conjunto de condiciones de contorno que hacen autoadjunto al correspondiente Hamiltoniano, las condiciones de contorno conocidas como del MIT [97] son buenas candidatas para reproducir los resultados experimentales.

Bajo estas condiciones, estudiaremos en la segunda parte de este capítulo el problema de autovalores del Hamiltoniano efectivo que describe el movimiento de estas partículas confinadas a un disco Ω de radio R en presencia de un campo magnético uniformemente constante y perpendicular al disco.

2.2. Potencial singular del tipo Bohm-Aharonov

En este capítulo volvemos a considerar el Hamiltoniano de nuestro modelo efectivo en presencia de un campo magnético externo,

$$\begin{aligned} H &= \frac{(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A})^2 + 2\theta^2}{2m} + v_F \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) \\ &= \frac{1}{2m} \left\{ -\hbar^2 \nabla^2 + 2i \frac{e}{c} \hbar \mathbf{A} \cdot \nabla + \frac{e^2}{c^2} \mathbf{A}^2 \right\} - v_F i \hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \left\{ \nabla - i \frac{e}{c \hbar} \mathbf{A} \right\}, \end{aligned} \quad (2.2.1)$$

y queremos estudiar el caso de un campo magnético uniforme y constante perpendicular al plano, B_0 , y de un flujo magnético singular de Bohm-Aharonov, Φ , también perpendicular al plano.

En el gauge de Coulomb, podemos dar a nuestro problema simetría

cilíndrica, de modo de escribir:

$$\mathbf{A}(r) = \left(\frac{B_0 r}{2} + \frac{\Phi}{2\pi r} \right) \hat{\varphi} = A(r) \hat{\varphi} \quad (2.2.2)$$

$$\vec{\nabla} = \hat{r} \partial_r + \frac{1}{r} \hat{\varphi} \partial_\varphi \quad (2.2.3)$$

$$\nabla^2 = \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 \quad (2.2.4)$$

El Hamiltoniano (2.2.1) se escribe entonces como:

$$\begin{aligned} \frac{2m}{\hbar^2} H = & - \left\{ \partial_r^2 + \frac{1}{r} \partial_r + \frac{1}{r^2} \partial_\varphi^2 - 2i \frac{e}{c\hbar} A(r) \frac{1}{r} \partial_\varphi - \frac{e^2}{c^2 \hbar^2} A(r)^2 \right\} \mathbf{1}_2 \\ & - \frac{2i\theta}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r} \partial_r - \frac{2\theta}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\varphi} \left(\frac{i}{r} \partial_\varphi + \frac{e}{c\hbar} A(r) \right) \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

separándose de esta forma en una parte diagonal (los términos en la primera línea) y otra anti-diagonal (los de la segunda línea), puesto que

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{r} := \sigma_r = \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\varphi} \\ e^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\varphi} := \sigma_\varphi = \begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi} \\ ie^{i\varphi} & 0 \end{pmatrix} = \partial_\varphi \sigma_r, \quad (2.2.6)$$

Dado que el potencial vector es sólo función de r y que nuestro Hamiltoniano tiene simetría cilíndrica, resulta inmediato verificar que H conmuta con un *momento angular total* definido como

$$J = L + \frac{\hbar}{2} \sigma_3 = -i\hbar \partial_\varphi + \frac{\hbar}{2} \sigma_3, \quad (2.2.7)$$

de donde resulta que

$$[J, p_i] = i\hbar \epsilon_{ik} p_k, \quad [J, x_i] = i\hbar \epsilon_{ik} x_k, \quad [J, \sigma_i] = i\hbar \epsilon_{ik} \sigma_k, \quad (2.2.8)$$

$$[J, \mathbf{A}(r)] = -i\hbar A(r) \left(\cos \varphi \hat{i} + \sin \varphi \hat{j} \right),$$

Como el Hamiltoniano conmuta con J , esos operadores tienen una base de autofunciones en común y, por lo tanto, el Hamiltoniano deja invariantes a los subespacios de la forma:

$$\mathcal{H}_l = \left\{ \Psi_l(r, \varphi) = \begin{pmatrix} e^{i\varphi} \phi_l(r) \\ e^{i(l+1)\varphi} \chi_l(r) \end{pmatrix} \mid \phi_l(r), \chi_l(r) \in \mathbf{L}_2(\mathbb{R}^+; r dr) \right\}. \quad (2.2.9)$$

Señalemos que estas funciones de onda deben representar estados fermiónicos, por lo que resulta necesario que $l \in \mathbb{Z}$ de manera que, ante una rotación en 2π generada por J , la función de onda cambie de signo.

Sobre estos subespacios la ecuación de autovalores, $H\Psi_l(r, \varphi) = E_l\Psi_l(r, \varphi)$, se reduce al siguiente sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas:

$$0 = \left\{ -\partial_r^2 - \frac{1}{r}\partial_r + \left(\frac{l}{r} - \frac{eB_0}{2c\hbar}r - \frac{e\Phi}{2c\pi\hbar r} \right)^2 - \lambda \right\} \phi_l(r) - \frac{2i\theta}{\hbar} \chi_l'(r) + \frac{2i\theta}{\hbar} \left(\frac{eB_0}{2c\hbar}r + \frac{e\Phi}{2c\pi\hbar r} - \frac{l+1}{r} \right) \chi_l(r) \quad (2.2.10)$$

$$0 = \left\{ -\partial_r^2 - \frac{1}{r}\partial_r + \left(\frac{l+1}{r} - \frac{eB_0}{2c\hbar}r - \frac{e\Phi}{2c\pi\hbar r} \right)^2 - \lambda \right\} \chi_l(r) - \frac{2i\theta}{\hbar} \phi_l'(r) - \frac{2i\theta}{\hbar} \left(\frac{eB_0}{2c\hbar}r + \frac{e\Phi}{2c\pi\hbar r} - \frac{l}{r} \right) \phi_l(r),$$

donde hemos llamado

$$\lambda := \frac{2mE_l}{\hbar^2} \quad (2.2.11)$$

siendo E_l la energía asociada al estado $\Psi_l(r, \varphi)$.

Si ahora definimos:

$$\alpha := \frac{e\Phi}{2c\pi\hbar}, \quad \beta := \frac{eB_0}{2c\hbar}, \quad (2.2.12)$$

el sistema de ecuaciones diferenciales acoplados (2.2.10) se reescribe como:

$$\begin{aligned}
 \lambda\phi_l(r) &= -\phi_l''(r) - \frac{\phi_l'(r)}{r} + \left(\frac{l-\alpha}{r} - \beta r\right)^2 \phi_l(r) \\
 &\quad - \frac{2i\theta}{\hbar} \left\{ \chi_l'(r) + \left(\frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r\right) \chi_l(r) \right\} \\
 \lambda\chi_l(r) &= -\chi_l''(r) - \frac{\chi_l'(r)}{r} + \left(\frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r\right)^2 \chi_l(r) \\
 &\quad - \frac{2i\theta}{\hbar} \left\{ \phi_l'(r) - \left(\frac{l-\alpha}{r} - \beta r\right) \phi_l(r) \right\}
 \end{aligned} \tag{2.2.13}$$

el cual también puede expresarse como

$$\begin{aligned}
 -(\lambda - 2\beta)\phi_l(r) &= \\
 &\quad \left(\partial_r + \frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r\right) \left\{ \left(\partial_r - \frac{l-\alpha}{r} + \beta r\right) \phi_l(r) + \frac{2i\theta}{\hbar} \chi_l(r) \right\} \\
 &\hspace{20em} \tag{2.2.14}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 -(\lambda + 2\beta)\chi_l(r) &= \\
 &\quad \left(\partial_r - \frac{l-\alpha}{r} + \beta r\right) \left\{ \left(\partial_r + \frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r\right) \chi_l(r) + \frac{2i\theta}{\hbar} \phi_l(r) \right\}
 \end{aligned}$$

Debido a la estructura de éstas ecuaciones podemos elegir desarrollar las soluciones en términos del conjunto completo de autofunciones del operador diferencial hermítico de segundo orden:

$$\mathfrak{H} = -\partial_r^2 - \frac{1}{r} \partial_r + \left(\frac{l-\alpha}{r} - \beta r\right)^2, \tag{2.2.15}$$

definido sobre el conjunto de funciones de $L_2(\mathbb{R}^+; r dr)$ con derivadas segundas continuas y que satisfacen las condiciones de Dirichlet en el origen y para todo l .

Entonces resolveremos, primeramente, el siguiente problema de autovalores:

$$(\mathfrak{H} - \lambda_0) \phi_l(r) = 0, \quad (2.2.16)$$

Observamos que para obtener la solución asociada a $\chi_l(r)$, basta con tomar la ecuación diferencial (2.2.16) y reemplazar $l \rightarrow l+1$ y $\phi_l(r) \rightarrow \chi_l(r)$.

Vamos a resolver, por lo tanto, la siguiente ecuación diferencial:

$$-\phi_l''(r) - \frac{1}{r} \phi_l'(r) + \left(\frac{l - \alpha}{r} - \beta r \right)^2 \phi_l(r) - \lambda_0 \phi_l(r) = 0 \quad (2.2.17)$$

Si definimos $\nu := |l - \alpha|$ y proponemos una solución a la ecuación homogénea (2.2.17) de la forma:

$$\phi_l(r) \sim e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^\nu f(\beta r^2) \quad (2.2.18)$$

la ecuación diferencial para $\phi_l(r)$ se reduce a la siguiente ecuación diferencial para la función $f(\beta r^2)$:

$$0 = \beta r^2 f''(\beta r^2) + f'(\beta r^2) (\nu + 1 - \beta r^2) - \left(\frac{2\beta(\nu + 1) - (\lambda_0 + 2\beta(l - \alpha))}{4\beta} \right) f(\beta r^2) \quad (2.2.19)$$

de manera que, identificando

$$\begin{aligned} a &:= \frac{2\beta(\nu + 1) - (\lambda_0 + 2\beta(l - \alpha))}{4\beta} \\ b &:= \nu + 1 \\ z &:= \beta r^2, \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

obtenemos la ecuación de Kummer [70], cuyas soluciones linealmente independientes son $M(a, b, z)$ y $U(a, b, z)$.

Al requerir que las soluciones sean de cuadrado integrable y regulares en el origen obtenemos que el parámetro a debe ser un entero negativo, es decir $a = -n, n \in \mathbb{N}$. Pero de ser éste el caso, se tiene que las funciones $M(a, b, z)$ y $U(a, b, z)$ resultan linealmente dependientes y, por lo tanto, la solución del problema (2.2.16) es:

$$\phi_l(r) = e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^\nu U(-n, \nu + 1, z). \quad (2.2.21)$$

Recordando que el parámetro a está definido a través de la ecuación (2.2.20) y dado que $a = -n, n \in \mathbb{N}$, obtenemos la siguiente expresión para λ_0 :

$$\lambda_0 = 2\beta \{2n + 1 + |l - \alpha| - (l - \alpha)\} \quad (2.2.22)$$

De manera similar obtenemos la solución para $\chi_l(r)$.

A partir de las siguientes relaciones de recurrencia, derivadas de relaciones de recurrencia conocidas [70]:

$$0 = U(a - 1, b - 1, z) + (b - 1)U(a, b, z) - zU(a, b + 1, z) \quad (2.2.23)$$

$$0 = (b - 1)U(a, b, z) - a z U(a + 1, b + 1, z) + (1 + a - b)U(a, b - 1, z);$$

de la expresión dada anteriormente para λ_0 , (2.2.22), y suponiendo además que el parámetro α satisface $0 < \alpha < 1$, podemos observar que las soluciones del sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (2.2.13) se dividen, según el momento angular l , de la siguiente manera:

- Si $l \geq 1, l \in \mathbb{Z}$ tenemos las siguientes soluciones

$$\phi_{1,l}(r) = A_l e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{l-\alpha} U(-n+1, l-\alpha+1, \beta r^2) \quad (2.2.24)$$

$$\chi_{1,l}(r) = C_l e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{l+1-\alpha} U(-n, (l+1)-\alpha+1, \beta r^2), \quad (2.2.25)$$

siendo $U(a, b, z)$ las función Hipergeométrica de Kummer [70,92]. De manera que la ecuación de autovalores 2.2.16 y la correspondiente ecuación para $\chi_l(r)$ se reducen a:

$$\mathfrak{H}\phi_{1,l}(r) = 2\beta(2n+3)\phi_{1,l}(r) \quad (2.2.26)$$

$$\mathfrak{H}\chi_{1,l}(r) = 2\beta(2n+1)\chi_{1,l}(r)$$

- Si, en cambio, $l \leq 0, l \in \mathbb{Z}$ las soluciones son:

$$\phi_{2,l}(r) = B_l e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{\alpha-l} U(-n, \alpha-l+1, \beta r^2) \quad (2.2.27)$$

$$\chi_{2,l}(r) = D_l e^{-\frac{\beta r}{2}} r^{\alpha-(l+1)} U(-n, \alpha-(l+1)+1, \beta r^2), \quad (2.2.28)$$

tales que la ecuación de autovalores se reducen, en cada caso, a:

$$\mathfrak{H}\phi_{2,l}(r) = 2\beta(2(n-l+\alpha)+1)\phi_{2,l}(r) \quad (2.2.29)$$

$$\mathfrak{H}\chi_{2,l}(r) = 2\beta(2(n-(l+1)+\alpha)+1)\chi_{2,l}(r)$$

Teniendo en cuenta las relaciones de recurrencia (2.2.23) podemos escribir:

$$\phi'_{1,l}(r) - \left(\frac{l-\alpha}{r} - \beta r \right) \phi_{1,l}(r) = 2\beta(n+1) \frac{A_l}{C_l} \chi_{1,l}(r) \quad (2.2.30)$$

y

$$\chi'_{1,l}(r) + \left(\frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r \right) \chi_{1,l}(r) = -2 \frac{C_l}{A_l} \phi_{1,l}(r). \quad (2.2.31)$$

y similarmente

$$\phi'_{2,l}(r) - \left(\frac{l-\alpha}{r} - \beta r \right) \phi_{2,l}(r) = 2(\alpha-l+n) \frac{B_l}{D_l} \chi_{2,l}(r) \quad (2.2.32)$$

y

$$\chi'_{2,l}(r) + \left(\frac{l+1-\alpha}{r} - \beta r \right) \chi_{2,l}(r) = -2\beta \frac{D_l}{B_l} \phi_{2,l}(r). \quad (2.2.33)$$

vemos que con esas funciones el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas se reduce a un sistema algebraico. De ese modo tenemos:

- Si $l \geq 1, l \in \mathbb{Z}$, el sistema algebraico resulta:

$$\begin{pmatrix} \beta(4n+6) - \lambda & 4i \frac{\theta}{\hbar} \\ -4i \frac{\theta}{\hbar} \beta(n+1) & \beta(4n+2) - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ C_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.34)$$

Al imponer la condición de que la solución debe ser no trivial, obtenemos:

$$\lambda_n = 4\beta \left\{ n+1 \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 + \frac{4\theta^2}{\beta \hbar^2} (n+1)} \right\} \quad (2.2.35)$$

Si definimos las siguientes constantes adimensionales:

$$s := \pm 1 \quad (2.2.36)$$

$$z := \frac{\theta}{\hbar \sqrt{2\beta}} = \frac{m v_F}{\sqrt{\hbar e B_0}},$$

y recordando la relación de λ con la energía, dada por la expresión (2.2.11), podemos escribir a la energía de la siguiente manera:

$$E_{n,l} = \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n + 1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2 (n + 1)} \right\} \quad (2.2.37)$$

de donde resulta evidente que, en el presente caso, las energías son independientes tanto del momento angular como del flujo singular. Por lo tanto, para $l \geq 1$, el sistema tiene degeneración infinita en la energía, al igual que lo que ocurre en ausencia del potencial de Bohm-Aharonov [93]. Esta es la situación típica del problema de Landau.

Los coeficientes de la solución del problema de autovalores de energía para los subespacios con momento angular $l \geq 1$, satisfacen:

$$\frac{C_l}{A_l} = i \sqrt{\beta} \left(\frac{1 - s \sqrt{1 + 8z^2 (n + 1)}}{2\sqrt{2} z} \right) \quad (2.2.38)$$

Entonces, las autofunciones del Hamiltoniano en cada subespacio invariante \mathcal{H}_l con $l \geq 1$ son de la forma

$$\begin{aligned} \Psi_l(r, \varphi) = A_{n,l,s} e^{i l \varphi} e^{-\frac{\beta}{2} r^2} r^{l-\alpha} \times \\ \left(\begin{array}{c} U(-(n+1), l+1-\alpha, \beta r^2) \\ i \sqrt{\beta} \left(\frac{1-s \sqrt{1+8z^2(n+1)}}{2\sqrt{2}z} \right) e^{i\varphi} r U(-n, l-\alpha+2, \beta r^2) \end{array} \right) \end{aligned} \quad (2.2.39)$$

con $A_{n,l,s}$ una constante de normalización dada por:

$$A_{n,l,s} = \sqrt{\frac{\beta^{l+1-\alpha}}{2\pi (n+1)! \Gamma(n+2+l-\alpha)} \left[\frac{\left(\sqrt{1+8z^2(n+1)} + s/2 \right)^2 - 1/4}{1+8z^2(n+1)} \right]} \quad (2.2.40)$$

Al igual que en el capítulo anterior, podemos hacer un desarrollo de las energías $E_{n,l}$ para grandes valores de la constante adimensional

z obtenemos

$$\begin{aligned} E_{n,l} &= \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n+1 + \frac{s}{2} \sqrt{1+8z^2(n+1)} \right\} \\ &= \hbar v_F \sqrt{2\beta} \left\{ s \sqrt{2(n+1)} + \frac{n+1}{z} + O(z^{-2}) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.41)$$

- Si $l \leq 0, l \in \mathbb{Z}$, el sistema algebraico resulta:

$$\begin{pmatrix} \beta(4(n+\alpha-l)+2) - \lambda & 4i\beta \frac{\theta}{\hbar} \\ -4i\frac{\theta}{\hbar}(n+\alpha-l) & \beta(4(n+\alpha-l)-2) - \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_l \\ D_l \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.42)$$

de donde se obtienen los autovalores

$$\lambda_{n,l} = 4\beta \left\{ n + \alpha - l + \frac{s}{2} \sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)} \right\}. \quad (2.2.43)$$

Los correspondientes autovalores de energías son entonces

$$E_{n,l} = \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n + \alpha - l + \frac{s}{2} \sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)} \right\} \quad (2.2.44)$$

Observamos en esta expresión la dependencia de las energías respecto del momento angular l . Este es esencialmente el mismo espectro de la ec. (2.2.37) pero con el parámetro (entero) n reemplazado por $n + \alpha - (l + 1)$. Pero, a diferencia del caso anterior, aquí tenemos sólo un número finito de estados con la misma energía. En efecto, teniendo en cuenta que $n \geq 0$, para $n' = n - l \geq 0$ fijo vemos que los posibles valores de l son $l = -n', 1 - n', \dots, 0$, es decir, una degeneración $n' + 1$ finita.

Los coeficientes de las soluciones satisfacen:

$$\frac{D_l}{B_l} = \frac{i}{\sqrt{\beta}} \left(\frac{1 - s \sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)}}{2\sqrt{2}z} \right), \quad (2.2.45)$$

de modo que las autofunciones para $l \leq 0$ son

$$\Psi_l(r, \varphi) = B_{n,l,s} e^{i l \varphi} e^{-\frac{\beta}{2} r^2} r^{\alpha-(l+1)} \times \left(\begin{array}{c} r U(-n, \alpha+1-l, \beta r^2) \\ \frac{z}{\sqrt{\beta}} \left(\frac{1-s\sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)}}{2\sqrt{2}z} \right) e^{i\varphi} U(-n, \alpha-l, \beta r^2) \end{array} \right) \quad (2.2.46)$$

donde la constante de normalización $B_{n,l,s}$ está dada por:

$$B_{n,l,s} = \sqrt{\frac{\beta^{1+\alpha-l}}{2\pi n! \Gamma(n+1+\alpha-l)} \left[\frac{\left(\sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)} + s/2 \right)^2 - 1/4}{1+8z^2(n+\alpha-l)} \right]} \quad (2.2.47)$$

Por otro lado, si realizamos un desarrollo para valores grandes de z , las energías para estos subespacios resultan

$$\begin{aligned} E_{n,l} &= \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n + \alpha - l + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2(n + \alpha - l)} \right\} \\ &= \hbar v_F \sqrt{2\beta} \left\{ s \sqrt{2(n + \alpha - l)} + \frac{n + \alpha - l}{z} + O(z^{-2}) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.48)$$

Nótese que, para $n' = n - l$ dado, tenemos $n - l + 1$ estados con $s = +1$ que tienen una energía ligeramente mayor que la del correspondiente nivel de Landau, mientras que para $s = -1$ hay la misma cantidad de estados con energía ligeramente menor que la del nivel de Landau correspondiente. Cabe señalar que, en el límite termodinámico, la diferencia en un número finito de estados no modifica la densidad de estados del nivel de Landau.

Queremos hacer las siguientes observaciones:

Primeramente destacamos que, en ambos caso, las constantes de normalización tienen dimensiones, esto sucede porque que las autofunciones no fueron expresadas en términos de variables sin unidades.

Segundo, si comparamos con nuestro modelo efectivo para el grafeno [93], descrito en el capítulo 1, vemos en aquel caso los autovalores de energía no distinguen entre valores positivos y negativos del momento angular de los estados en un dado nivel de Landau, mientras que en la situación actual, en presencia de un flujo singular, se mantiene una degeneración infinita en subespacios de momento angular $l \geq 1$ pero se diferencia la energía de un subespacio de dimensión finita con momento angular $l \leq 0$. Eso se debe a la interacción entre estos estados con momento angular negativo y el flujo magnético singular.

Además existe otra solución del sistema acoplado (2.2.13) con $l \geq 1$:

$$\Psi_{l \geq 1}^0 = \sqrt{\frac{\beta^{l-\alpha+1}}{\pi \Gamma(l-\alpha+1)}} e^{i l \varphi} r^{l-\alpha} e^{-\frac{\beta}{2} r^2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (2.2.49)$$

con una energía asociada

$$E_0 = \hbar \frac{e B_0}{2 m c} \quad (2.2.50)$$

que es la más próxima de cero, independiente de la velocidad de Fermi v_F y del flujo singular. Por lo tanto, este nivel de Landau no es sensible a la aplicación del flujo de Bohm-Aharonov.

Ahora que tenemos las autofunciones correctamente normalizadas, vamos a escribir la densidad de probabilidad para cada caso:

- para $l \geq 1$

$$\begin{aligned} \rho_{l \geq 1}(r, \varphi, t) = & A_{n,l,s}^2 e^{-\beta r^2} \left\{ r^{2(l-\alpha)} U^2(-(n+1), l+1-\alpha, \beta r^2) \right. \\ & \left. + \beta \left(\frac{(1-s \sqrt{1+8z^2(n+1)})^2}{8z^2} \right) r^{2(l+1-\alpha)} U^2(-n, l-\alpha+2, \beta r^2) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.51)$$

- para $l \leq 0$

$$\begin{aligned} \rho_{l \leq 0}(r, \varphi, t) = & B_{n,l,s}^2 e^{-\beta r^2} \left\{ r^{2(\alpha-l)} U^2(-n, 1 + \alpha - l, \beta r^2) \right. \\ & \left. + \left(\frac{(1-s\sqrt{1+8z^2(n+\alpha-l)})^2}{8\beta z^2} \right) r^{2(\alpha-(l+1))} U^2(-n, \alpha - l, \beta r^2) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.52)$$

- y para el nivel de Landau más próximo de cero (con $l \geq 1$)

$$\rho_{l \geq 1}^0 = \frac{\beta^{l-\alpha+1}}{\pi \Gamma(l-\alpha+1)} r^{2(l-\alpha)} e^{-\beta r^2} \quad (2.2.53)$$

A partir de la densidad de probabilidad podemos calcular el radio cuadrático medio para cada estado de momento angular l , para lo cual hacemos uso de las constantes $A_{n,l,s}$ y de $B_{n,l,s}$, dadas por las expresiones (2.2.40) y (2.2.47), y de la relación existente entre las funciones de Kummer $U(-n, \alpha + 1, x)$ y las funciones generalizadas de Laguerre $L_n^\alpha(x)$, [70]. Obtenemos

- para $l \geq 1$

$$\begin{aligned} \langle r^2 \rangle &= \int \rho_{l \geq 1}(r, \varphi, t) r^2 d\vec{x} \\ &= \frac{1}{2\beta(n+1)! \Gamma(l-\alpha+n+2)} \left(\frac{(\sqrt{1+8z^2(n+1)} + s/2)^2 - 1/4}{1+8z^2(n+1)} \right) \\ &\quad \int_0^\infty \left\{ e^{-x} x^{l-\alpha+1} (n+1)!^2 (L_{n+1}^{l-\alpha}(x))^2 \right. \\ &\quad \left. + \frac{(1-s\sqrt{1+8z^2(n+1)})^2}{8z^2} e^{-x} x^{l+2-\alpha} n!^2 (L_n^{l+1-\alpha}(x))^2 \right\} dx \\ &= \frac{\hbar}{eB_0} \left\{ 4(n+1) + 1 + 2(l-\alpha) + \frac{s}{\sqrt{1+8z^2(n+1)}} \right\} \end{aligned} \quad (2.2.54)$$

- para $l \leq 0$

$$\begin{aligned}
\langle r^2 \rangle &= \int \rho_{l \leq 0}(r, \varphi, t) r^2 d\vec{x} \\
&= \frac{n!}{2\beta\Gamma(\alpha - l + n + 1)} \left(\frac{\left(\sqrt{1 + 8z^2(n + \alpha - l)} + s/2 \right)^2 - 1/4}{1 + 8z^2(n + \alpha - l)} \right) \\
&\quad \int_0^\infty \left\{ e^{-x} x^{\alpha-l+1} (L_n^{\alpha-l}(x))^2 \right. \\
&\quad \left. + \frac{\left(1 - s \sqrt{1 + 8z^2(n + \alpha - l)} \right)^2}{8z^2} e^{-x} x^{\alpha-l} (L_n^{\alpha-(l+1)}(x))^2 \right\} dx \\
&= \frac{\hbar}{eB_0} \left\{ 4n + 1 + 2(\alpha - l) + \frac{s}{\sqrt{1 + 8z^2(n + \alpha - l)}} \right\}
\end{aligned} \tag{2.2.55}$$

- y para el nivel próximo de cero ($l \geq 1$)

$$\begin{aligned}
\langle r^2 \rangle^0 &= \int \rho_{l \geq 1}^0(r, \varphi, t) r^2 d\vec{x} \\
&= \frac{\beta^{l-\alpha+1}}{\pi \Gamma(l - \alpha + 1)} \int_0^\infty r^{2(l-\alpha+1)} e^{-\beta r^2} r dr d\varphi \\
&= \frac{1}{\beta \Gamma(l - \alpha + 1)} \Gamma(l - \alpha + 2) \\
&= \frac{l - \alpha + 1}{\beta} \\
&= \frac{2\hbar}{e B_0} (l - \alpha + 1)
\end{aligned} \tag{2.2.56}$$

donde hemos usado la definición de la función $\Gamma(z)$ y la de la constante β dada por (2.2.12).

Con las expresiones del radio cuadrado medio podemos calcular el *flujo medio del campo magnético uniforme* encerrado por cada estado. Por ejemplo, para el estados en el nivel próximo de cero tenemos:

$$\pi \langle r^2 \rangle^0 B_0 = \frac{2\pi\hbar}{e B_0} (l - \alpha + 1) B_0 = \frac{h}{e} (l - \alpha + 1) \tag{2.2.57}$$

que crece linealmente con l . Dividiendo por el *cuanto de flujo magnético del electrón* $\phi_0 = \frac{hc}{e}$ [94] resulta que el número medio de cuantos encerrados por estos estados ($l \geq 1$) crece linealmente como $(l - \alpha + 1)$.

Consideremos el primer nivel de Landau ($E_0 = \hbar e B_0 / 2m$). La ecuación (2.2.56) muestra que existen l estados con radio cuadrado medio menor o igual que el correspondiente a ese valor del momento angular ($l' = 1, \dots, l$). Podemos entonces definir un número de estados por unidad de área como el cociente

$$\frac{l}{\pi \langle r^2 \rangle^0} = \frac{l}{\frac{2\pi\hbar}{eB_0}(l - \alpha + 1)} = \frac{eB_0}{h} (1 + O(1/l)) \quad (2.2.58)$$

que en el límite termodinámico ($l \rightarrow \infty$) da una densidad de estados

$$\delta = \frac{eB_0}{h} = \frac{B_0}{\phi_0}, \quad (2.2.59)$$

de acuerdo con el resultado usual.

Un cálculo similar puede hacerse para los demás niveles de Landau empleando el resultado de la ecuación (2.2.54), con idéntico resultado para la densidad en el límite termodinámico. Recordemos que los demás estados, con $l \leq 0$, sólo contribuyen a niveles con degeneración finita y, por lo tanto, corresponden a una densidad de estados nula en ese límite.

Desde luego que la aplicación de estos resultados al modelo efectivo de grafeno requeriría considerar $m < 0$ e incorporar la contribución del segundo punto de Dirac mediante la transformación unitaria descrita por las ecuaciones (1.3.33), (1.3.36) y (1.3.37). Dado que la introducción de un flujo magnético singular no cambia cualitativamente las propiedades del modelo, no continuaremos aquí con ese análisis.

Por último cabe destacar que si resolvemos el problema anterior en ausencia del flujo singular, $\Phi = 0$, obtenemos que las energías se escriben:

- Si $l \geq 0$, $l \in \mathbb{Z}$ tenemos

$$E_{n,l} = \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n + 1 + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z(n+1)} \right\}$$

en coincidencia con el problema resuelto para el flujo singular Φ , (2.2.37).

- Mientras que para $l < 0$, $l \in \mathbb{Z}$ obtenemos:

$$E_{n,l} = \hbar v_F \sqrt{2\beta} \frac{1}{z} \left\{ n - l + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z(n-l)} \right\}$$

Vemos que podemos obtener esta expresión con sólo tomar el límite $\alpha \rightarrow 0$ a partir de la expresión (2.2.44).

2.3. Problema en el Disco

En esta sección nos interesaremos por resolver el problema de autovalores asociado al movimiento de una partícula de masa m y carga e no relativista acoplada mínimamente a un campo magnético y uniforme perpendicular al plano, confinada a moverse dentro de un disco Ω de radio R .

Al igual que en el caso anterior, el Hamiltoniano está dado por (2.2.5), donde el potencial vector correspondiente al campo magnético uniforme perpendicular al disco Ω es

$$\mathbf{B} = B \hat{\phi} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{A} := \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2} = \frac{Br}{2} \hat{\phi} = A(r) \hat{\phi}. \quad (2.3.1)$$

Como anteriormente hemos mencionado, el Hamiltoniano deja invariante a los subespacios (2.2.9), por lo cual la ecuación de autovalores se reduce al sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas

(2.2.13), para el caso $\alpha = 0$. Esto nos permite seguir la metodología del caso anterior y desarrollar a las soluciones en términos del conjunto completo de autofunciones de un operador diferencial hermítico de segundo orden de la forma

$$\mathfrak{H} = -\partial_r^2 - \frac{1}{r} \partial_r + \left(\frac{l}{r} - \beta r \right)^2, \quad (2.3.2)$$

definido sobre un dominio de funciones en $L_2(\mathbb{R}^+; r dr)$ que satisfacen, para cada l , condiciones de regularidad en el origen y ciertas condiciones de contorno en $r = R$ a determinar. En ese sentido, consideraremos sólo condiciones de contorno que respetan la simetría cilíndrica del gauge elegido.

Destacamos nuevamente que el operador relevante para $\chi_l(r)$ puede ser obtenido a partir del correspondiente a $\phi_l(r)$ con sólo cambiar $l \rightarrow l+1$, por lo cual nos remitimos primeramente el siguiente problema:

$$\begin{aligned} 0 &= (\mathfrak{H} - \lambda_0) \phi_l(r) \\ &= -\phi_l''(r) - \frac{1}{r} \phi_l'(r) + \left(\frac{l}{r} - \beta r \right)^2 \phi_l(r) - \lambda_0 \phi_l(r), \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

para subespacios de momento angular $l \neq 0$.

Al imponer a $\phi_l(r)$ la condición de regularidad en el origen, la solución de la ecuación (2.3.3) resultará ser:

$$\phi_l(r) = A_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^l L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l(\beta r^2) \quad (2.3.4)$$

donde los $L_a^b(z)$ son los polinomios generalizados de Laguerre [70], que están relacionados con las funciones de Kummer. En efecto las funciones generalizadas de Laguerre, para cualquier valor de ν , son una notación alternativa para las funciones hipergeométricas confluentes, [95]:

$$L_\nu^\alpha(x) = \frac{1}{\Gamma(\nu + 1)} M(-\nu, \alpha + 1, x) \quad (2.3.5)$$

Para hallar las soluciones de $0 = (\mathfrak{H} - \gamma_0) \chi_l(r)$, basta con observar la parte diagonal del sistema de ecuaciones diferenciales acopladas (2.2.13) y reconocer que ambas están relacionadas a través del cambio $l \rightarrow l + 1$. Por lo tanto:

$$\chi_l(r) = B_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^{l+1} L_{\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta}}^{l+1}(\beta r^2) \quad (2.3.6)$$

El paso siguiente es mostrar que estas soluciones de (2.3.4) ((2.3.6)) son únicas para cada λ_0 (γ_0) y las condiciones impuestas.

Ya hemos mencionado anteriormente que otra solución de la ecuación de autovalores $0 = (\mathfrak{H} - \lambda_0) \phi_l(r)$ es:

$$\phi_l(r) \sim e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^l U\left(-\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}, l + 1, (\beta r^2)\right) \quad (2.3.7)$$

cuyo comportamiento en el origen está dado por:

$$\phi_l(r) \sim r^{-l} \frac{\Gamma(l)}{\Gamma\left(\frac{2\beta - \lambda_0}{4\beta}\right)} + r^l \frac{\Gamma(-l)}{\Gamma\left(\frac{2\beta - \lambda_0}{4\beta} - l\right)} + O(r^2) \quad (2.3.8)$$

A esta solución debemos imponerle la condición de regularidad en el origen. Entonces:

- Si $l > 0, l \in \mathbb{Z}$, entonces el término r^l resulta de cuadrado integrable en el origen puesto que $2L + 1 > -1$, pero el término proporcional a r^{-l} no lo es a menos que $\Gamma\left(\frac{2\beta - \lambda_0}{4\beta}\right)$ sea divergente. Si éste es el caso, entonces $\frac{2\beta - \lambda_0}{4\beta} = -n, n \in \mathbb{N}$. Es decir, esta solución es de cuadrado integrable en el origen sólo para ciertos valores del parámetro λ_0 , pero en esos casos se satisface la siguiente relación [70]:

$$U(-n, l + 1, (\beta r^2)) = (-1)^n (n)! L_n^l(\beta r^2) \quad (2.3.9)$$

por lo que ambas soluciones resultan linealmente dependientes.

- Si, en cambio, $l < 0, l \in \mathbb{Z}$, el término proporcional a r^{-l} resulta de cuadrado integrable en el origen pero el asociado a r^l no, a menos que $\Gamma\left(\frac{2\beta-\lambda_0}{4\beta} - l\right)$ sea divergente, lo que nos conduce a que $\frac{2\beta-\lambda_0}{4\beta} - l = -m, m \in \mathbb{N}$. Nuevamente, la segunda solución es de cuadrado integrable en el origen sólo para ciertos valores de $\lambda_0, \frac{2\beta-\lambda_0}{4\beta} = -(m + |l|)$, para los cuales se tiene que [70]:

$$U\left(-m + |l|, 1 - |l|, (\beta r^2)\right) = (-1)^m (m)! (\beta r^2)^{|l|} L_m^{|l|}(\beta r^2), \quad (2.3.10)$$

resultando ambas soluciones, también en este caso, linealmente dependientes.

Del análisis anterior concluimos que las soluciones al problema de autovalores para el Hamiltoniano (2.2.5) pueden ser expresadas en términos de las *Funciones de Laguerre Generalizadas*. Ahora hay que hallar un conjunto de condiciones de contorno locales en $r = R$ que hagan autoadjunto al Hamiltoniano del problema, de modo de obtener un conjunto completo de soluciones de la ecuación de autovalores (2.3.2).

Retomando nuestro cálculo, debemos ahora considerar los términos de acoplamiento del sistema (2.2.13), para el caso en que $\alpha = 0$, que son de la forma:

$$\left[\partial_r - \left(\frac{l}{r} - \beta r\right)\right] \phi_l(r) \quad y \quad \left[\partial_r + \left(\frac{l+1}{r} - \beta r\right)\right] \chi_l(r)$$

A partir de las siguientes relaciones de recurrencia [70,95]:

$$\frac{d}{dx} L_a^b(x) = -L_{a-1}^{b+1}(x) \quad (2.3.11)$$

$$0 = (b-x) L_a^b(x) - x L_{a-1}^{b+1}(x) - (a+1) L_{a+1}^{b-1}(x)$$

y de los Ansatz para $\phi_l(r)$ y $\chi_l(r)$ en (2.3.4) y(2.3.6) encontramos que:

$$\left[\partial_r - \left(\frac{l}{r} - \beta r \right) \right] \phi_l(r) = -2\beta A_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^{l+1} L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1}(\beta r^2) \quad (2.3.12)$$

$$\left[\partial_r + \left(\frac{l+1}{r} - \beta r \right) \right] \chi_l(r) = 2 \left(\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} + 1 \right) B_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^l L_{\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^l(\beta r^2)$$

Entonces, si recordamos que $\mathfrak{H}\phi_l(r) = \lambda_0\phi_l(r)$, y similarmente para $\chi_l(r)$, es fácil mostrar que nuestro sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas se reduce a

$$\begin{aligned} 0 &= (\lambda_0 - \lambda) A_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^l L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l(\beta r^2) \\ &\quad - 4i \frac{\theta}{\hbar} \left(\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} + 1 \right) B_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^l L_{\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} + 1}^l(\beta r^2) \end{aligned} \quad (2.3.13)$$

$$\begin{aligned} 0 &= (\gamma_0 - \lambda) B_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^{l+1} L_{\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta}}^{l+1}(\beta r^2) \\ &\quad + 4i \frac{\theta}{\hbar} \beta A_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} r^{l+1} L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1}(\beta r^2) \end{aligned}$$

Esas igualdades sólo pueden ser satisfechas si se identifican los índices de las funciones generalizadas de Laguerre que en ellas aparecen, $\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \equiv \frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} + 1$, lo que nos conduce a la relación

$$\gamma_0 = \lambda_0 - 4\beta \quad (2.3.14)$$

con lo cual el sistema de ecuaciones (2.3.13) se reduce a un sistema algebraico

$$\begin{pmatrix} (\lambda_0 - \lambda) & -4i \frac{\theta}{\hbar} \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) \\ 4i \frac{\theta}{\hbar} \beta & (\lambda_0 - 4\beta - \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_l \\ B_l \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad (2.3.15)$$

La existencia de soluciones no triviales de este sistema algebraico conduce a soluciones no triviales del sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden acopladas. La condición

$$\begin{aligned} \det \left[\begin{pmatrix} (\lambda_0 - \lambda) & -4i \frac{\theta}{\hbar} \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) \\ 4i \frac{\theta}{\hbar} \beta & (\lambda_0 - 4\beta - \lambda) \end{pmatrix} \right] = \\ = (\lambda_0 - \lambda) (\lambda_0 - 4\beta - \lambda) - \frac{16 \theta^2}{\hbar^2} \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.3.16)$$

implica para λ

$$\lambda = 4\beta \left\{ \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\}, \quad (2.3.17)$$

donde hemos definido $s = \pm 1$ y al constante adimensional $z := \frac{\theta}{\hbar \sqrt{2\beta}} = \frac{mv_F}{\sqrt{\hbar e B}}$ al igual que antes.

Con esta expresión para λ , obtenemos que los coeficientes de las componentes de $\Psi_l(r, l)$ satisfacen la siguiente relación:

$$\frac{B_l}{A_l} = -i \frac{\sqrt{2\beta}}{4z} \left(\frac{4\beta}{\lambda_0 - 2\beta} \right) \left\{ 1 + s \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} =: -i k_l, \quad (2.3.18)$$

Ahora estudiaremos el caso particular en que $l = 0$. En este caso nuestras autofunciones tienen la forma:

$$\Psi_0(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \phi_0(r) \\ e^{i\varphi} \chi_0(r) \end{pmatrix} \quad (2.3.19)$$

tal como antes $\phi_0(r), \chi_0(r) \in \mathbf{L}_2(\mathbb{R}^+; r dr)$. De modo que el problema de autovalores $H\Psi_0(r, \varphi) = E_0\Psi_0(r, \varphi)$ se reduce a resolver el siguiente sis-

tema de ecuaciones diferenciales acopladas:

$$0 = \left\{ -\partial_r^2 - \frac{1}{r}\partial_r + \beta^2 r^2 - \lambda \right\} \phi_0(r) - \frac{2i\theta}{\hbar} \left\{ \partial_r + \left(\frac{1}{r} - \beta r \right) \right\} \chi_0(r) \quad (2.3.20)$$

$$0 = \left\{ -\partial_r^2 - \frac{1}{r}\partial_r + \left(\frac{1}{r} - \beta r \right)^2 - \lambda \right\} \chi_0(r) - \frac{2i\theta}{\hbar} \{ \partial_r + \beta r \} \phi_0(r),$$

donde hemos definido λ y β según (2.2.11) y (2.2.12), respectivamente.

Podemos reescribir al anterior sistema de la siguiente manera:

$$0 = \left[\partial_r + \left(\frac{1}{r} - \beta r \right) \right] \left\{ (\partial_r + \beta r) \phi_0(r) + \frac{2i\theta}{\hbar} \chi_0(r) \right\} + (\lambda - 2\beta) \phi_0(r) \quad (2.3.21)$$

$$0 = (\partial_r + \beta r) \left\{ \left[\partial_r + \left(\frac{1}{r} - \beta r \right) \right] \chi_0(r) + \frac{2i\theta}{\hbar} \phi_0(r) \right\} + (\lambda + 2\beta) \chi_0(r)$$

que no es más que el sistema (2.2.14) para el caso particular en que $l = 0$ y $\alpha = 0$, cuya solución regular es:

$$\Psi_0(r, \varphi) = e^{-\frac{\beta r^2}{2}} \begin{pmatrix} A_0 L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^0(\beta r^2) \\ e^{i\varphi} B_0 r L_{\frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta}}^1(\beta r^2) \end{pmatrix} \quad (2.3.22)$$

de manera que, utilizando las relaciones de recurrencia (2.3.11), el sistema de ecuaciones (2.3.21) se reduce al sistema de ecuaciones algebraicas (2.3.15) al identificarse $\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \equiv \frac{\gamma_0 - 2\beta}{4\beta} + 1$. Esto nos permite concluir que el caso particular en que $l = 0$ puede ser incluido en el análisis anterior.

Entonces $\forall l \in \mathbb{Z}$ obtenemos para las autofunciones $\Psi_l(r, l)$, pertenecientes

a los subespacios \mathcal{H}_L ,

$$\Psi_l(r, \varphi) = A_l e^{-\frac{\beta r^2}{2}} e^{i l \varphi} r^l \times \left(\begin{array}{c} L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l(\beta r^2) \\ -i \frac{\sqrt{2\beta}}{4z} \left(\frac{4\beta}{\lambda_0 - 2\beta} \right) \left\{ 1 + s \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} e^{i\varphi} r L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1}(\beta r^2) \end{array} \right), \quad (2.3.23)$$

siendo A_l la constante de normalización de la autofunción.

Recordemos que λ y la energía E están relacionadas a través de (2.2.11), por lo cual podemos reescribir (2.3.17) en términos de la energía E de la siguiente manera:

$$E_l = \hbar \sqrt{2\beta} v_F \frac{1}{z} \left\{ \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\}, \quad (2.3.24)$$

Queremos destacar que la energía depende de λ_0 , parámetro cuyos valores deben ser determinados mediante la imposición de condiciones de contorno adecuadas en $r = R$.

A partir de las relaciones de recurrencia (2.3.11), podemos escribir para las soluciones encontradas mediante nuestro Ansatz

$$\left\{ \left(\partial_r - \left(\frac{l}{r} - \beta r \right) \right) \phi_l(r) + 2i \frac{\beta}{k} \chi_l(r) \right\} = 0, \quad (2.3.25)$$

$$\left\{ \left(\partial_r + \left(\frac{l+1}{r} - \beta r \right) \right) \chi_l(r) + 2i \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) k_l \phi_l(r) \right\} = 0.$$

con k_l definida en (2.3.18).

Teniendo en cuenta las expresiones para σ_r y σ_φ , la anterior expresión

puede ser escrita como

$$\begin{aligned} & \left\{ \partial_r \mathbf{1}_2 + \left(\frac{i}{r} \partial_\varphi + \beta r \right) \sigma_3 + i \left[k_l \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) + \frac{\beta}{k_l} \right] \sigma_r \right. \\ & \left. + \left[k_l \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) - \frac{\beta}{k_l} \right] \sigma_\varphi \right\} \Psi_l(r, \varphi) = \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2.3.26)$$

la cual debe satisfacerse para todo $r \in [0, R]$.

Para determinar la condición de borde debemos requerir, como es bien sabido, que nuestro Hamiltoniano (2.2.5) sea autoadjunto. Para esto calculamos el siguiente producto interno,

$$\begin{aligned} (\Psi, 2mH\Phi) &= \int \Psi^\dagger \left[-\Delta + 2i \frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \cdot \nabla + \left(\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 - 2i \frac{\theta}{\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla - 2 \frac{\theta e}{\hbar^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \right] \Phi d^2\mathbf{r} \\ &= \int \nabla \cdot \left\{ -\Psi^\dagger (\nabla \Phi) + 2i \frac{e}{\hbar} \Psi^\dagger \mathbf{A} \Phi - 2i \frac{\theta}{\hbar} \Psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \Phi + (\nabla \Psi^\dagger) \Phi \right\} d^2\mathbf{r} \\ &+ \int \left\{ -(\Delta \Psi^\dagger) \Phi - 2i \frac{e}{\hbar} (\nabla \Psi^\dagger) \mathbf{A} \Phi + \Psi^\dagger \left(\frac{e}{\hbar} \mathbf{A} \right)^2 \Phi \right. \\ &\quad \left. + 2i \frac{\theta}{\hbar} (\nabla \Psi^\dagger) \boldsymbol{\sigma} \Phi - 2 \frac{e\theta}{\hbar^2} \Psi^\dagger \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \Phi \right\} d^2\mathbf{r} \\ &= \oint_{\partial\Omega} \left\{ (\nabla \Psi)^\dagger \Phi - \Psi^\dagger (\nabla \Phi) + \frac{2i}{\hbar} \Psi^\dagger (e\mathbf{A} - \theta\boldsymbol{\sigma}) \Phi \right\} \cdot d\mathbf{s} + (2mH\Psi, \Phi) \end{aligned} \quad (2.3.27)$$

De eso se desprende que el término de borde debe anularse para que el Hamiltoniano sea autoadjunto, lo quiere decir que sobre el disco de radio R debe satisfacerse la siguiente condición para todo par de funciones Ψ, Φ

en su dominio:

$$\begin{aligned}
0 &= \oint_{\partial\Omega} \left\{ (\nabla\Psi)^\dagger \Phi - \Psi^\dagger (\nabla\Phi) + \frac{2i}{\hbar} \Psi^\dagger (e\mathbf{A} - \theta\boldsymbol{\sigma}) \Phi \right\} \cdot d\mathbf{s} \\
&= R \int_0^{2\pi} \left\{ \left(\left[\hat{r} \partial_r + \frac{1}{r} \hat{\varphi} \partial_\varphi \right] \Psi \right)^\dagger \Phi - \Psi^\dagger \left[\hat{r} \partial_r + \frac{1}{r} \hat{\varphi} \partial_\varphi \right] \Phi \right. \\
&\quad \left. + \frac{2i}{\hbar} \Psi^\dagger (eA(r)\hat{\varphi} - \theta\boldsymbol{\sigma}) \Phi \right\} \hat{r} d\varphi \\
&= R \int_0^{2\pi} \left\{ (\partial_r \Psi)^\dagger \Phi - \Psi^\dagger (\partial_r \Phi) - 2i \frac{\theta}{\hbar} \Psi^\dagger \sigma_r \Phi \right\} d\varphi \quad (2.3.28) \\
&= R \int_0^{2\pi} \left\{ (\partial_r \Psi)^\dagger \Phi + \frac{\theta}{\hbar} \Psi^\dagger (-i\sigma_r) \Phi - \Psi^\dagger \left(\partial_r \Phi + \frac{\theta}{\hbar} (i\sigma_r) \right) \Phi \right\} d\varphi \\
&= R \int_0^{2\pi} \left\{ \left(\partial_r \Psi + i \frac{\theta}{\hbar} \sigma_r \Psi \right)^\dagger \Phi - \Psi^\dagger \left(\partial_r \Phi + i \frac{\theta}{\hbar} \sigma_r \Phi \right) \right\} d\varphi
\end{aligned}$$

Esta condición, a ser satisfecha sobre el borde, nos conduce al requerimiento de que el operador $\partial_r \mathbf{1}_2 + i \frac{\theta}{\hbar} \sigma_r$ aplicado sobre funciones en el dominio de H y en el límite $r \rightarrow R$ debe ser equivalente a la aplicación de un operador autoadjunto sobre sus valores de borde.

La condición anterior puede escribirse de la siguiente manera

$$0 = \oint_{\partial\Omega} (\Psi^\dagger, \partial_r \Psi^\dagger) \begin{pmatrix} -2i \frac{\theta}{\hbar} \sigma_r & 1_2 \\ -1_2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi \\ \partial_r \Phi \end{pmatrix} \quad (2.3.29)$$

Es decir, sobre las funciones en el dominio del operador H , la condición anterior se traduce a la búsqueda de un operador de proyección P sobre el espacio de valores de borde de las autofunciones de H tal que

$$\begin{pmatrix} \Phi \\ \partial_r \Phi \end{pmatrix} = P \begin{pmatrix} \Phi \\ \partial_r \Phi \end{pmatrix} \quad (2.3.30)$$

y que satisfaga

$$P^2 = P \quad , \quad P^\dagger \begin{pmatrix} -2i\frac{\theta}{\hbar}\sigma_r & 1_2 \\ -1_2 & 0 \end{pmatrix} P = 0 \quad (2.3.31)$$

es decir,

$$P^\dagger \begin{pmatrix} -2i\frac{\theta}{\hbar}\sigma_r & 1_2 \\ -1_2 & 0 \end{pmatrix} = M\bar{P} \quad (2.3.32)$$

siendo \bar{P} el operador de proyección sobre el complemento ortogonal del subespacio sobre el cual proyecta P y M cierta matriz.

No vamos a buscar aquí la solución más general de ese problema. Dado que en nuestro caso disponemos de un conjunto de soluciones de la ecuación diferencial de autovalores para nuestro Hamiltoniano H , vamos a verificar si esas soluciones satisfacen la condición (2.3.28). A tal fin reescribiremos esta condición en función de las propiedades de esas soluciones, para lo cual de la ecuación (2.3.26) podemos despejar la derivada ∂_r de las autofunciones en \mathcal{H}_l obteniendo así la relación

$$\begin{aligned} \partial_r \Phi + i\frac{\theta}{\hbar}\sigma_r \Phi &= \left\{ -\left(\frac{i}{r}\partial_\varphi + \beta r\right)\sigma_3 - \left[k\left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}\right) - \frac{\beta}{k} \right] \sigma_\varphi \right. \\ &\quad \left. + i\left[\frac{\theta}{\hbar} - k\left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}\right) - \frac{\beta}{k} \right] \sigma_r \right\} \Phi \end{aligned} \quad (2.3.33)$$

Observamos que el primer y segundo término del lado derecho de la igualdad anterior corresponden a operadores autoadjuntos sobre el espacio de valores de borde, mientras que el término proporcional a $i\sigma_r$ no lo es. Entonces, la ecuación (2.3.28) se puede reescribir de la siguiente manera

para las autofunciones de H en \mathcal{H}_l

$$\begin{aligned}
0 &= R \int_0^{2\pi} \left\{ \left(\imath \left[\frac{\theta}{\hbar} - k_l \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) - \frac{\beta}{k_l} \right] \sigma_r \right)^\dagger \Phi \right. \\
&\quad \left. - \Psi^\dagger \left(\imath \left[\frac{\theta}{\hbar} - k_l \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) - \frac{\beta}{k_l} \right] \sigma_r \right) \Phi \right\} d\varphi \quad (2.3.34) \\
&= -2\imath R \left[\frac{\theta}{\hbar} - k_l \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) - \frac{\beta}{k_l} \right] \int_0^{2\pi} \Psi^\dagger \sigma_r \Phi d\varphi
\end{aligned}$$

Por lo tanto, podemos imponer sobre las autofunciones del Hamiltoniano (2.2.5) condiciones de contorno de la forma:

$$P\Psi = \Psi \quad (2.3.35)$$

donde P es un operador de proyección que satisface

$$\sigma_r P = \bar{P}^\dagger \sigma_r. \quad (2.3.36)$$

tal que \bar{P} es el proyector sobre el complemento ortogonal en el espacio de los valores del borde. Por lo tanto,

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^\dagger \sigma_r \Phi = \int_0^{2\pi} d\varphi \Psi^\dagger \sigma_r P \Phi = \int_0^{2\pi} d\varphi (\bar{P}\Psi)^\dagger \sigma_r \Phi = 0. \quad (2.3.37)$$

Ese operador puede ser escrito de manera general en términos de $\mathbf{1}_2$, σ_φ y σ_3 como

$$P = \left(\frac{\mathbf{1}_2 + u\sigma_\varphi + v\sigma_3}{2} \right), \quad (2.3.38)$$

con $u, v \in \mathbb{R}$ y tales que $u^2 + v^2 = 1$, de modo que podemos escribir estas variables en términos de un parámetro γ de la siguiente manera: $u = \sin \gamma$ y $v = \cos \gamma$, de esta manera la condición $P\Phi_l = 0$ se escribe como

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \cos \gamma & -\imath e^{-\imath\varphi} \sin \gamma \\ \imath e^{\imath\varphi} \sin \gamma & 1 - \cos \gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{\imath l\varphi} \phi_l(R) \\ e^{\imath(l+1)\varphi} \chi_l(R) \end{pmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.3.39)$$

Observemos que esta condición de contorno es similar a la de Berry-Mondragon [96], la que fue desarrollada al considerar fermiones localizados en una región compacta debido al confinamiento producido por un potencial infinito. Ellas implican un flujo de corriente nulo en la dirección perpendicular al borde y constituyen el análogo en $2 + 1$ dimensiones de las llamadas condiciones del MIT, obtenidas al introducir un confinamiento efectivo en la QCD en $3 + 1$ dimensiones mediante el modelo de la bolsa [97].

En cada subespacio invariante las condiciones de contorno obtenidas se escriben como

$$(1 + \cos \gamma) e^{i l \varphi} \phi_l(R) - i e^{-i \varphi} \sin \gamma e^{i(l+1)\varphi} \chi_l(R) = 0, \quad (2.3.40)$$

ó, equivalentemente,

$$i e^{i(l+1)\varphi} \sin \gamma \phi_l(R) + (1 - \cos \gamma) e^{i(l+1)\varphi} \chi_l(r) = 0, \quad (2.3.41)$$

Considerando las expresiones de $\phi_l(r)$ y $\chi_l(r)$ halladas en (2.3.23), estas condiciones se reducen a

$$\begin{aligned} 0 = & (1 + \cos \gamma) L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l (\beta R^2) \\ & - \sin \gamma \frac{\sqrt{2\beta}}{4z} \left(\frac{4\beta}{\lambda_0 - 2\beta} \right) \left\{ 1 + s \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} R L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1} (\beta R^2) \end{aligned} \quad (2.3.42)$$

ó, equivalentemente, a

$$\begin{aligned} 0 = & \sin \gamma L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l (\beta R^2) \\ & - (1 - \cos \gamma) \frac{\sqrt{2\beta}}{4z} \left(\frac{4\beta}{\lambda_0 - 2\beta} \right) \left\{ 1 + s \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} R L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1} (\beta R^2) \end{aligned} \quad (2.3.43)$$

Utilizando identidades trigonométricas conocidas podemos escribir a

las anteriores condiciones, equivalentes entre sí, de la siguiente manera:

$$\cot \frac{\gamma}{2} - \frac{\frac{\sqrt{2\beta}}{4z} \left(\frac{4\beta}{\lambda_0 - 2\beta} \right) \left\{ 1 + s \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} R L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} - 1}^{l+1}(\beta R^2)}{L_{\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta}}^l(\beta R^2)} = 0 \quad (2.3.44)$$

Es decir, dado un valor de γ , que corresponde a una de las condiciones de contorno de la familia de condiciones considerada, podemos encontrar los valores de λ_0 que satisfacen la ecuación trascendental (2.3.44). Nótese que la dependencia en λ_0 se da (algebraicamente) no sólo en el coeficiente de esta relación sino también en los *grados* de las funciones generalizadas de Laguerre, lo cual dificulta la obtención analítica del espectro del Hamiltoniano.

Hemos dicho en la Introducción a este Capítulo que interesa determinar la existencia de un gap en muestras de grafeno de tamaño finito, a los efectos de su eventual aplicación práctica. Hemos visto también, en el primer Capítulo de esta tesis, que en presencia de un campo magnético externo perpendicular al plano del material, nuestro modelo efectivo en todo el plano muestra una ruptura de la degeneración de los que serían modos cero en el modelo lineal. Eso nos lleva a considerar la existencia de modos ceros de este problema.

Es decir, debemos verificar la existencia de soluciones no triviales del problema de autovalores de H para $\lambda = 0$ en la ecuación (2.3.17), sometidas a las condiciones de contorno antes obtenidas. Esto es, para λ_0 determinado por

$$0 = 4\beta \left\{ \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right) + \frac{s}{2} \sqrt{1 + 8z^2 \left(\frac{\lambda_0 - 2\beta}{4\beta} \right)} \right\} \quad (2.3.45)$$

es decir, $\lambda_{0,p} = 2\beta (p\sqrt{4z^4 + 1} + 2z^2 + 1)$ con $p = \pm 1$. El valor de λ_0 así determinado debe ser reemplazado en la ecuación (2.3.44) para determinar el valor del parámetro γ que haga de ella una igualdad.

En consecuencia, vemos que sólo una de las condiciones de contorno de la familia considerada presenta un modo cero, de modo que su existencia en el modelo considerado en presencia de un campo magnético externo perpendicular a la muestra no es genérica sino excepcional.

Podemos estudiar numéricamente la condición de contorno (2.3.44) en el caso en que $\lambda = 0$, graficando las funciones en el miembro de la derecha en términos del parámetro γ para valores realistas del radio del disco (nanodot) R , del campo magnético B y para subespacios de momentos angulares específicos.

Vemos que para un nanodot de radio $R = 45nm$ y en presencia de un campo magnético de $B_0 = 10Tesla$ que nuestros parámetros β y z son: $\beta \sim 10^{15}$ y $z = 1385$ [93]. Si además consideramos $s = -p = -1$ y, por ejemplo, los dos primeros momentos angulares $l = 0, 1$ obtenemos los siguientes gráficos:

- para el subespacio con $l = 0$

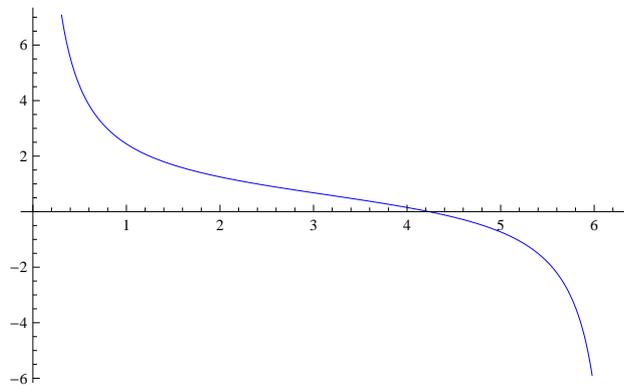


Figura 2.1: Condición de contorno (2.3.44) en el límite $\lambda \rightarrow 0$, para el subespacio de momento angular $l = 0$

En este subespacio encontramos la existencia de un modo cero para nuestro modelo, el cual está dado para un valor determinado de γ

cuyo valor fue hallado a través de métodos numéricos, encontrando que el valor de γ que satisface la condición de contorno en el límite en que λ tiende a 0 es $\gamma = 4.23503$.

- Mientras que en el caso en que $l = 1$

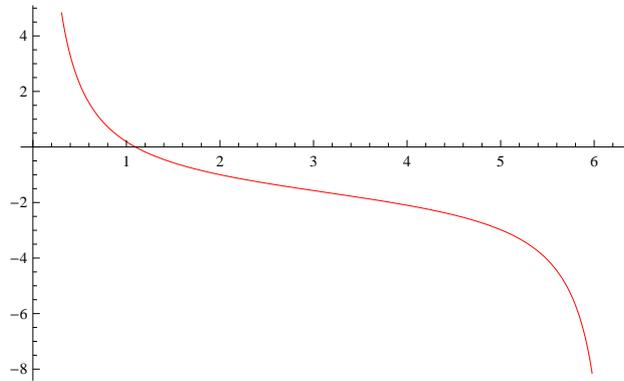


Figura 2.2: Condición de contorno (2.3.44) en el límite $\lambda \rightarrow 0$, para el subespacio de momento angular $l = 1$

En este caso encontramos que para $\gamma = 1.09778$ tenemos un modo cero.

Graficando en simultáneo para estos dos subespacios podemos ver lo siguiente:

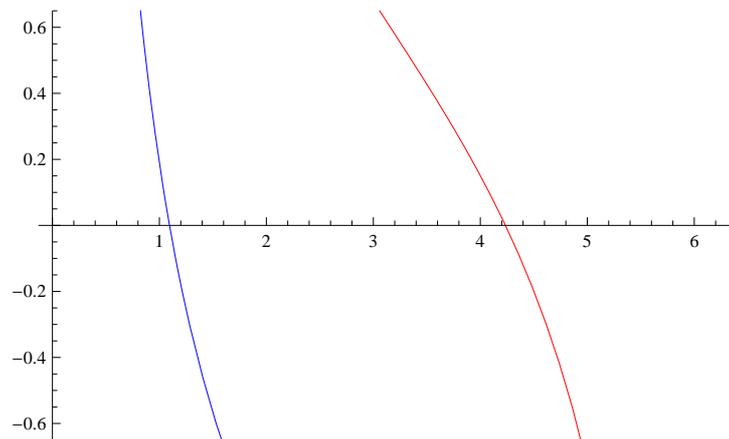


Figura 2.3: Condición de contorno (2.3.44) en el límite $\lambda \rightarrow 0$, para el subespacio de momento angular $l = 0$ y $l = 1$.

Utilizando este análisis extendimos nuestros gráficos a varios valores de l , encontrando los siguientes resultados:

Para los subespacios de momento angular par analizados, $l = 2k, k \in \mathbb{Z}$, hemos encontrado que la condición (2.3.44), para $\lambda = 0$, se satisface para un valor específico de γ dado aproximadamente por $\gamma = 4.23503$, mientras que para subespacios de momento angular impar estudiados, $l = 2k + 1, k \in \mathbb{Z}$, el modo cero aparece aproximadamente para $\gamma = 1.09778$.

En todo caso, hemos encontrado que la existencia de modos ceros no es genérica para las condiciones de contorno consideradas, sino que ocurre sólo para valores particulares del parámetro γ , los que aparentemente dependen de la paridad del momento angular l . Esto sugiere que sería posible establecer estos resultados de manera analítica a partir de las propiedades de las funciones de Laguerre generalizadas, lo que será objeto de estudio en el futuro próximo.

En consecuencia, la aplicación de nuestro modelo efectivo a nanodots de grafeno sugiere que sería posible generar un gap de energías mediante la aplicación de un campo magnético uniforme perpendicular al material, el cual tendría un tamaño controlado por la intensidad de ese campo magnético, y que la aparición de modos cero sería excepcional desde el punto de vista de esta familia de condiciones de borde.

Conclusiones

En esta tesis hemos considerado la construcción de un modelo efectivo para la descripción de las fluctuaciones de baja energía del grafeno y estudiado algunas de sus posibles aplicaciones a diversos problemas de interés relacionados con este nuevo material.

El modelo aquí estudiado ha sido inferido a partir de un Hamiltoniano no relativista para partículas confinadas a evolucionar sobre un plano, el cual es modificado mediante una deformación no abeliana del álgebra de Heisenberg de sus variables dinámicas. En particular, el conmutador de los momentos es transformado de modo que resulte proporcional al *pseudo-spin*, operador que distingue las dos sub-redes triangulares que conforman el cristal del grafeno, en lo que puede ser interpretado como el conmutador de dos derivadas covariantes tras la introducción de un campo magnético externo uniforme no-Abeliano.

Cabe destacar, no obstante, que no se trata de considerar un sistema perturbado por pequeñas correcciones debidas a la no conmutatividad de sus variables dinámicas, sino que esa modificación del álgebra de Heisenberg conduce a un Hamiltoniano que, además de los términos lineales que se emplean usualmente para la descripción de esas excitaciones, agrega (pequeños) términos cuadráticos que simulan la interacción correspondiente a sitios segundos vecinos en el modelo de ligadura fuerte. Este hecho

distingue nuestro modelo efectivo del modelo pseudo relativista de uso común en los estudios sobre este material.

En ese sentido, la modificación introducida en el álgebra de Heisenberg nos conduce a un operador diferencial de segundo orden, que actúa como una matriz de dimensión 2×2 sobre pseudo-espinores y que se reduce a un operador diferencial de primer orden en el límite de grandes masas, correspondiente al modelo pseudo-relativista para los estados de cuasi-momento en las inmediaciones de los puntos de Dirac.

En ese contexto, hemos estudiado primero el modelo *libre*, lo que nos permitió hacer las comparaciones conducentes con el modelo de ligadura fuerte de la Física de la Materia Condensada, para luego considerar el modelo sujeto a la acción de un campo magnético uniformemente constante y perpendicular al plano del material (problema de Landau), permitiéndonos reproducir el efecto Hall cuántico entero anómalo que caracteriza a este material. Finalmente, hemos considerado el comportamiento de este modelo cuando se lo somete a condiciones externas, como la adición de un flujo magnético singular del tipo Bohm-Aharonov en el origen o su limitación a una región compacta del plano. En cada caso hemos estudiado las autofunciones del Hamiltoniano y las propiedades de su espectro.

- Para el modelo libre (ocupando todo el plano y en ausencia de campos externos), hemos evaluado las autofunciones y autovalores del Hamiltoniano y comparado nuestros resultados con los del modelo de ligadura fuerte (tight binding) para este cristal. La comparación de la relación de dispersión obtenida nos ha permitido fijar los valores de los parámetros del modelo. En particular, hemos visto que, a los efectos de reproducir la relación de dispersión alrededor de un punto de Dirac es necesario considerar que el coeficiente del término cuadrático en el momento sea negativo, lo que corresponder a un parámetro de masa negativo.

- Al aplicar un campo magnético uniformemente constante perpendicular al plano del sistema, aquel hecho hace que el espectro de este operador no tenga modos cero (a diferencia de lo que ocurre en el modelo lineal), sino un estado de energía negativa (agujero) ligeramente por debajo del nivel cero, con una energía $\mathcal{E}_0 = -eB/2|m|$. Hemos propuesto completar el modelo incluyendo la contribución de las fluctuaciones alrededor del segundo punto de Dirac mediante la misma transformación unitaria que los liga en el modelo pseudo-relativista (y que restituye la simetría frente a inversión temporal por paridad). Esto hace que el espectro de energías sea la unión del correspondiente al primer punto de Dirac con su reflejado alrededor del origen. En consecuencia, no encontramos aquí la doble degeneración que muestra el modelo lineal, sino en cambio una pequeña diferenciación de las energías de estados próximos, tanto para partículas como para agujeros, del orden $O(w^{-1})$ con $w = \frac{|m|v_F}{\sqrt{eB}} \simeq 10^3$ para valores realistas de los parámetros. En particular, así como aparece un estado de agujero con energía próxima de cero, también aparece un estado de partícula de muy baja energía, $\mathcal{E}'_0 = eB/2|m|$, reflejado del primero alrededor del origen.

El límite $|m| \rightarrow \infty$ reproduce el bien conocido espectro de fermiones de Dirac sin masa doblemente degenerado, con dos modos cero que deben ser interpretados uno como cuasi-partícula y el otro como agujero.

- Para esa configuración, hemos evaluado la conductividad Hall del modelo a partir de la función de partición asociada al lagrangiano efectivo del modelo, para lo cual hemos empleado el formalismo de la función espectral ζ asociada al modelo. Dado que el espectro es discreto y sin un punto de acumulación en el origen (presenta un gap), un desarrollo asintótico de bajas temperaturas conduce a una expresión para el aporte de cada estado a la conductividad transversa. En particular, la existencia de un estado de partícula y otro de agujero muy próximos de cero permite explicar naturalmente

el efecto Hall cuántico entero anómalo, característico del grafeno, en el cual la conductividad Hall (reducida) como función de la energía de Fermi toma valores semienteros. En particular, $\frac{h}{4e^2} \sigma_{xy} = \pm \frac{1}{2}$ para pequeños (pero $|\epsilon_F| > \frac{v_F \sqrt{eB}}{2w}$) niveles de Fermi positivos o negativos, respectivamente. Téngase en cuenta que la diferencia de energía entre pares de estados próximos para valores realistas de los parámetros no permitiría discernir entre ellos en una medida de la conductividad transversa.

- También hemos considerado un término adicional que rompe la simetría rotacional y simula el término cuadrático correspondiente a la contribución sub-dominante de primeros vecinos a la relación de dispersión del modelo de tight-binding, para ser tratado como una perturbación sobre nuestro Hamiltoniano. En presencia de un campo magnético perpendicular, hemos mostrado que este término no modifica al espectro a primer orden en teoría de perturbaciones, ni cambia por tanto la conducta de la conductividad Hall antes descrita. Similarmente, también mostramos que en presencia de un campo eléctrico perpendicular al magnético sólo produce un corrimiento rígido del espectro, al menos a primer orden en teoría de perturbaciones.

Para el modelo sometido a condiciones externas:

- Hemos considerado los efectos que tiene la introducción de un campo magnético uniformemente constante y de un flujo de Aharonov-Bohm por el origen, encontrando que las energías de los estados con momento angular $l \geq 1$ no se ven afectadas por la presencia del flujo singular, contribuyendo entonces al correspondiente nivel de Landau con degeneración infinita con una densidad (en el límite termodinámico) igual a B_0/ϕ_0 . Pero un número finito de estados con $l \leq 0$ (degenerados con los anteriores en ausencia del flujo singular)

se diferencian aumentando su energía (en la misma cantidad) para niveles de partícula y disminuyéndola para niveles de agujero como consecuencia de su interacción con ese flujo. Ese comportamiento es similar al que se manifiesta en el caso normal de partículas escalares, como se muestra en el apéndice.

- También hemos considerado nuestro modelo limitado espacialmente a un disco de radio R y en presencia del campo magnético uniforme. Para una familia de condiciones de contorno que hacen autoadjunto al Hamiltoniano, hemos encontrado que para valores fijos del radio del disco R , del parámetro adimensional z y para cada subespacio de momento angular total definido, la existencia de modos ceros no es genérica sino excepcional, dependiendo del valor de un parámetro γ que especifica la condición de contorno. En consecuencia, y desde el punto de vista de este conjunto de condiciones de borde, existe la posibilidad de inducir un gap de energías mediante la aplicación de un campo magnético perpendicular al disco.

Bibliografía

- [1] Snyder, Hartland S., *Phys.Rev.*, **71**, 38-41, 1947.
Snyder, Harland S., *Phys.Rev.*, **72**, 68-71, 1947.
- [2] Landau, L. D. and Lifschitz, E. M., “*Mecanique Quantique*”, éditions Mir, Moscou (1966), p 496.
- [3] La literatura es basta, para una revisión general:
Douglas, M. R., and Nekrasov, N. A., *Rev. Mod. Phys.*, **73**(4), 977, 2001.
- [4] Connes, A., “*Noncommutative geometry*” Academic Press, London and San Diego (1994).
- [5] Connes, A. and Marcolli, M., *Colloquium Publications, American Mathematical Society*, **55**, 2008.
- [6] Witten, Edward, *Nucl.Phys.*, **B268**, 253, 1986.
- [7] Seiberg, Nathan and Witten, Edward, *JHEP*, **9909**, 032, 1999.
- [8] Hinchliffe, I., Kersting, N., and Ma, Y. L., *Int. J. Mod. Phys. A*, **19**(02), 179-204, 2004.
- [9] Doplicher, S., Fredenhagen, K. and Roberts, J. E., *Commun.Math.Phys.*, **172**,187-220, 1995.

-
- [10] M.A. Rieffel, Proc. Symp. Pure Math., 51, AMS, Providence, 411-423, 1990.
- [11] V. Iftimie, M. Mantoiu, R. Purice, Publ. RIMS. 43 (3), 585-623 (2007).
- [12] M. Mantoiu, R. Purice, J. Math. Phys. 46, 052105 (2005).
- [13] La literatura es extensa; para una lista parcial ver las referencias de [16]
- [14] Omer F. Dayi, Ahmed Jellal, J. Math. Phys. 51 (2010) 063522.
- [15] H. Falomir, J. Gamboa, J. Lopez-Sarrion, F. Méndez and P. Pisani, Phys. Lett., 680, 384 (2009).
- [16] Ashok Das, H. Falomir, M. Nieto, J. Gamboa, F. Mendez, Phys. Rev. D84 (2011) 045002.
- [17] Landau, L. D., Phys. Z. Sowjet Union **11**, 22, 1937.
- [18] Anderson, P. W., Basic Notions of Condensed Matter Physics, Addison-Wesley, Reading, MA, 1997.
- [19] Perkins, D. H., Introduction to High Energy Physics, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2000.
- [20] Linde, A., Particle Physics and Inflationary Cosmology, Harwood Acad. Chur, Switzerland, 1990.
- [21] Collins, J. C., Renormalization, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1984.
- [22] Wilson, K. G. and Kogut, J., Phys. Rep. **12**, 75, 1974.
- [23] Ma, S. K., Modern Theory of Critical Phenomena, 1976.
- [24] Wilson, K. G., rev. Mod. Phys. **47**, 773, 1975.
- [25] Hewson, A. C., The Kondo Problem to Heavy Fermions, Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1993.
- [26] Pound, R. V. and Rebka, G. A., Phys. Rev. Lett. **4**, 337, 1960.

-
- [27] Volovik, G. E., *The Universe in a Helium Droplet*, Clarendon, Oxford, 2003.
- [28] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V. , Jiang D. , Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., and Firsov A. A., *Science* **306** (5696), 666-669, 2004.
- [29] Novoselov, K. S., Geim, A. K., Morozov, S. V., Jiang, D., Katsnelson, M. I., Grigorieva, I. V., Dubonos, S. V. and Firsov, A. A., *Nature*, **438** (7065), 197-200, 2005.
- [30] Zhang, Yuanbo, Tan, Yan-Wen, Stormer, Horst L. and Kim, Philip *Nature*, **438** (7065), 201-204, 2005.
- [31] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* Vol. 81, (2009) 109.
- [32] Vozmediano, M.A.H.; Katsnelson, M. I. and Guinea, F., *Phys. Rep.* **496**, 109-148, 2010.
- [33] Paulin, Linus, "The Nature of the Chemical Bond. An Introduction to Modern Structural Chemistry", 3^o ed., Cornell University Press, Ithaca, USA, 1972.
- [34] Andreoni, W., *The Physics of Fullerene-Based and Fullerene- Related Materials*, Springer, Berlin, 2000.
- [35] Saito R., Dresselhaus, G. and Dresslhaus, M. S., *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London ,1998.
- [36] Charlier, J. C., Blase, X. and Roche, S., *Rev. Mod, Phys.* **79**, 677, 2007.
- [37] Wallace, P. R., 1947, *Phys. Rev.* 71, 622.
- [38] Semenoff Gordon W., *Phys. Rev. Lett.*, **53** (26) 2449-2452, 1984.
- [39] Peierls R. E., *Ann. I. H. Poincare* **5** 177-222, 1935.
- [40] Landau L. D., *Phys. Z. Sowjectunion*, **11**, 26-35, 1937.

-
- [41] Gusynin, V. P. and Sharapov, S. G., *Phys. Rev. Lett.*, **95** (14), 146801, 2005.
- [42] Peres, N. M. R. and Guinea, F. and Castro Neto, A. H., *Phys. Rev. B*, **73** (12), 125411, 2006.
- [43] Calogheracos, A. and Dombey, N. *Contemp. Phys.* **40**, 313, 1999.
- [44] Itzykson, C. and Zuber, J. B., *Quantum Field Theory*, Dover, New York, 2006.
- [45] Meyer, J. C.; Geim, A. K.; Katsnelson, M. I.; Novoselov, K. S.; Obergfell, D.; Roth, S.; Girit, C. and Zettl, A., *Solid State Commun.* **143**, 101, 2007.
- [46] Dunne, G.V.; Jackiw, J. and Trugenberg, C., *Phys. Rev. D* **41**, 661. 1990.
- [47] Westervelt, R. M., *Science* **320**, 324-325, 2008.
- [48] Peres, N. M. R., Castro Neto A. H. and Guinea F., 2006a, *Phys. Rev. B* **73**, 195411.
- [49] Rieffel, M. A., *Proc. Symp. Pure Math.*, 51, AMS, Providence, 411-423, 1990.
- [50] V. Iftimie, M. Mantoiu, R. Purice, *Publ. RIMS.* 43 (3), 585-623 (2007).
- [51] M. Mantoiu, R. Purice, *J. Math. Phys.* 46, 052105 (2005).
- [52] L.S. Brown and W.I. Weisberger, *Nucl.Phys.* B157 (1979) 285.
- [53] C G Beneventano, Paola Giacconi, E M Santangelo and Roberto Soldati, *J. Phys. A: Math. Theor.* 42 275401 (2009).
- [54] Slobodeniuk, A. O.; Sharapov, S. G. and Loktev, V. M., *Phys. Rev. B* **82**, 075316, 2010.
- [55] J. W. McClure, 1956, *Phys. Rev.* 104, 666.
- [56] M.F. Atiyah and I.M. Singer, *Ann. of Math.* 87 (1968) 484. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* 81 (1984) 2597.
- [57] A. N. Redlich, *Phys. Rev. D* 29 (1984) 2369.

-
- [58] von Klitzing, Klaus; Dorda, G Pepper, M. Phys. Rev. Letters **45** (6), 494-497, 1980.
- [59] Haldane, F.D.M. Model for a quantum Hall effect without Landau levels: Condensed-matter realization of the “parity anomaly”. Phys. Rev. Lett. **61**, 2015-2018 (1988).
- [60] Zheng, Y. and Ando, T. Hall conductivity of a two-dimensional graphite system, Phys. Rev. B **65**, 245420 (2002).
- [61] Prange, R.E. and Girvin, S.M. The quantum Hall effect (Springer-Verlag, New York, 1990)
- [62] Macdonald, A.H. Quantum Hall effect: a perspective (Kluwer Academic Publishers, 1990).
- [63] Fradkin, E., “Field Theory of Condensed Matter Systems”, Addison-Wesley Publishing Company, Redwood City, California, USA, 1991.
- [64] Xiao-Gang Wen, “Quantum Field Theory of Many-Body System”, Oxford University Press, Oxford, Great Britain, 2004.
- [65] J.S. Dowker and R. Critchley, Phys. Rev. D **13**, 3224 (1976).
- [66] R.T. Seeley, A.M.S. Proc. Symp. Pure Math. **10**, 288 (1967). Am. Journ. Math. **91**, 889 (1969). Am. Journ. Math. **91**, 963 (1969).
- [67] Mathematica 8.0, Wolfram Research Inc. (2011).
- [68] Sondow, Jonathan and Weisstein, Eric W, “Hurwitz Zeta Function.” From MathWorld—A Wolfram Web Resource. <http://mathworld.wolfram.com/HurwitzZetaFunction.html>
- [69] Elizalde, E. , “Ten Physical Applications of Spectral Zeta Functions”. Lectures Notes in Physics, m.35. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 1995.

-
- [70] M. Abramowitz and I. Stegun editors, "Handbook of Mathematical Functions," 10th. Edition. Dover Publications, New York (1972)
- [71] V. Lukose, R. Shankar, and G. Baskaran, 2007, Phys. Rev. Lett. 98, 116802.
- [72] N. M. R. Peres and E. V. Castro, 2007, J. Phys.: Condens. Matter 19, 406231.
- [73] C G Beneventano, Paola Giacconi, E M Santangelo and Roberto Soldati, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, F435, 2007
- [74] J. Bellissard, A. van Elst, and H. Schulz-Baldes, J. Math. Phys. 35, 5373 (1994).
- [75] Zhang, X., Jiao, K., Sharma, P. and Yakobson, B., J. Mech. Phys. Solids **54**, 2304, 2006.
- [76] Tamura, R. and Tsukada, M., Phys. Rev. B. **49**, 7694, 1994.
- [77] Kobayashi, K., Phys. Rev. B. **61**, 8496, 2000.
- [78] Charlier, J. C. and Rignanese, G. M., Phys. Rev. Lett. **86**, 5970, 2001.
- [79] Khaetskii, A. V., J. Phys.: Cond. Matt. **3**, 5115, 1991.
- [80] Brey, L. and Fertig, H. A., Phys. Rev. B **47**, 15961, 1993.
- [81] Moroz, A., Phys. Rev. A **53**, 669, 1996.
- [82] Desbois, J., Ouvry, S. and Texier, C. Nucl. Phys. B **500**, 486, 1997.
- [83] Weeks, C., Rosenberg, G., Seradjeh, B. and Franz, M., Nat. Phys. **3**, 796, 2007.
- [84] Fialkovsky, I. V. and Vassilevich, D. V., Int. J. Mod. Phys. **A27**, 1260007, 2012.
- [85] Cortijo, A. Guinea, F. and Vozmediano, M.A.H, J.Phys. A: Math. Theor. **45**, 383001, 2012.
- [86] Melinda Y. Han, Barbaros Ozyilmaz, Yuanbo Zhang and Philip Kim, Phys. Rev. Lett. **98**, 206805, 2007.

-
- [87] Yu-Ming Lin, Vassili Perebeinos, Zhihong Chen, Phaedon Avouris, Phys. Rev. B **78**,161409(R), 2008.
- [88] Schnez,S.; Molitor, F.; Stampfer, C.; Güttinger, J.; Shorubalko, I.; Ihn, T. and Ensslin, K., Appl. Phys. Lett. **B94**, 012107, 2009.
- [89] Melinda Y. Han; Juliana C. Brant and Philip Kim, Phys. Rev. Lett. **104**, 056801, 2010.
- [90] Ponomarenko, L. A.; Schedin, F.; Katsnelson, M. I.; Yang, R.; Hill, E. W.; Novoselov, K. S. and Geim, A. K., Science, **320**, 356, 2008.
- [91] Beneventano, C. G. and Santangelo, E. M., Int. J. Mod. Phys: Conf. Ser., **14**, 240, 2012.
- [92] I. S. Gradshteyn and I. M Ryzhik, "Table of Integrals, Series, and Products", 6th. edition. Academic Press, San Diego, USA (2000).
- [93] Falomir H, Gamboa J., Loewe M. and Nieto, M., "Graphene and non-Abelian quatization", J. Phys. A: Math. Theor. **45**, 135308 (2012).
- [94] Jain, J. K., "Composite Fermions", 1st. edition. Cambridge University Press, New York, USA (2007).
- [95] Ederlyi, A., "Higher Transcendental Functions", Bateman Manuscript Project
- [96] M. V. Berry and R.J. Mondragon, Proc. Roy. Soc. Lond. A, 41253 (1987).
- [97] A. Chodos, R. L. Jaffe, K. Johnson, C. B. Thorn and V. F. Weisskopf, Phys. Rev. D **9**, 3471 (1974).